Grundzustandsphasendiagramm des verallgemeinerten Shastry-Sutherland-Modells

Diplomarbeit

vorgelegt von
Carsten Rath

Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Februar 2001

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Schon vor ca. 20 Jahren entdeckten Shastry und Sutherland [1] ein Quantenspinmodell, dessen Hamiltonoperator vom Heisenberg-Typus ist, und dessen quantenmechanischer Grundzustand ($T = 0$) sich in einem gewissen Parameterbereich in zwei und drei Dimensionen *exakt* angeben läßt. Dieses machte damals das Modell aus rein theoretischer Sicht interessant, weil in der Vielteilchentheorie selbst die Grundzustände recht einfacher Modelle oft unbekannt sind. In der Experimentalphysik schien das Modell keine Rolle zu spielen, weil lange Zeit kein Material bekannt war, das eine derartige Kopplungsgeometrie realisiert.

Auf der Suche nach quasi-zweidimensionalen Spinsystemen mit Anregungslücke im Zusammenhang mit der Hochtemperatur-Supraleitung untersuchten Kageyama *et al.* [2] 1999 das Material $SrCu_2(BO_3)_2$, siehe Abb. 1. $SrCu_2(BO_3)_2$ hat eine tetragonale Einheitszelle mit Gitterkonstanten $a = 8.995$ Å und $b = 6.649$ Å bei Raumtemperatur [4]. Die Cu^{2+}-Ionen mit lokalisiertem Spin 1/2 befinden sich auf kristallographisch äquivalenten Plätzen. Das wesentliche an der Kristallstruktur sind die parallelen Ebenen aus CuO_4-Rechtecken und dreieckigen BO_3-Gruppen, wie in Abb. 1 zu sehen ist. Diese Ebenen werden in **c**-Richtung durch Ebenen von Sr^{2+}-Ionen separiert. Die benachbarten Cu^{2+}-Ionen im Abstand von 2.905 Å wechselwirken antiferromagnetisch durch den Superaustausch-Mechanismus indirekt über die O^{2-}-Ionen, und bilden so paarweise *Kupfer-Dimere*. Diese stehen jeweils senkrecht zu den benachbarten Dimeren und wechselwirken mit diesen über die Borat-Gruppen. So entsteht eine Kopplung übernächster Nachbarn im Abstand von 5.132 Å. Kageyama *et al.* entdeckten ein ungewöhnliches Verhalten der magnetischen Suszeptibilität, die in einem Feld von 1.0 T bei ca. 20 K abrupt abfällt, wenn man die Temperatur erniedrigt. Daraus kann man eine Lücke im Anregungsspektrum des Spinsystems vermuten, die sie aus der Cu-NMR-(Kernspinresonanz)Relaxationsrate zu 30 K bestimmten. Diese Messung deutete auch auf einen *Spin-Singulett-Grundzustand* hin.

Miyahara und Ueda [5] gelang es, die experimentellen Daten mit Hilfe des Shastry-Sutherland-Modells konsistent zu beschreiben. Über eine Hochtempe-

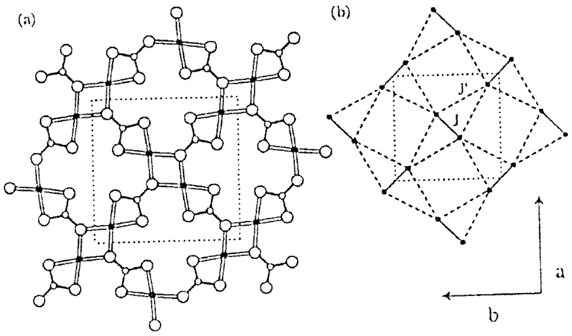

Abbildung 1 *(a) Schematische Sicht der Kristallstruktur von $SrCu_2(BO_3)_2$ längs [001] nach Kageyama et al. [2] (Cu^{2+}: gefüllte Kreise; B^{3+}: kleine Kreise; O^{2-}: große Kreise). Die Elementarzelle ist getrichelt. (b) 2d-Koordinaten der Cu^{2+}-Spins. Dargestellt sind die nächsten und übernächsten Nachbar-Paare J und J'. Dieses Modell ist topologisch äquivalent zum Shastry-Sutherland-Modell.*

ratur-Entwicklung der Spin-Suszeptibilität läßt sich die ebenfalls von Kageyama *et al.* gemessene paramagnetische Curie-Weiss-Konstante von 92.5 K durch den Kopplungsquotienten J'/J ausdrücken. Dieses Verhältnis konnten sie ebenso durch Extrapolation der Anregungslücke aus einer Diagonalisierung endlicher Cluster ausdrücken. Beides zusammen liefert Kopplungsparameter von $J = 100$ K und $J' = 68$ K. Es handelt sich also um einen *stark frustrierten Antiferromagneten.* Desweiteren zeigten sie, daß der Grundzustand in diesem Parameterbereich ein Singulett ist. Genauer handelt es sich um einen Produktzustand aus lokalen Singuletts auf den J-Dimeren. Shastry und Sutherland nannten diesen Zustand eine *Spinflüssigkeit*, weil die Spins nur lokal auf den Dimeren korreliert sind und ihr Spin keine Vorzugsrichtung aufweist. Knetter *et al.* [15] berechneten $J = 6.16(10)$ meV und $J'/J = 0.603(3)$ mit Hilfe der sog. *Flußgleichungsmethode,* auf die ich später zurückkommen werde.

Durch diese experimentelle Realisierung erwachte ein verstärktes Interesse am Shastry-Sutherland-Modell. Dabei wurde insbesondere die Frage nach der Ausdehnung der Spinflüssigkeit oder *Dimer-Phase* im Parameterraum von J'/J diskutiert. Miyahara und Ueda [5] schätzen als erste ab, daß die Dimer-Phase bei $J'/J = 0.70(1)$ in eine antiferromagnetische *Néel-Phase* übergeht. Für sehr große Verhältnisse J'/J reduziert sich das Modell auf ein Spin-1/2-Heisenberg-Modell auf dem Quadratgitter, das ich in Kapitel 2 untersuche. Über dieses Modell weiß man, daß der Néel-Zustand, in dem benachbarte Spins antiparallel stehen, als approximativer Grundzustand geeignet ist, weil der tatsächliche Grundzustand ebenfalls langreichweitig geordnet ist [6–10]. Die vielgestellte Frage ist dann, ob sich zwischen der Dimer-Phase und Néel-Phase weitere Phasen auftun, oder aber schon Miyahara und Ueda das Phasendiagramm qualitativ richtig beschrieben haben [11–16]. Zu einem einheitlichen Bild ist man dabei bisher noch nicht gekommen.

Ich behandele in dieser Diplomarbeit sowohl das herkömmliche Shastry-Sutherland-Modell als auch die von Weihong *et al.* [12] erstmals erwähnte und von Müller-Hartmann *et al.* [14] konsequent umgesetzten Idee eines *verallgemeinerten Modells* mit einer zusätzlichen Kopplung übernächster Nachbarn. Der Vorteil der Verallgemeinerung besteht darin, daß man durch die Gewinnung von *Phasengrenzlinien* in einem zweidimensionalen Phasendiagramm (in Einheiten von J) einen besseren Überblick über die *Phasengrenzpunkte* auf der J'/J-Achse des herkömmlichen Modells bekommt. Ich untersuche insbesondere die Ausdehnung der im klassischen Modell auftretenden sog. *helikalen Phase* im Parameterraum, in der die Spins in einer Gitterrichtung in der Form einer Helix von Platz zu Platz gegeneinander verdreht sind.

Ein naheliegender Ansatz für die an die quantenmechanische Spinflüssigkeit anschließenden Phasen des Modells ist, die exakt bekannten langreichweitigen klassischen Phasen des Modells im Hinblick darauf zu untersuchen, ob sie auch quantenmechanisch stabil sind oder aber lokale Quantenfluktuationen diese Ordnung zerstören. Die *lineare Spinwellentheorie* entwickelt Spin-Fluktuationen in $1/S$ und liefert in vielen Fällen auch noch für $S = 1/2$ gute Ergebnisse. Sie dient mir in meiner Diplomarbeit zur Bestimmung der Phasengrenzen des Grundzustandes

Ebenso benutze ich die lineare Spinwellentheorie als Grundlage einer Extrapolationsmethode für die Resultate einer Reihenentwicklung, der sog. *Flußgleichungsmethode.* Sie geht ursprünglich auf Wegner [17] zurück und wird von mir in der Form von Knetter und Uhrig [18] verwendet. Es handelt sich um eine Methode *kontinuierlicher unitärer Transformationenen* des Hamiltonoperators, die unter bestimmten Voraussetzungen an das System und bei geschickter Wahl des infinitesimalen erzeugenden Operators (*Generator)* der Transformation auf eine Diagonalisierung führt. Wendet man sie auf ein störungstheoretisch formuliertes Problem wie bei Knetter und Uhrig an, so gewinnt man ein rekursives System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung, das sich exakt lösen läßt. Die daraus gewonnenen Entwicklungskoeffizienten eines effektiven Operators können dann für eine ganze Klasse von Hamiltonoperatoren verwendet werden. Ich werde meine Modell-Systeme so umformulieren, daß sie in diese Klasse fallen, so daß ich auf die Ergebnisse von Knetter und Uhrig [18] zurückgreifen kann.

Das Ziel dieser Diplomarbeit ist es, mittels der Flußgleichungsmethode ein möglichst genaues Bild des Grundzustandsphasendiagramms des verallgemeinerten Shastry-Sutherland-Modells zu zeichnen. Dazu orientiere ich mich an den Resultaten der linearen Spinwellentheorie nach Müller-Hartmann *et al.* [14], die dort das Überleben der klassischen Phasen voraussagt. Die von mir in Kapitel 3 durchgeführte lineare Spinwellentheorie ist eine Erweiterung derjenigen in Referenz [14], die ebenfalls auf Müller-Hartmann [39] zurückgeht. Sie hat merkliche Konsequenzen wie etwa das Verschwinden einer ganzen Phase aus dem Modell.

Neben den numerischen Betrachtungen werde ich dort, wo es die Einfachheit des Modells zuläßt, exakte Ergebnisse herleiten. Insbesondere werde ich die Betrachtungen von Shastry und Sutherland [1] über die minimale Ausdehnung der Spinflüssigkeit im Grundzustandsphasendiagramm auf das verallgemeinerte Modell übertragen.

Kapitel 1

Flußgleichungsmethode

1.1 Motivation

Im vorliegenden ersten Kapitel möchte ich die grundlegenden Fragestellungen der Flußgleichungsmethode vorstellen. Als erstes befasse ich mich mit der von Wegner [17] formulierten Idee einer allgemeinen kontinuierlichen unitären Transformation, die Hamiltonoperatoren (block-)diagonalisiert. In den anschließenden Abschnitten 1.3 und 1.4 werde ich systematisch einen auf die hier zu behandelnden Modell-Hamiltonoperatoren zugeschnittenen antihermiteschen Generator entwickeln und eine Verbindung zur Störungstheorie herstellen. Diese Ableitung geht auf Stein, Knetter und Uhrig [18,20] zurück.

1.2 Allgemeine Methodik

Die grundlegende technische Hürde zur Lösung eines quantenmechanischen Problems ist die Diagonalisierung des Modell-Hamiltonoperators. Die uns interessierenden Systeme sind heisenbergartige effektive Vielteichenmodelle, bei denen man sich auf effektive Wechselwirkungen beschränkt, so daß der Hilbertraum lokal endlichdimensional wird. Letztendlich möchte man die physikalischen Eigenschaften des unendlich großen Systems (*thermodynamischer Limes*) wissen. Mit einem störungstheoretischen Ansatz kann man diese Eigenschaften bis zu einer endlichen Ordnung schon in einem endlichen System berechnen. Dazu benötigt man effektive Methoden zur Diagonalisierung. Da es hier kein allgemeines Verfahren gibt, ist man für jede neue Methode dankbar, welche den gerade im Blickpunkt stehenden Hamiltonoperator „diagonaler" macht oder gar vollständig diagonalisiert.

Grundsätzlich ist jeder selbstadjungierte Operator H unitär diagonalisierbar, d.h. es existiert ein unitärer Operator U, so daß $UHU^\dagger$ diagonal ist.

Man kann sich numerische Verfahren vorstellen, die dies schrittweise nach einem bestimmten Konzept tun, so daß mit $U = U_1 \dots U_n$ für eine endliche Schrittzahl n oder im Limes $n \to \infty$ der Hamiltonoperator diagonal wird.

Die Methode nach Wegner [17] benutzt eine *kontinuierliche unitäre Transformation* $U(l)$,

$$H(l) \;:=\; U(l) H U^\dagger(l), \tag{1.1}$$

mit einem positiven reellen *Flußparameter* l. Die $U(l)$ sollen dabei Halbgruppeneigenschaften $U(l + l') = U(l)U(l')$ haben. Das garantiert, daß $U(0)$ die Identität ist. Für eine kontinuierliche Halbgruppe kann man lokal einen *antihermiteschen Generator*

$$\eta(l) \;:=\; \frac{dU}{dl}(l) U^\dagger(l) \tag{1.2}$$

definieren. Dieser erfüllt damit die Differentialgleichung

$$\frac{dU}{dl}(l) \;=\; \eta(l) U(l). \tag{1.3}$$

Differenziert man (1.1) und setzt (1.3) ein, so erhält man leicht die *Flußgleichung*

$$\boxed{\frac{dH}{dl}(l) \;=\; [\eta(l), H(l)].} \tag{1.4}$$

Anschaulich handelt es sich um einen Fluß durch die Observablenalgebra, welcher durch $U(l)$ definiert wird. Für jede Observable A ist dann $A(l) = U(l) A U^\dagger(l)$ eine *Flußlinie.* Mit der Flußgleichung ist $H(l)$ durch eine Differentialgleichung erster Ordnung mit Anfangswert $H(0) = H$ charakterisiert. Bis hierher ist eigentlich noch nicht viel gewonnen, da $U(l)$ bzw. $\eta(l)$ noch nicht spezifiziert ist und nur die anfängliche Transformationsgleichung (1.1) auf Generatorebene umformuliert wurde. Das ist aber ein sinnvoller Ansatz zu einer Lösung des Diagonalisierungsproblems, da man jetzt antihermitesche Generatoren vorgeben und die Änderungsrate von H nach (1.4) berechnen kann. Basisfrei gesprochen möchten man erreichen, daß die Flußlinie, welche von H ausgeht, in einem stabilen Fixpunkt endet und der Hamiltonoperator dort auch noch eine möglichst einfache Form hat.

Das Ziel ist mindestens eine Blockdiagonalisierung, d. h. daß im Limes $l \to \infty$ eine Basis erreicht wird, in deren Darstellung die Matrix des Hamiltonoperators nur aus Blöcken besteht. Die einzelnen Blöcke deuten auf eine

Erhaltungsgröße des effektiven Systems

$$\boxed{H_{\text{eff}} := \lim_{l\to\infty} H(l) \qquad (1.5)}$$

hin. Gleichung (1.4) ist ein geeigneter Ausgangspunkt zum Aufsuchen eines passenden Generators $\eta(l)$, der die gewünschte Entwicklung der Matrixelemente liefert.

Sei nun eine Basis fest gegeben, in der H die Form

$$H(l) = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & h_{12} & h_{13} & \cdots \\ h_{21} & \epsilon_2 & h_{23} & \cdots \\ h_{31} & h_{32} & \epsilon_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \qquad (1.6)$$

hat. Die l-Abhängigkeit steckt hier natürlich in den Matrixelementen. Ich definiere nun den diagonalen Anteil von H in der gewählten Basis als

$$H_d(l) = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \epsilon_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \epsilon_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \qquad (1.7)$$

Wegner [17] wählte ursprünglich den Erzeuger

$$\eta(l) := [H_d(l), H(l)]. \qquad (1.8)$$

In Komponenten bedeutet das (von nun an wird die l-Abhängigkeit unterdrückt)

$$\boxed{\eta_{ij} = (\epsilon_i - \epsilon_j)h_{ij}. \qquad (1.9)}$$

Damit lautet die Flußgleichung (1.4) in dieser Basis

$$\frac{dh_{ij}}{dl} = \sum_k (\epsilon_i + \epsilon_j - 2\epsilon_k) h_{ik} h_{kj}. \qquad (1.10)$$

Ich zeige nun explizit, wie der Ausgangs-Hamiltonoperator „diagonaler“ wird. Zunächst ist die Spur von H^2 konstant, da die Spuroperation unitärinvariant ist. Differenzieren liefert unter Beachtung der Hermitezität von H

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dl}\left(\sum_k \epsilon_k^2 + \sum_{k,i\neq k} h_{ki}h_{ik}\right) \\ &= 2\sum_k \epsilon_k \frac{d\epsilon_k}{dl} + \frac{d}{dl}\sum_{k,i\neq k}|h_{ki}|^2 \\ &\overset{(1.10)}{=} 2\sum_k \epsilon_k \cdot 2\sum_i (\epsilon_k - \epsilon_i)|h_{ki}|^2 + \frac{d}{dl}\sum_{k,i\neq k}|h_{ki}|^2. \end{aligned} \tag{1.11}$$

Damit erhält man nach Umsortierung der Doppelsumme als Beziehung zwischen Diagonal- und Nichtdiagonalelementen

$$\boxed{\frac{d}{dl}\sum_{k,i\neq k}|h_{ki}|^2 = -2\sum_{k,i}(\epsilon_k - \epsilon_i)^2|h_{ki}|^2.} \tag{1.12}$$

Die Summe der Betragsquadrate der Nichtdiagonalelemente ist also monoton fallend. Da sie nach unten beschränkt ist, muß sie konvergieren. Das bedeutet aber insbesondere, daß ihre Ableitung

$$\lim_{l\to\infty}\sum_{k,i}(\epsilon_k - \epsilon_i)^2|h_{ki}|^2 = 0. \tag{1.13}$$

verschwindet. Daraus folgt im einzelnen

$$\boxed{\forall_{k,i}\ \lim_{l\to\infty}(\epsilon_k - \epsilon_i)^2|h_{ki}|^2 = 0} \tag{1.14}$$

Hieran kann man zweierlei ablesen:

- Wegen Gleichung (1.9) gilt $\lim_{l\to\infty}\eta_{ij} = 0$, was die Konvergenz von $H(l)$ sichert. Zudem ist nach Gleichung (1.8) $H_d(\infty)$ eine *Erhaltungsgröße des effektiven Systems* $H(\infty)$, da
$$[H_d(\infty), H_{\text{eff}}] = 0. \tag{1.15}$$
- Nichtdiagonalelemente h_{ki} können im Limes $l \to \infty$ nur dann von Null verschieden sein, wenn die Diagonalelemente, die h_{ki} verbindet, gleich

sind. Sortiert man die Diagonalelemente der Größe nach, so gelangt man zu einer *Blockdiagonalgestalt*. Es bleiben also i. a. Entartungen zurück.

1.3 Banddiagonale Hamiltonoperatoren

Nach dem letzten Abschnitt führt die Wegnersche Wahl des Generators eine beliebige hermitesche Matrix in Blockdiagonalgestalt über. Diese Wahl kann aber im Einzelfall ungünstig sein, nämlich etwa dann, wenn der Hamiltonoperator schon eine diagonalähnliche Gestalt wie eine Bandstruktur

$$h_{ij}(0) \quad = \quad 0 \text{ für } |i-j| > M \tag{1.16}$$

der Breite $2M+1$ hat. Ist man an einer numerischen Umsetzung des Verfahrens interessiert, so möchte man vermeiden, daß in den einzelnen Diagonalisierungsschritten die Komplexität des Systems erhöht wird, indem man unbeabsichtigt neue nichtverschwindende Matrixelemente (*höhere Wechselwirkungen*) erzeugt. Um das zu verhindern, schlug Mielke [19] den antihermiteschen Generator

$$\boxed{\eta_{ij} \quad := \quad \mathrm{sign}(i-j)h_{ij} \qquad (1.17)}$$

vor. Man beachte dabei die Definition $\mathrm{sign}(0) := 0$. Dieser Erzeuger führt mit Gleichung (1.4) auf die Flußgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{dh_{ij}}{dl} \quad &= \quad -\mathrm{sign}(i-j)(h_{ii}-h_{jj})h_{ij} \\ &\quad + \sum_{k\neq i,j}(\mathrm{sign}(i-k)+\mathrm{sign}(j-k))h_{ik}h_{kj} \end{aligned} \tag{1.18}$$

für die nichtdiagonalen Matrixelemente. Aufgrund der Summe der Signum-Funktionen verschwindet auch der zweite Term für $|i-j| > M$, so daß die Bandstruktur erhalten bleibt. Die Flußgleichungen für die Diagonalmatrixelemente lauten

$$\frac{dh_{ii}}{dl} \quad = \quad 2\sum_{k\neq i}\mathrm{sign}(i-k)|h_{ik}|^2. \tag{1.19}$$

Nachdem die Frage nach der Erhaltung der Bandstruktur geklärt ist, muß gezeigt werden, daß der Generator (1.17) den Hamiltonoperator im Laufe des

Flusses tatsächlich vereinfacht. Dazu betrachte man die Summe der ersten r Diagonalelemente. Ihre Ableitung

$$\frac{d}{dl}\sum_{i=1}^{r} h_{ii} \quad = \quad -2\sum_{i=1}^{r}\sum_{k>r}|h_{ik}|^2 \leq 0 \tag{1.20}$$

ist negativ, so daß die Summe monoton fallend ist. Nimmt man an, daß H *nach unten beschränkt* ist, so bildet die Summe der r kleinsten Eigenwerte eine untere Schranke von $\sum_{i=1}^{r} h_{ii}$, wodurch diese Größe zwangsläufig konvergiert. Dann muß im Limes $l \to \infty$ auch ihre Ableitung verschwinden. Deshalb gilt nach Gleichung (1.20)

$$\boxed{\forall_{\substack{i,k \\ i\neq k}} \lim_{l\to\infty} h_{ik} = 0.} \tag{1.21}$$

Wenn aber jedes nichtdiagonale h_{ik} gegen Null konvergiert, muß nach Gleichung (1.18) der Vorfaktor

$$\operatorname{sign}(i-j)(h_{ii}-h_{jj}) \geq 0 \tag{1.22}$$

für hinreichend große l sein. Diese Eigenschaft ist unabhängig davon, ob h_{ik} von oben oder von unten gegen Null geht. Das bedeutet letztendlich, daß für große l die Eigenwerte der Größe nach geordnet sind. Über die neue Wahl des Generators kann man dann zusammenfassend folgendes sagen:

- Der effektive Hamiltonoperator $H(\infty)$ *ist diagonal,* selbst wenn er Entartungen enthält.
- Die Bandstruktur der Ausgangsmatrix $(h_{ij}(0))$ bleibt im Laufe der unitären Transformation erhalten, so daß *keine höheren Wechselwirkungen* hinzugefügt werden.
- Die Eigenwerte sind im Limes $l \to \infty$ der Größe nach *in aufsteigender Reihenfolge geordnet.*
- An Gleichung (1.18) liest man das asymptotische Verhalten für große l ab, sofern die beiden Diagonalelemente verschieden sind:

  $$h_{ij} \propto \exp(-|h_{ii}(\infty) - h_{jj}(\infty)|l).$$

  Liegt eine „Entartung“ vor, so muß man die DGL in höherer Ordnung nähern, und die Asymptotik ist komplizierter.

Besitzt der Hamiltonoperator in einer Basisdarstellung eine banddiagonale Struktur und ist zudem nach unten beschränkt, so ist der Mielkesche Generator dem Wegnerschen vorzuziehen, denn wie wir im letzten Abschnitt gesehen haben, läßt der Wegnersche bei Entartung i. a. Blöcke übrig. Aufgrund von Erhaltungsgrößen wie dem Gesamtspin hat man es aber meist mit Entarteten Niveaus zu tun.

1.4 Flußgleichungen und Störungstheorie

In diesem Abschnitt wenden ich mich der später konkret angewandten Methode zu. Sie besteht darin, die Flußgleichungsmethode speziell auf störungstheoretisch formulierte Probleme

$$H = H_0 + \lambda W \tag{1.23}$$

zuzuschneiden. Sie wurde von Knetter und Uhrig [18] entwickelt und lehnt sich an die Arbeit von Stein [20] an. Sie behandelten mit dieser Methode erfolgreich dimerisierte und frustrierte Spin-1/2-Ketten. Mein Ansinnen gilt echt zweidimensionalen Modellen: Dem *Heisenbergmodell* und dem *Shastry-Sutherland-Modell*, wobei das erstere als Prüfstein für die Methode dient und unser eigentliches Interesse dem letzteren gilt.

An die Operatoren in Gleichung (1.23) stelle ich noch folgende Voraussetzungen:

- H_0 hat ein nach unten beschränktes, äquidistantes Spektrum. Somit kann man ohne Einschränkung $E_\nu = \nu$ für $\nu \in \mathbb{N}_0$ annehmen. Dabei ist ν die Anzahl der Energiequanten.

- Sind U_ν die Eigenräume von H_0 zu den Eigenwerten ν, so hat W die Form

$$\begin{aligned} W &= \sum_{n=-N}^{N} T_n \\ [H_0, T_n] &= n T_n \end{aligned} \tag{1.24}$$

  mit Operatoren $T_n : U_\nu \to U_{\nu+n}$ und für ein festes $N \in \mathbb{N}_0$. Die T_n sind also je nach Vorzeichen Erzeuger oder Vernichter von Energiequanten.

Die Bedingung (1.24) besagt in einer Eigenbasis $(|\nu\rangle)_{\nu\in\mathbb{N}_0}$ von H_0, daß $H = H(\lambda)$ eine ineinander geschachtelte Blockstruktur wie in Abb. 1.1 hat.

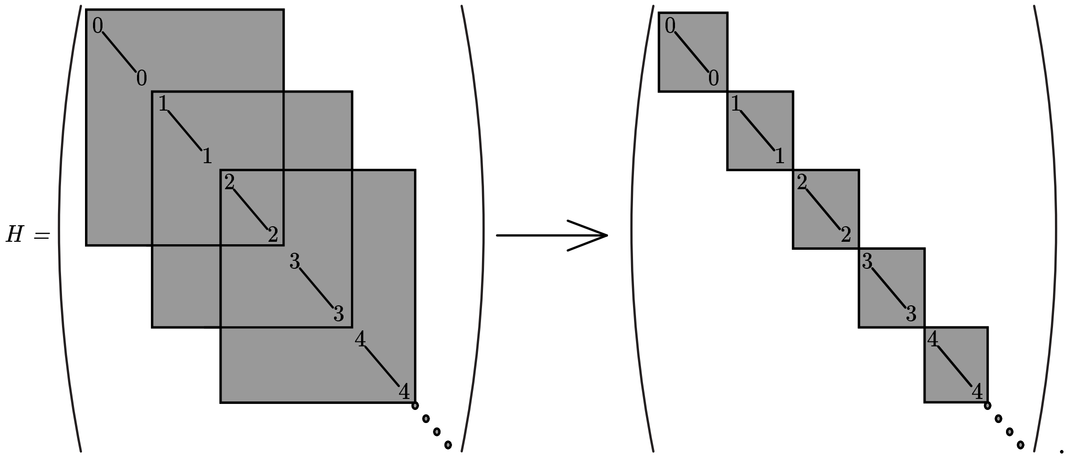

Abbildung 1.1 *Schematische Darstellung der ineinandergeschachtelten Blockstruktur des Ausgangshamiltonoperators und der blockdiagonalisierenden Wirkung der unitären Transformation. Hier überlappen sich nur benachbarte Blöcke ($N = 1$), siehe (1.24).*

In einer Basis seien H_0 und $H(l)$ durch die Matrizen $H_0 = (h^0_{ij})$ und $H = (h_{ij})$ gegeben. Man möchte nun in dieser Basis einen Erzeuger η einer diagonalisierenden unitären Transformation finden. Der transformierte Hamiltonoperator hat formal die Gestalt

$$H(l) = H_0 + \lambda W(l) \tag{1.25}$$

mit dem Anfangswert $H(0) = H$. Als Generator wird mit

$$\boxed{\eta_{ij} := \mathrm{sign}(h^0_{ii} - h^0_{jj})h_{ij} \qquad (1.26)}$$

eine direkte Erweiterung des Mielkeschen Generators aus Gleichung (1.17) gewählt. Dieser vereint beide Vorteile der anderen Generatoren: Er liefert eine Erhaltungsgröße wie in (1.15) und erhält gleichzeitig die Bandstruktur von H_0. Sei von nun an $\mathrm{sign}(0) := 0$. Als Flußgleichungen ergeben sich dann analog zu Gleichung (1.18)

$$\begin{aligned}\frac{dh_{ij}}{dl} &= -\mathrm{sign}(h^0_{ii} - h^0_{jj})(h_{ii} - h_{jj})h_{ij} \\ &\quad + \sum_{k\neq i,j}(\mathrm{sign}(h^0_{ii} - h^0_{kk}) + \mathrm{sign}(h^0_{jj} - h^0_{kk}))h_{ik}h_{kj}.\end{aligned} \tag{1.27}$$

Die anfängliche Bandstruktur bleibt hier ebenfalls erhalten. Die restliche Argumentationskette verläuft ähnlich wie im letzten Abschnitt. Demgemäß betrachtet man die Ableitung

$$\frac{d}{dl}\sum_{i=1}^{r} h_{ii} \quad = \quad 2\sum_{i=1}^{r}\sum_{k>r} \operatorname{sign}(h_{ii}^0 - h_{kk}^0)|h_{ik}|^2 \tag{1.28}$$

der Summe der ersten r Diagonalelemente. Da H_0 transformationsinvariant ist, muß man zu Beginn ($l = 0$) nur die Eigenbasis umordnen, um für $\sum_{i=1}^{r} h_{ii}$ ein monotones Verhalten zu erzwingen. An dieser Stelle muß man noch zusätzlich annehmen, daß $H(0)$ *nach unten beschränkt* ist. Für Hamiltonoperatoren gilt das allgemein, da reale Systeme einen Grundzustand haben sollten. Dann wählen wir die Umordnung so, daß $h_{ii}^0 - h_{kk}^0 \leq 0$ für $i < k$ ist. In diesem Fall kann dann wieder die Summe der r kleinsten Eigenwerte als untere Schranke für $\sum_{i=1}^{r} h_{ii}$ herangezogen werden, weswegen diese Summe konvergiert. Also muß auch hier die Ableitung im Limes $l \to \infty$ verschwinden, und das bedeutet wegen Gleichung (1.28)

$$\boxed{\forall_{\substack{i,k \\ i\neq k}} \lim_{l\to\infty} \operatorname{sign}(h_{ii}^0 - h_{kk}^0)|h_{ik}|^2 = 0. \qquad (1.29)}$$

Hieran kann man wie im Wegnerschen Fall eine Blockdiagonalisierung ablesen. Ebenso folgt mit (1.26)

$$[H_0, H(\infty)] \quad = \quad 0. \tag{1.30}$$

Die Energiequantenanzahl ist demnach eine Erhaltungsgröße. Deswegen sind die Eigenräume von H_0 invariant unter H_{eff}. Aus diesem Grund sind alle nichtentarteten Eigenzustände $|\nu\rangle$ von H_0 auch Eigenzustände von H_{eff}. Im allgemeinen ist der Grundzustand $|0\rangle$ nichtentartet, und wir können seine Energie $E_0(\lambda)$ als Erwartungswert

$$\boxed{E_0(\lambda) \quad = \quad \langle 0|H_{\text{eff}}|0\rangle. \qquad (1.31)}$$

berechnen. Es ist an dieser Stelle ein großer Vorteil der Flußgleichungsmethode, daß im Limes $l \to \infty$ der Grundzustand des effektiven Operators H_{eff} mit dem von H_0 übereinstimmt. So braucht man sich nicht wie in anderen Störungstheorien um die Entwicklung der Eigenzustände zu kümmern.

Nun möchte man den gestörten Hamiltonoperator (1.25) konkretisieren und dadurch eine explizite Formel für $H_{\text{eff}} := H(\infty)$ gewinnen. Für den Störoperator machen wir den *Ansatz*

$$\boxed{W(l) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^{k-1} \sum_{|\mathbf{m}|=k} F(l;\mathbf{m}) T(\mathbf{m}) \qquad (1.32)}$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= (m_1, \ldots, m_k) \text{ für } m_i \in \{-N, \ldots, N\} && (1.33) \\ |\mathbf{m}| &:= k && (1.34) \\ T(\mathbf{m}) &:= T_{m_1} \cdots T_{m_k}. && (1.35) \end{aligned}$$

Die $F(l;\mathbf{m})$ sind reellwertige Funktionen, für die ich mit Hilfe der Flußgleichungen Differentialgleichungen 1. Ordnung ableiten werden, welche sich elementar auf rekursive Weise integrieren lassen. Im folgenden benutze ich ferner

$$[H_0, T(\mathbf{m})] = M(\mathbf{m}) T(\mathbf{m}) \qquad (1.36)$$

mit $M(\mathbf{m}) := \sum_{i=1}^{k} m_i$. Das Operatorprodukt $T(\mathbf{m})$ verbindet also Eigenräume mit $M(\mathbf{m})$ Energiequanten Differenz.

Zunächst wende ich mich dem Generator (1.26) zu. Dieser lautet nach Einsetzen von (1.32) in (1.26)

$$\eta = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^{k} \sum_{|\mathbf{m}|=k} F(l;\mathbf{m}) \operatorname{sign} M(\mathbf{m}) T(\mathbf{m}). \qquad (1.37)$$

Durch Einsetzen in die Flußgleichung (1.4) und Vergleich der Koeffizienten gleicher $T(\mathbf{m})$ erhält man die gewünschte DGL 1. Ordnung für die $F(l;\mathbf{m})$:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{dF}{dl}(l;\mathbf{m}) &= -|M(\mathbf{m})| F(l;\mathbf{m}) && (1.38) \\ &\quad + \sum_{\substack{(\mathbf{m}_1,\mathbf{m}_2)=\mathbf{m} \\ |\mathbf{m}|\geq 2}} (\operatorname{sign} M(\mathbf{m}_1) - \operatorname{sign} M(\mathbf{m}_2)) F(l;\mathbf{m}_1) F(l;\mathbf{m}_2). \end{aligned}}$$

Die Randbedingung $(\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2) = \mathbf{m}$ bedeutet eine Zerlegung des Vektors $\mathbf{m}$

in Teilvektoren

$$\begin{aligned}\mathbf{m}_1 &= (m_1, \dots, m_j) \\ \mathbf{m}_2 &= (m_{j+1}, \dots, m_k) \end{aligned} \qquad (1.39)$$

für $j = 1, \dots, k-1$. Die Anfangsbedingungen ergeben sich aus (1.24) und (1.25) zu

$$F(0;\mathbf{m}) = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad |\mathbf{m}| = 1 \\ 0 & \text{für} \quad |\mathbf{m}| > 1 \end{cases} . \qquad (1.40)$$

Die Differentialgleichung (1.38) ist *rekursiv,* so daß man für die Lösung $F(l;\mathbf{m})$ alle darunter liegenden $F(l;\mathbf{m}')$ mit $M(\mathbf{m}') < k$ benötigt. Der erste Summand in (1.38) liefert eine exponentielle Abhängigkeit, so daß der Separationsansatz

$$F(l;\mathbf{m}) = e^{-|M(\mathbf{m})|l} f(l;\mathbf{m}) \qquad (1.41)$$

eine weitere Vereinfachung ergibt,

$$\begin{aligned}\frac{df}{dl}(l;\mathbf{m}) = & \sum_{\substack{(\mathbf{m}_1,\mathbf{m}_2)=\mathbf{m} \\ |\mathbf{m}|\geq 2}} e^{(|M(\mathbf{m})|-|M(\mathbf{m}_1)|-|M(\mathbf{m}_2)|)l} \\ & \times(\mathrm{sign} M(\mathbf{m}_1) - \mathrm{sign} M(\mathbf{m}_2)) f(l;\mathbf{m}_1) f(l;\mathbf{m}_2). \end{aligned} \qquad (1.42)$$

Die wichtigsten Eigenschaften der Funktionen $F(l;\mathbf{m})$, welche sich induktiv beweisen lassen, seien hier zusammengefaßt (siehe auch Referenz [18]):

- Sie erfüllen die *Symmetrierelationen* ($\widetilde{\mathbf{m}} := (m_k, \dots, m_1)$)

$$\begin{aligned} F(l;-\widetilde{\mathbf{m}}) &= F(l;\mathbf{m}) && (1.43) \\ F(l;-\mathbf{m}) &= (-1)^{|\mathbf{m}|+1} F(l;\mathbf{m}). && (1.44) \end{aligned}$$

- Die Signum-Funktionen in (1.38) bringen die Summe für $|M(\mathbf{m})| > N$ zum Verschwinden, so daß dann auch $F(l;\mathbf{m}) = 0$ gilt. Dies drückt die *Erhaltung der Bandstruktur* aus.

- Die funktionale Form der $f(l;\mathbf{m})$ ist durch

$$f(l;\mathbf{m}) = \sum_{\mu=0}^{\Gamma(\mathbf{m})} P_\mu(l;\mathbf{m}) e^{-2\mu l} \qquad (1.45)$$

gegeben. Die $P_\mu(l;\mathbf{m})$ sind *Polynome in* l *über* $\mathbb{Q}$ vom Grad kleiner oder gleich $|\mathbf{m}|$. Die Summationsgrenze ist durch

$$\Gamma(\mathbf{m}) = \frac{1}{2}\left(-|M(\mathbf{m})| + \sum_{i=1}^{|\mathbf{m}|} |m_i|\right) \tag{1.46}$$

gegeben [20].

- An Gleichung (1.41) liest man ab, daß im Limes $l \to \infty$ nur Terme mit $M(\mathbf{m}) = 0$ übrig bleiben. Das drückt die *Erhaltung der Energiequantenanzahl* für $l \to \infty$ wie schon in Gleichung (1.30) festgestellt aus.

Die Funktionen $F(l;\mathbf{m})$ lassen sich mit Hilfe eines Computers berechnen [18]. Unser eigentliches Interesse gilt aber nur den Grenzwerten

$$C(\mathbf{m}) := \lim_{l\to\infty} F(l;\mathbf{m}) \in \mathbb{Q}. \tag{1.47}$$

Damit läßt sich der effektive Hamitonoperator $H(\infty)$ wie folgt beschreiben:

$$\boxed{H_{\text{eff}} \;=\; H_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{\substack{|\mathbf{m}|=k \\ M(\mathbf{m})=0}} C(\mathbf{m}) T(\mathbf{m}).} \tag{1.48}$$

C. Knetter stellte mir freundlicherweise die Koeffizienten $C(\mathbf{m})$ bis zu $|\mathbf{m}| = 10$ zur Verfügung. Damit können wir in den nächsten Kapiteln Störungsentwicklungen unserer Modell-Hamiltonoperatoren bis zur 10. Ordnung in λ bequem ableiten. Das werden wir aber nicht überall ausnutzen können, da bei zu berechnenden Erwartungswerten $\langle 0|T(\mathbf{m})|0\rangle$ die Gittergröße und die Anzahl von Zustandsparametern niedrigere Grenzen für die technisch (mit Hilfe von Computern) erreichbare Ordnung setzen kann.

Kapitel 2

Heisenberg-Antiferromagnet

2.1 Motivation

Das isotrope antiferromagnetische Heisenberg-Modell auf dem Quadratgitter zählt zu den Standardmodellen des Quantenmagnetismus und ist dementsprechend häufig studiert worden [6–10]. Deshalb liegt über dieses Modell eine Fülle zum Teil sehr präziser numerischer Resultate vor, anhand derer sich die Güte unserer Methode in zwei Dimensionen beurteilen läßt. Aufgrund der relativen Einfachheit des Modells – es besteht nur eine isotrope Kopplung nächster Nachbarn – kann die Flußgleichungsmethode hier bis zu höheren Ordnungen als im verallgemeinerten Shastry-Sutherland-Modell betrieben werden.

Ich betrachte zusätzlich das Modell in linearer Spinwellennäherung, um daraus eine Extrapolationsmethode für das polynomiale Ergebnis der Flußgleichungsmethode zu gewinnen.

2.2 Modell und Flußgleichungsmethode

Das Heisenberg-Modell beschreibt permanente *lokalisierte* magnetische Momente, die über einen direkten oder indirekten Austauschmechanismus wechselwirken. Es ist ein effektives Modell, welches nur die Spinfreiheitsgrade berücksichtigt.

Der Modell-Hamiltonoperator lautet

$$\boxed{H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \qquad (2.1)}$$

Hierbei bezeichnen die $\langle ij \rangle$ Paare nächster Nachbarn auf dem Quadratgitter. Der Grundzustand des korrespondierenden klassischen Systems ist für $J > 0$ néelartig geordnet, so daß benachbarte Spinvektoren antiparallel stehen. Man beachte dabei, daß das Quadratgitter *bipartit* ist. Das bedeutet, daß es sich additiv in zwei ebenfalls quadratische Untergitter A und B zerlegen läßt, so daß jeder Gitterplatz nur von Gitterplätzen des anderen Untergitters benachbart ist, siehe Abb. 2.1. Die Untergitter A, B sind ineinandergeschachtelte Quadratgitter, die gegenüber dem ursprünglichen Gitter um $\pi/4$ gedreht sind. Global gesehen ist im Néel-Zustand jedes Untergitter in einer vorgegebe-

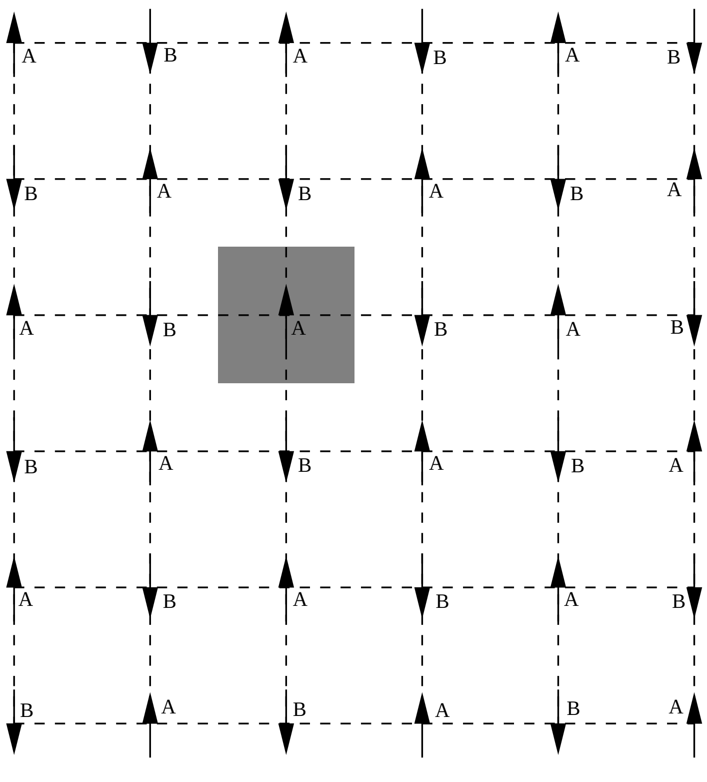

Abbildung 2.1 *Bipartites Quadratgitter mit Untergittern A, B im klassischen Néel-Zustand. Die Elementarzelle ist grau unterlegt.*

nen Richtung (kontinuierliche O(3)-Entartung) voll polarisiert. Als geeigneten Ordnungsparameter führt man deswegen die *Untergittermagnetisierung* ein.

Der exakte Grundzustand des quantenmechanischen Systems ist unbekannt. Das erschwert die Beschreibung des Tieftemperaturverhaltens, da man mangels Kenntnis des Grundzustandes erst recht nicht die Elementaranregungen mit Sicherheit angeben kann. Der klassischen Grundzustand bietet sich jedoch als Ausgangsbasis an, um die Stabilität des Systems gegenüber Quantenfluktuationen zu untersuchen. Als eine von vielen Näherungsmethoden verfolgt die lineare Spinwellentheorie [6–8], auf die ich in einem späteren Abschnitt zurückkommen werde, diesen Ansatz.

Um die Flußgleichungsmethode aus Abschnit 1.4 anwenden zu können, muß man den Hamiltonoperator (2.1) in der Form (1.23) darstellen, so daß die Operatoren H_0 und W die beiden im Anschluß an (1.23) beschriebenen Eigenschaften erfüllen.

Unser erster Schritt besteht darin, die Spinoperatoren in die klassische Richtung zu drehen und dies als Ausgangspunkt unserer Störungsentwicklung zu nehmen. Dementsprechend rotieren wir auf dem Untergitter B derart, daß die Spins zu denen auf dem Untergitter A antiparallel sind. Das erzielt man durch eine lokale Rotation um die x-Achse um den Drehwinkel π, und die gedrehten Spinoperatoren auf dem Untergitter der $j \in B$ lauten

$$\widetilde{S}_j^x = S_j^x \tag{2.2}$$
$$\widetilde{S}_j^y = -S_j^y \tag{2.3}$$
$$\widetilde{S}_j^z = -S_j^z . \tag{2.4}$$

Die Spinoperatoren auf dem Untergitter der $i \in A$ bleiben unverändert.

Für die Spinprodukte im Hamiltonoperator (2.1) auf den Bonds $\langle ij \rangle$ folgt in der neuen Darstellung

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= \widetilde{S}_i^x \widetilde{S}_j^x + \widetilde{S}_i^y (-\widetilde{S}_j^y) + \widetilde{S}_i^z (-\widetilde{S}_j^z) \\ &= \frac{1}{4} \left(\widetilde{S}_i^+ + \widetilde{S}_i^- \right) \left(\widetilde{S}_j^+ + \widetilde{S}_j^- \right) + \frac{1}{4} \left(\widetilde{S}_i^+ - \widetilde{S}_i^- \right) \left(\widetilde{S}_j^+ - \widetilde{S}_j^- \right) - \widetilde{S}_i^z \widetilde{S}_j^z \\ &= \frac{1}{2} \left(\widetilde{S}_i^+ \widetilde{S}_j^+ + \widetilde{S}_i^- \widetilde{S}_j^- \right) - \widetilde{S}_i^z \widetilde{S}_j^z . \end{aligned} \tag{2.5}$$

War der Néel-Zustand vor der Rotation lokal das Produkt $|\uparrow\rangle_i \otimes |\downarrow\rangle_j$, so lautet er nun in den neuen lokalen Koordinaten

$$|\Uparrow\rangle = \bigotimes_{i=1}^{N} |\uparrow\rangle_i , \tag{2.6}$$

ist also von „ferromagnetischer“Gestalt.

Die gewünschte Aufteilung des Hamiltonoperators wie in (1.23) und (1.24) gelingt mit der Aufspaltung

$$\boxed{\widetilde{S}_i^z \widetilde{S}_j^z = \left(\widetilde{S}_i^z - \frac{1}{2}\right)\left(\widetilde{S}_j^z - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\left(\widetilde{S}_i^z + \widetilde{S}_j^z\right) - \frac{1}{4}. \qquad (2.7)}$$

der Paar-Spinprodukte. Damit ergibt sich unter der Beachtung, daß jeder Spin auf dem Quadratgitter vier nächste Nachbarn hat, der Hamiltonoperator

$$\boxed{H = E_{\mathrm{kl}} + 2J(H_0 + T_{-2} + T_0 + T_2) \qquad (2.8)}$$

mit

$$E_{\mathrm{kl}} = -\frac{JN}{2} \tag{2.9}$$

$$H_0 := \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{1}{2} - \widetilde{S}_i^z\right) \tag{2.10}$$

$$T_2 := \frac{1}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \widetilde{S}_i^- \widetilde{S}_j^- \tag{2.11}$$

$$T_{-2} := \frac{1}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \widetilde{S}_i^+ \widetilde{S}_j^+ = T_2^\dagger \tag{2.12}$$

$$T_0 := -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \left(\widetilde{S}_i^z - \frac{1}{2}\right)\left(\widetilde{S}_j^z - \frac{1}{2}\right). \tag{2.13}$$

Nun entspricht gerade der Operator

$$\widetilde{H} := H_0 + T_{-2} + T_0 + T_2 = \frac{H - E_{\mathrm{kl}}}{2J} \tag{2.14}$$

den notwendigen Voraussetzung wie in Abschnitt 1.4 beschrieben und ist ein geeigneter Ausgangspunkt für die Flußgleichungsmethode, denn

- H_0 besitzt ein äquidistantes, nach unten beschränktes Spektrum, hier speziell $E_\nu = \nu$ für $\nu = 0, \ldots, N$. Insbesondere ist $|\Uparrow\rangle$ der *nichtentartete Grundzustand* von H_0.

- Der Störoperator $T_{-2}+T_0+T_2$ ist eine endliche Summe von Operatoren, welche zwischen verschiedenen Eigenräumen von H_0 abbildet, so daß

$$[H_0, T_n] = nT_n \text{ für } n = -2, 0, 2. \tag{2.15}$$

Die Störung schalte ich mittels eines reellen Parameters λ ein,

$$\widetilde{H}(\lambda) \quad := \quad H_0 + \lambda(T_{-2} + T_0 + T_2), \tag{2.16}$$

welcher als *Anisotropieparameter* interpretiert werden kann. Diese Definition liefert den Zusammenhang $\widetilde{H} = \widetilde{H}(1)$ zwischen $\widetilde{H}$ und $\widetilde{H}(\lambda)$. Mit Gleichung (2.14) definiert man natürlicherweise

$$H(\lambda) := E_{\text{kl}} + 2J\widetilde{H}(\lambda), \tag{2.17}$$

und erhält auch hier $H = H(1)$.

Die in Abschnitt 1.4 beschriebene unitären Transformation liefert nun den effektiven Hamilton-Operator

$$\boxed{H_{\text{eff}}(\lambda) \quad = \quad E_{\text{kl}} + H_0 + 2J\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{\substack{|\mathbf{m}|=k \\ M(\mathbf{m})=0}} C(\mathbf{m})T(\mathbf{m}). \qquad (2.18)}$$

Die Operatoren H_{eff} und $H_{\text{eff}}(\lambda)$ sind ebenfalls durch $H_{\text{eff}} = H_{\text{eff}}(1)$ verbunden. Der Grundzustand $|\uparrow\rangle$ von H_0 ist nach Abschnitt 1.4 auch der von $H_{\text{eff}}(\lambda)$, da die Grundzustandsenergie von H_0 nichtentartet ist. Die Grundzustandsenergie von $H(\lambda)$ lautet deswegen

$$\boxed{E_0(\lambda) \quad = \quad E_{\text{kl}} + 2J\sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{\substack{|\mathbf{m}|=k \\ M(\mathbf{m})=0}} C(\mathbf{m})\langle\uparrow|T(\mathbf{m})|\uparrow\rangle. \qquad (2.19)}$$

Mithilfe dieser Formel werde ich die Grundzustandsenergie berechnen. Vorher erläutere ich das wichtige Linked-Cluster-Theorem, das für diese Berechnung eine große Vereinfachung liefert.

2.3 Linked-Cluster-Theorem

Bei der Berechnung der Grundzustandsenergie (2.19) in der jeweiligen Ordnung in λ ist das Linked-Cluster-Theorem, wie es in Referenz [22] beschrieben wird, von entscheidender Bedeutung. Es liefert, wie nachfolgend skizziert, die Möglichkeit, die Erwartungswerte $\langle\uparrow|T(\mathbf{m})|\uparrow\rangle$ in k-ter Ordnung auf einem endlich großen Gittersegment auszurechnen. Dadurch wird es möglich, die Grundzustandsenergie numerisch bis zu hohen Ordnungen thermodynamisch zu bestimmen.

Der Hamiltonoperator (2.17) ist eine Summe *lokaler Wechselwirkungsterme*

$$\widetilde{H}(\lambda) - H_0 = \sum_{\langle ij\rangle} h_{ij}, \tag{2.20}$$

da nur nächste Nachbarn wechselwirken. Die sich hier anschließende Argumentation gilt auch für kompliziertere Wechselwirkungen wie im später beschriebenen Shastry-Sutherland-Modell. Entscheidend ist die Lokalität.

Die Hauptidee besteht darin, jedem einzelnen Summanden h_{ij} einen eigenen Störungsparameter λ_{ij} anzuheften. Das dient dem Zweck, in einer späteren Reihenentwicklung den Beitrag eines bestimmten Bonds $\langle ij\rangle$ zu identifizieren, um ihn graphisch darzustellen. Unter diesem Aspekt betrachte man noch einmal die Reihenentwicklung (2.18). Sie lautet jetzt formal für den Erwartungswert

$$\langle\uparrow|H_{\text{eff}}(\lambda)|\uparrow\rangle - E_{\text{kl}} = \sum_{n_{ij}} p(n_{ij}) \prod_{\langle ij\rangle} \lambda_{ij}^{n_{ij}}. \tag{2.21}$$

Dabei ist $n_{ij} \in \mathbb{N}_0$, und die $p(n_{ij})$ sind reelle Gewichte. Nun wird die Summe (2.21) umsortiert. Dazu faßt man alle Summanden, in denen genau dieselben Bonds $\langle ij\rangle$ mindestens einmal vorkommen, zu einem *Clusterbeitrag* $W(C)$ zusammen. Es kann dabei auch innerhalb eines Produktes ein Bond-Faktor λ_{ij} mehrmals vorkommen. Die Bonds, welche zu einem Clusterbeitrag $W(C)$ gehören, kann man auf dem Quadratgitter als geometrische Figur wie in Abb. 2.2 visualisieren.

Damit kann man die *Cluster-Entwicklung*

$$\boxed{E_0(\lambda) - E_{\text{kl}} = \sum_{C} W(C)} \tag{2.22}$$

formulieren. Die verschiedenen λ_{ij} sind nun nicht mehr nötig. Sie dienten hauptsächlich der Definition der Gewichte $W(C)$. Von nun an seien sie alle gleich λ. Das kann zur Folge haben, daß sehr viel Beiträge, die von verschiedenen Clustern kommen, gleich sind. Gehen verschiedene Cluster C, C' durch

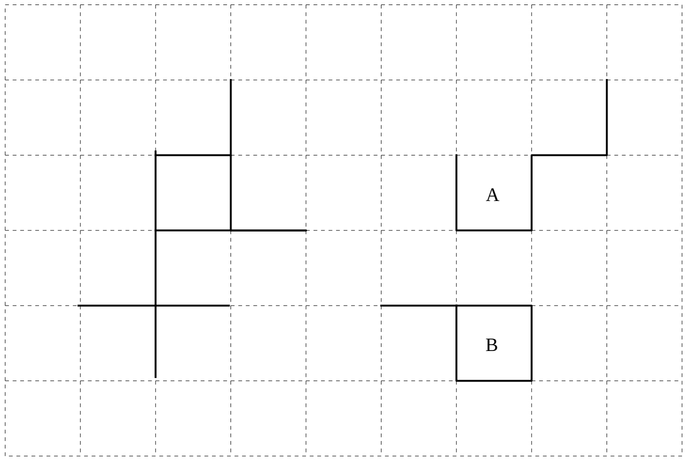

Abbildung 2.2 *Beispiele eines zusammenhängenden (links) und eines aus zwei zusammenhängenden Teilen A, B bestehenden Clusters. Nur der zusammenhängende Cluster kann einen thermodynamischen Beitrag zur Grundzustandsenergie liefern. Das folgt aus der Additivität der Energie.*

eine Symmetrieoperation S (Translation, Rotation und Spiegelung) auseinander hervor, so bedeutet das für die den Clustern zugeordneten Anteile des effektiven Hamiltonoperators $\widehat{W}(C), \widehat{W}(C')$, daß

$$\widehat{W}(C') = U_S \widehat{W}(C) U_S^\dagger \tag{2.23}$$

wenn U_S die S zugeordnete unitäre Dartstellung ist. Wird der Néel-Zustand invariant gelassen,

$$U_S^\dagger |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle, \tag{2.24}$$

so liefern $\widehat{W}(C)$ und $\widehat{W}(C')$ denselben Beitrag zur Energie, denn

$$\langle\uparrow|\widehat{W}(C')|\uparrow\rangle = \langle\uparrow|U_S \widehat{W}(C) U_S^\dagger|\uparrow\rangle = \langle\uparrow|\widehat{W}(C)|\uparrow\rangle. \tag{2.25}$$

Solche Cluster faßt man zu einem *Graphen* G zusammen, der damit eine Äquivalenzklasse von Clustern ist. Der Néel-Zustand hat hier die *volle Gittertranslationsinvarianz*. Man erinnere sich daran, daß auf dem Untergitter B die Spins umgeklappt sind. Deswegen ist der Néel-Zustand homogen, wie es auf der rechten Seite von Gleichung (2.6) zu erkennen ist.

Für die Graphen G definiert man nun sog. Gitterkonstanten $L(G)$. Sie sind gleich der Anzahl der äquivalenten Cluster des Graphen pro Gitterplatz im unendlich großen Gitter. Damit kann man die Energiedichte

$$\boxed{(E_0(\lambda) - E_{\mathrm{kl}})/N = \sum_G L(G)W(G) \qquad (2.26)}$$

im *thermodynamischen Limes* ausdrücken.

Zunächst erscheint diese Ableitung recht formal und wenig gewinnbringend. Das nützliche an einer Clusterentwicklung ist ihre anschauliche Systematik. Nach Konstruktion liefert nämlich ein Graph aus k Elementen (Bonds) einen Beitrag von mindestens k-ter Ordnung. So benötigt man zur Berechnung etwa der Grundzustandsenergie bis zur k-ten Ordnung nur die Graphen bis einschließlich der Ordnung k.

Auf einem unendlichen Gitter wäre das immer noch sehr mühsam. Man hat jetzt aber den geeigneten Formalismus entwickelt um zu erkennen, warum nur *zusammenhängende Graphen* zur Energiedichte beitragen. Die Energie ist eine additive Größe. Läßt sich ein Cluster C in zwei disjunkte Teilcluster A, B additiv zerlegen, so muß auch

$$\langle \uparrow | H_{\mathrm{eff}}(C) | \uparrow \rangle = \langle \uparrow | H_{\mathrm{eff}}(A) | \uparrow \rangle + \langle \uparrow | H_{\mathrm{eff}}(B) | \uparrow \rangle \qquad (2.27)$$

gelten. In der Entwicklung (2.21) kann es dann aber auf der rechten Seite kein Produkt geben, das λ_{ij} für alle $\langle ij \rangle \in C$ enthält, da wir solche Terme nach (2.27) immer als Summe von Termen disjunkter Cluster schreiben können. Folglich gilt

$$\boxed{W(C) = 0 \qquad (2.28)}$$

für alle disjunkt zerlegbaren Cluster.

Alle zu berücksichtigenden Graphen in der Entwicklung (2.26), die einen nichtverschwindenden Beitrag liefern sollen, müssen also zusammenhängend sein. Dieser Sachverhalt hat nun eine weitreichende Konsequenz. In k-ter Ordnung besteht ein Graph aus höchstens k verschiedenen Bonds. Wenn er zusammenhängend ist, muß er auch beschränkt sein. Also genügt zur Berechnung eines Graphenbeitrages zur Energiedichte ein *endliches Gittersegment.* Bei den numerischen Berechnungen in dieser Diplomarbeit nutze ich das Linked-Cluster-Theorem wie nachfolgend beschrieben.

Der jeweils betrachtete Grundzustand $|\uparrow\rangle$ – ob auf dem Quadratgitter oder später auf dem Shastry-Sutherland-Gitter – ist invariant gegenüber Gittertranslationen *(Homogenität).* Nach Gleichung (2.25) sind dann die durch solche Translationen verbundenen Clusterbeiträge gleich. Nun pflastert man das Gitter mit gleichartigen Segmenten, in die jeweils alle Cluster der betrachteten Ordnung hineinpassen (siehe Abb. 2.4). Wegen der Äquivalenz der Clusterbeiträge in verschiedenen Segmenten muß man diese Beiträge nur einmal auf einem ausgewählten Segment ausrechnen, wenn man dort *periodische Randbedingungen* einführt (siehe Abb. 2.6). So bekommt man den richtigen Beitrag zur thermodynamischen Dichte. Ohne diese Randbedingungen würde man Cluster, die über den Rand des ausgewählten Segmentes hinausreichen, einfach abschneiden (*Randeffekte).* Durch die periodische Schließung kommen sie auf der gegenüberliegenden Seite wieder in das Segment hinein und werden so topologisch dem unendlichen Gitter äquivalent dargestellt. Bei der Auswahl der Parkettierung des Gitters ist zu beachten, daß die Pflaster groß genug sind und es nicht etwa möglich ist, einen im unendlichen Gitter „offenen“ Cluster durch die periodische Schließung selbst mitzuschließen *(Umrundungseffekt),* wie das in Abb. 2.3 für ein eindimensionales Beispiel (Spinkette) illustriert wird.

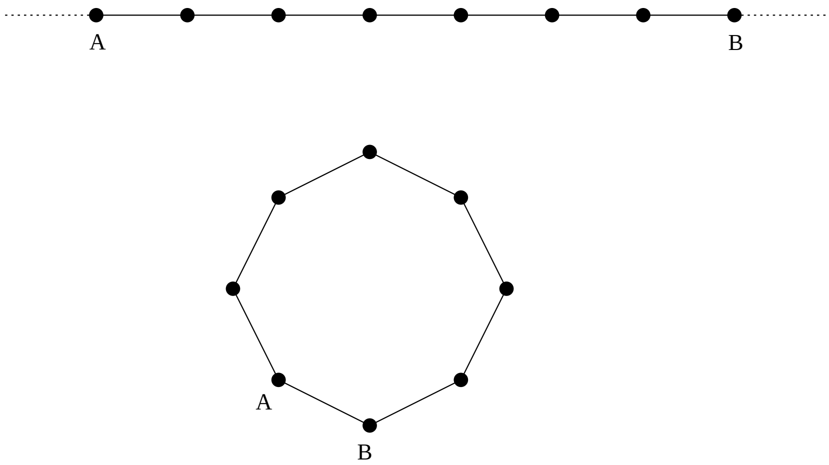

Abbildung 2.3 *Eindimensionales Beispiel eines Clusters aus sieben Bonds. Würde man den Cluster des unendlich großen Gitters (oben), in dem die Teilchen A und B keine direkte Kopplung haben, in ein periodisch geschlossenes Gittersegment (unten) zu geringer Größe hineinzwängen, so hätte man illegalerweise eine nicht vorhandene Wechselwirkung zwischen A und B erzeugt.*

Das Fazit diese Abschnitts ist, daß man für eine feste Ordnung k der Störungsreihenentwicklung die Grundzustandsenergiedichte auf einem endlichen Gittersegment mit periodischen Randbedingungen berechnen kann, wenn man dieses groß genug wählt.

2.4 Implementierung der Flußgleichungsmethode

Das Ziel der Implementierung ist es, die Formel (2.19) in einem möglichst effektiven Algorithmus umzusetzen, da man in der Störungsrechnung zur besseren Verläßlichkeit der Ergebnisse eine bei gegebenen Computer-Resourcen maximale Ordnung erreichen will. Ein grundlegendes Problem ist, daß die benötigte Größe des Gittersegmentes bzw. die Anzahl N der Gitterplätze mit der Ordnung quadratisch anwächst, und die Dimension des Zustandsraumes für Spin 1/2 sogar exponentiell wie 2^N ansteigt. Deshalb sollte man große Mühe darauf verwenden, das Gittersegment so klein wie möglich zu halten.

Das für eine feste Ordnung k benutzte Gittersegment muß den größtmöglichen Graphen in dieser Ordnung aufnehmen können. Dieser besteht aus k Bonds. Man kommt nun zu einer günstigen, d. h. möglichst kleinen Form des Gittersegmentes, wenn man sich zunächst die Graphen mit der größten Ausdehnung aufzeichnet. Diese bestehen auf dem Quadratgitter aus einer Linie oder Treppe. Zeichnet man sie gemeinsam in ein Gittersegment, wobei man die Schwerpunkte aufeinander legt, so resultiert daraus dasjenige Gittersegment, auf dem man mit kleinstem Aufwand alle Clusterbeiträge in k Ordnung berechnen kann, siehe Abb. 2.4. Legt man das ganze Gitter mit

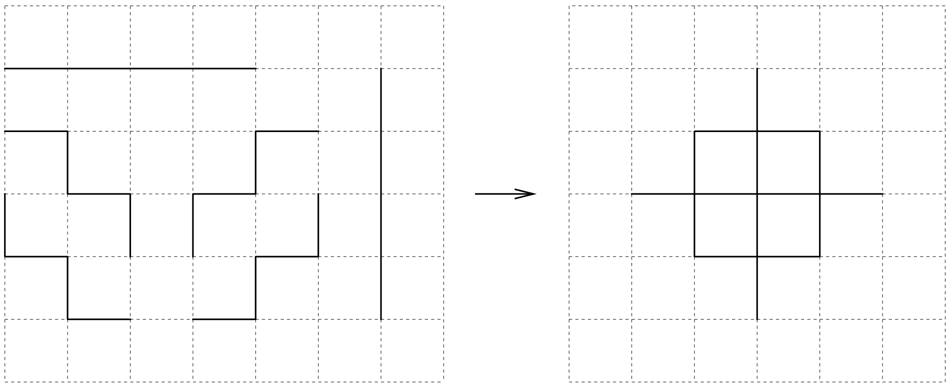

Abbildung 2.4 *Graphen maximaler Ausdehnung in 4. Ordnung. Fügt man ihre Schwerpunkte zusammen, so ergibt sich ein sehr kleines Gittersegment, auf dem man gemeinsam alle Graphenbeiträge zur Grundzustandsenergie bis zur 4. Ordnung ausrechnen kann. Es hat die Gestalt einer Raute.*

diesen *Rauten* wie in Abb. 2.5 aus, so kann man die periodischen Randbedingungen eines ausgewählten Segmentes ablesen. Die periodische Schließung etwa der mittleren Raute erfolgt dadurch, daß man von einem Randpunkt aus

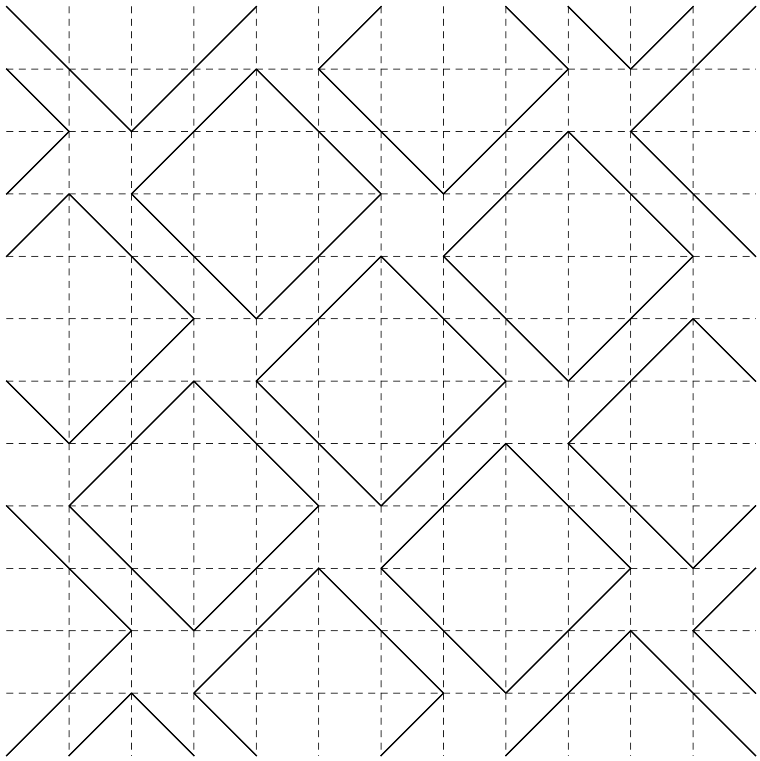

Abbildung 2.5 *Pflasterung des Gitters mit Rauten. Dadurch ergeben sich die periodischen Randbedingungen für die Rauten, die als Gittersegmente zur Berechnung der Clusterbeiträge dienen.*

im unendlichen Gitter zur benachbarten Raute übergeht und diesen Punkt mit dem entsprechenden der mittleren Raute identifiziert.

Topologisch machen die periodischen Randbedingungen aus der Raute einen *Torus,* da gegenüberliegende Seiten „verklebt“ werden.

Die elementare Kodierung der Zustände erfolgt in einem Bit pro Gitterplatz, da dies für Spin 1/2 ausreichend ist („Ising-Basis“). Den entsprechenden Basis-Produktzustand des Gittersegmentes, auf dem man rechnet, erhält man durch Hintereinanderreihung solcher Einteilchen-Basiszustände zu einen `unsigned short`, `unsigned` oder `unsigned long long`, je nachdem wie groß das ausgewählte Gittersegment ist. Diese Größe kann man direkt als Funktion der Ordnung ausrechnen. In k-ter Ordnung muß die Raute k Bonds hoch und breit sein. Das sind jeweils $k+1$ Spins bzw. Gitterplätze.

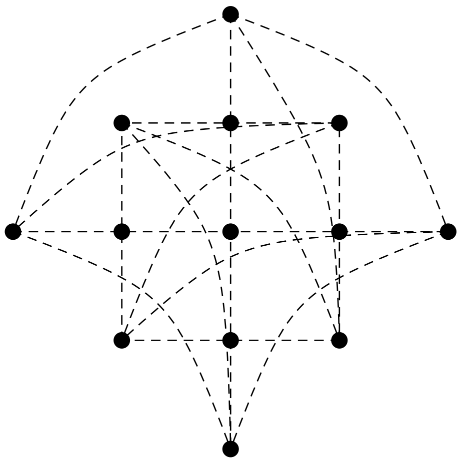

Abbildung 2.6 *Periodisch geschlossenes Gittersegment. Die gestrichelten Bonds dienen der periodischen Schließung nach Abb. 2.5. Das Resultat ist topologisch ein Torus.*

Summiert man alle Zeilen auf, so erhält man eine Teilchenzahl von

$$\boxed{N = \frac{(k+1)^2+1}{2}} \tag{2.29}$$

Da die Koeffizienten $C(\mathbf{m})$ bis zur 10. Ordnung vorliegen [18], hat man es mit maximal 61 Gitterplätzen zu tun, die man in einem `unsigned long long` (64 Bit) kodieren kann.

Die Basiszustände bilden mit geeigneten Vorfaktoren ein Basisobjekt der Klasse `Summand`. Diese enthalten auch Zeiger auf selbige Objekte, um aus ihnen einfach verkettete Listen zusammenzufügen. Startzustand ist die in der oben beschriebenen Kodierung den Néel-Zustand $|\uparrow\rangle$ dartstellende Zahl Null. Darauf wendet man ein Operatorprodukt $T(\mathbf{m})$ an, z. B. $T_{-2}T_0T_2$. Dadurch entstehen angeregte Zwischenzustände. Sie sind Linearkombinationen der Basiszustände und werden deshalb durch Listen von diesen dargestellt. Da man wegen der Teichenzahlerhaltung $-2+0+2=0$ nach Abschnitt 1.4 wieder beim Grundzustand herauskommt, werden die dabei entstandenen Zwischenzustände *virtuell* genannt.

Die Operatoren T_n wirken in ihren einzelnen Summanden ausschließlich lokal, so daß sie auch genauso implementiert werden. Um den lokalen Zustand abzufragen, werden die betroffenen Gitterplatzzustände via *Bitshift* auf das erste und zweite Bit von rechts gesehen geschoben. Die Zustände sind dann wie folgt kodiert:

$$\begin{aligned}|\uparrow\rangle_i \otimes |\uparrow\rangle_j &= 0\\ |\uparrow\rangle_i \otimes |\downarrow\rangle_j &= 1\\ |\downarrow\rangle_i \otimes |\uparrow\rangle_j &= 2\\ |\downarrow\rangle_i \otimes |\downarrow\rangle_j &= 3.\end{aligned} \tag{2.30}$$

Die lokale Wirkungsweise der Störungsoperatoren in der Basis $(0,1,2,3)$ ist dann

$$\widetilde{S}_i^- \widetilde{S}_j^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.31}$$

$$\widetilde{S}_i^+ \widetilde{S}_j^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.32}$$

$$\left(\widetilde{S}_i^z - \frac{1}{2}\right)\left(\widetilde{S}_j^z - \frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.33}$$

Die einzelnen Bestandteile der T_n können demnach so skaliert werden, daß die Vorfaktoren nur ganzzahlig anstatt rational sein mußen.

Die Bonds werden in einer Matrix kodiert. Man durchläuft hier mit dem Zeilenindex alle vorhandenen Gitterplätze und schreibt in die jeweilige Zeile die nächsten Nachbarn „rechts“ und „unten“. Auf diese Art erhält man jeden NN-Bond des Quadratgitters genau einmal und hat dabei den Vorteil, die ausgehenden Gitterplätze nur implizit in dieser *Adjazenz-Matrix* vom Typ $N \times 2$ aufgeführt zu haben. Diese sparsame Vorgehensweise ist wichtig, da in k-ter Ordnung pro einzelnem Erwartungswert $(2N)^k$ mal (also für $k = 10$ etwa $7 \cdot 10^{20}$ mal!) ein Bond abgefragt wird.

Um einen der Störoperatoren vollständig auszuführen, werden die oben beschriebenen Elementaroperatoren in einer Doppelschleife, welche die Adjazenzmatrix durchläuft, auf den aktuellen Zustand angewendet. Liegt das Ergebnis in Form einer Liste von Basiszuständen samt Vorfaktoren vor, so wird diese mittels des *Quicksort-Algorithmus* nach Basiszuständen in aufsteigender Reihenfolge sortiert und zusammengefaßt. Die Möglichkeit der Einsparung sowohl an RAM als auch an Laufzeit ist enorm, da die Anregungen in einem virtuellen Zwischenzustand in beliebiger Reihenfolge entstanden sein können.

Die so berechneten Erwartungswerte $\langle\uparrow|T(\mathbf{m})|\uparrow\rangle$ werden dann mit den $C(\mathbf{m})$ multipliziert und in der jeweiligen Ordnung aufaddiert. Den letzten Schritt erledigt der Einfachheit halber das Computeralgebra-Programm *Maple*, da hier rationale Zahlen addiert und vollständig gekürzt werden müssen. Die Daten werden vom Programm während der Laufzeit mit Hilfe einer unter dem Betriebssystem Unix angelegten sog. *pipe* geliefert und von Maple zwischengespeichert. Die aktuellen Ausgangsdaten $T(\mathbf{m})$ und zugehörige $C(\mathbf{m})$ werden aus einer Datei gelesen, welche mir freundlicherweise C. Knetter zur Verfügung stellte.

Die Homogenität des Grundzustandes erlaubt es, in dem periodisch geschlossenen Gittersegment in Abb. 2.6 die Rechnung weiter zu vereinfachen. Sei P das betrachtete Segment, dann läßt es sich durch Translationen $\mathbf{r} \in M \subset \mathbb{Z}^2$ einer ausgewählten Elementarzelle $Z_O = \{p_0\}$ (siehe Abb. 2.1) beschreiben,

$$P = \sum_{\mathbf{r}\in M} Z_{O+\mathbf{r}} \tag{2.34}$$

Nimmt man sich in Gleichung (2.19) einen Beitrag

$$\langle\uparrow|T(\mathbf{m})|\uparrow\rangle \quad = \quad \langle\uparrow|T_{m_1}\cdots T_{m_k}|\uparrow\rangle \tag{2.35}$$

heraus, so entsteht der Operator T_{m_k} durch Translation des Anteils $\mathcal{T}_O$ der ausgewählten Elementarzelle,

$$T_{m_k} = \sum_{\mathbf{r}\in M} \mathcal{T}_{O+\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{r}\in M} U_{\mathbf{r}} \mathcal{T}_O. \tag{2.36}$$

Damit erhält man zunächst

$$\langle\uparrow|T_{m_1}\cdots T_{m_k}|\uparrow\rangle \quad = \quad \sum_{\mathbf{r}\in M} \langle\uparrow|T_{m_1}\cdots T_{m_{k-1}} U_{\mathbf{r}} \mathcal{T}_O|\uparrow\rangle. \tag{2.37}$$

Wegen der Translationsinvarianz der anderen Faktoren kann man den Operator $U_{\mathbf{r}}$ bis ganz nach links kommutieren. Der Grundzustand $|\uparrow\rangle$ ist aber homogen, so daß sich $U_{\mathbf{r}}$ dort verwirkt, $\langle\uparrow|U_{\mathbf{r}} = \langle\uparrow|$. Die einzelnen Beiträge hängen also nicht von $\mathbf{r}$ ab, und es genügt, den Erwartungswert $\langle\uparrow|T_{m_1}\cdots T_{m_{k-1}}\mathcal{T}_O|\uparrow\rangle$ zu kennen, denn

$$\boxed{\langle\uparrow|T_{m_1}\cdots T_{m_k}|\uparrow\rangle \quad = \quad \#M\langle\uparrow|T_{m_1}\cdots T_{m_{k-1}}\mathcal{T}_O|\uparrow\rangle.} \tag{2.38}$$

$\#M$ entspricht der Anzahl der Elementarzellen in der Raute.

Das Programm wurde in der Programmiersprache *C++* umgesetzt, da diese eine moderne und mittlerweile in der Physik geläufige Sprache mit vielen nützlichen Bibliotheken ist. Bei der Programmierung geht es vor allem darum, die bereitgestellten $C(\mathbf{m})$ bis zur 10. Ordnung [18] möglichst vollständig auszunutzen. Dies bereitet auf dem Quadratgitter mit den oben beschriebenen Methoden keine Probleme. Im nächsten Kapitel sieht man jedoch, daß man auf dem Shastry-Sutherland-Gitter bedingt durch die Vielzahl der Kopplungen und Zustandsparameter schon vorzeitig an Grenzen stößt und sich daher jede auf dem Quadratgitter erzielte Optimierungserfahrung bezahlt macht.

Das Programm liefert

$$\boxed{\begin{aligned} E_0/JN &= -\frac{1}{2} - \frac{1}{8}\lambda^2 - \frac{1}{32}\lambda^3 + \frac{1}{512}\lambda^4 - \frac{87}{16384}\lambda^6 - \frac{465}{131072}\lambda^7 \\ &\quad -\frac{605}{2097152}\lambda^8 - \frac{431}{8388608}\lambda^9 - \frac{454237}{402653184}\lambda^{10}. \qquad (2.39) \end{aligned}}$$

Zur Kontrolle kann man die niedrigsten Ordnungen von Hand nachrechnen. Wie man später sieht, ist dieses Ergebnis erst ein mit der analytischen Methode des nächsten Kapitels zu verfeinerndes *Rohergebnis*. Der isotrope Punkt $\lambda = 1$ ist ein kritischer Punkt, welcher auf dem Rand des Konvergenzkreises liegt. Dort erwartet man speziell in unserem Modell – wie im nächsten Abschnitt begründet – ein langsames Konvergenzverhalten. Durch eine entsprechende Anpassung kann dies verbessert werden.

2.5 Spinwellentheorie

Die ältesten Erkenntnisse zur Spinwellentheorie stammen von Anderson, Kubo und Oguchi [6–8], welche sich ausführlich der semiklassischen Spinwellentheorie widmeten. Oguchi und Stinchcombe [9] zeigten, daß die lineare Nährung gute Ergebnisse liefert, so daß Wechselwirkungen zwischen Spinwellen vernachlässigt werden können.

In diesem Abschnitt gilt es zu klären, von welchem Typ die Singularität bei $\lambda = 1$ ist, um darauf aufbauend eine geeignete Extrapolation des polynomialen Ergebnisses (2.39) vorzunehmen. Hierfür bietet die Spinwellentheorie [36] einen guten Anhaltspunkt. Sie ist eine Entwicklung der Spin-Fluktuationen um die lokale klassische Spin-Richtung, welche in unserem Fall durch den Néel-Zustand bestimmt ist.

Zunächst unterziehen wir die Spinoperatoren in $H(\lambda)$ (siehe (2.17)) einer

Holstein-Primakoff-Transformation [21]. Diese transformiert lokal auf bosonische Operatoren $b_i, b_i^\dagger$, deren Teilchenzahloperator $\hat{n}_i := b_i^\dagger b_i$ gerade die Abweichung vom voll polarisierten Zustand mißt. Die Operatoren wirken nur lokal auf den Spin i und sind dort auf den Zuständen $|n_i\rangle := |S - m_i\rangle$ definiert durch

$$b_i^\dagger |n_i\rangle := \sqrt{n_i + 1}|n_i + 1\rangle. \tag{2.40}$$

Die Spinoperatoren stellen sich dann wie folgt dar:

$$\boxed{\begin{aligned} \widetilde{S}_i^+ &= \sqrt{2S - \hat{n}_i} b_i \\ \widetilde{S}_i^- &= b_i^\dagger \sqrt{2S - \hat{n}_i} \\ \widetilde{S}_i^z &= S - \hat{n}_i. \end{aligned} \qquad (2.41)}$$

Der ganze Fockraum, welcher lokal beliebige Besetzungszahlen und dementsprechend beliebige Spins zuläßt, ist natürlich viel zu groß. Will man die Spinoperatoren trotzdem dort darstellen, so muß man den Projektor auf den physikalischen Unterraum voranstellen. Man beachte, daß die Operatoren nicht aus dem physikalischen Bereich herausführen. Dieser Umstand ändert sich, wenn man die Wurzeloperatoren in (2.41) – wie in der Spinwellentheorie üblich – in eine Reihe entwickelt:

$$\sqrt{2S - \hat{n}_i} = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{\hat{n}_i}{4S} - \frac{\hat{n}_i^2}{32S^2} + O\left(S^{-3}\right)\right). \tag{2.42}$$

Setzt man nun (2.41) und (2.42) für $S = 1/2$ in $H(\lambda)$ aus Gleichung (2.17) ein und behält nur die 0. Ordnung in $1/S$, so bekommt man

$$\begin{aligned} \frac{H(\lambda)}{JN} &= -\frac{1}{2} + \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{2} - \widetilde{S}_i^z\right) \\ &\quad + \frac{\lambda}{N}\sum_{\langle ij\rangle}\left\{\frac{1}{2}\left(\widetilde{S}_i^+\widetilde{S}_j^+ + \widetilde{S}_i^-\widetilde{S}_j^-\right) - \left(\widetilde{S}_i^z - \frac{1}{2}\right)\left(\widetilde{S}_j^z - \frac{1}{2}\right)\right\} \\ &= -\frac{1}{2} + \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N}\hat{n}_i + \frac{\lambda}{N}\sum_{\langle ij\rangle}\left(b_i b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger\right) + H_2 + O\left(S^{-1}\right). \end{aligned} \tag{2.43}$$

Dabei steht H_2 für die vierfachen Produktterme in den b_i, welche genauso wie die Terme höhere Ordnung in $1/S$ auf Wechselwirkungen der später zu beschreibenden Spinwellen führen.

Die *lineare Spinwellentheorie* besteht darin, nach der führenden quadratischen Ordnung in den Bosonen-Termen abzubrechen. Man beachte, daß a posteriori zu prüfen ist, ob zumindest $\langle \hat{n}_i \rangle \ll 2S$ für alle i erfüllt ist, da sonst unphysikalische Zustände sehr viel Einfluß nehmen. Das laßt sich nach (2.41) über die Größe der Untergittermagnetisierung prüfen. Die Reduktion vom voll polarisierten Wert 1/2 pro Gitterplatz liegt bei ca. 0.2 oder 40% und wurde auch mit anderen Methoden bestätigt [10]. Danach ist die lineare Spinwellentheorie in dem von uns betrachteten Fall (Spin 1/2, Quadratgitter, isotrope Nächste-Nachbar-Wechselwirkung, $T = 0$) selbstkonsistent.

Man startet in der linearen Spinwellentheorie mit

$$\boxed{\frac{H_{\mathrm{LSW}}(\lambda)}{JN} = -\frac{1}{2} + \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N} \hat{n}_i + \frac{\lambda}{N}\sum_{\langle ij \rangle} \left(b_i b_j + b_i^\dagger b_j^\dagger \right). \qquad (2.44)}$$

Zur Diagonalisierung wählt man die Fourier-Darstellung

$$b_{\mathbf{k}} := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_i \qquad (2.45)$$

der Holstein-Primakoff-Bosonen mit der Rücktransformation

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}}^{1.\,\mathrm{BZ}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} b_{\mathbf{k}}. \qquad (2.46)$$

Dabei entstammt $\mathbf{k}$ der ersten Brillouin-Zone. Einsetzen in (2.44) liefert

$$\frac{H_{\mathrm{LSW}}(\lambda)}{JN} = -\frac{1}{2} + \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \frac{\lambda}{N}\sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} \left(b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \qquad (2.47)$$

mit dem *Strukturfaktor*

$$\boxed{\gamma_{\mathbf{k}} := \frac{1}{4} \sum_{<i_0 j>} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{i_0})} = \frac{1}{2}(\cos k_1 + \cos k_2) \qquad (2.48)}$$

an einem beliebigen Gitterplatz i_0 (wegen Translationsinvarianz).

Als nächstes führt man eine *Bogoliubov-Transformation* [36] der Bosonen durch,

$$\alpha_{\mathbf{k}} := \cosh\theta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} - \sinh\theta_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger \Longrightarrow b_{\mathbf{k}} = \cosh\theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + \sinh\theta_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger. \qquad (2.49)$$

Die $\theta_{\mathbf{k}}$ sind reel und gerade in $\mathbf{k}$. Dies hat zur Folge, daß die Transformation kanonisch (kommutatorerhaltend) ist. Durch die Bedingung

$$\tanh(2\theta_{\mathbf{k}}) = -\lambda\gamma_{\mathbf{k}} \tag{2.50}$$

bringt man die nicht-diagonalen Terme zum Verschwinden und gelangt zu dem Ergebnis

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{H_{\mathrm{LSW}}(\lambda)}{JN} &= -\frac{3}{2} + \frac{2}{N}\sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left(\alpha^{\dagger}_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\right) && (2.51) \\ \omega_{\mathbf{k}} &:= \sqrt{1 - \lambda^2\gamma^2_{\mathbf{k}}}. && (2.52) \end{aligned}}$$

Als Näherungswert für die Grundzustandsenergie pro Spin in Einheiten der Kopplungsstärke J ergibt sich daraus

$$\frac{E_0(\lambda)}{JN} = -\frac{3}{2} + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}. \tag{2.53}$$

Beim Übergang in den thermodynamischen Limes erhält man die Grundzustandsenergiedichte

$$\boxed{e_0(\lambda) = -\frac{3}{2} + \frac{1}{(2\pi)^2} \int\limits_{[-\pi,\pi]^2} \omega_{\mathbf{k}} d^2k. \qquad (2.54)}$$

pro Platz und Kopplungseinheit J. Um das Integral um den isotropen Punkt $\lambda = 1$ zu berechnen, führe ich eine einfache Näherung durch. Die Singularität in der Energiedichte ist eine Folge des Verschwindens des Radikanden in (2.52). Für $\lambda = 1$ muß also auch $\gamma_{\mathbf{k}} = 1$ werden. Das ist nach (2.48) bei $\mathbf{k} = 0$ der Fall, und so nähert man

$$\gamma_{\mathbf{k}} \approx 1 - \frac{k^2}{4}. \tag{2.55}$$

in der Frequenz (2.52). Als Integrationsbereich wählt man eine kleine Kreisschreibe $K_\epsilon(0)$ um 0 vom Radius ϵ. Wegen der Periodizität von $\gamma_{\mathbf{k}}$ muß dieser Beitrag zweimal gezählt werden, da die vier Ecken der Brioullin-Zone noch einmal denselben Beitrag wie um 0 ergeben. So erhält man

$$\boxed{\begin{aligned} e_0(\lambda) &\approx -\frac{3}{2}+\frac{2}{(2\pi)^2}\int\limits_{K_\epsilon(0)}\sqrt{1-\lambda^2\left(1-\frac{k^2}{2}\right)}d^2k \\ &= -\frac{3}{2}+\frac{1}{\pi\lambda^2}\left\{\sqrt{1-\lambda^2\left(1-\frac{\epsilon^2}{2}\right)}^3-\sqrt{1-\lambda^2}^3\right\}. \quad (2.56)\end{aligned}}$$

Die führende Singularität in der linearen Spinwellentheorie ist also von der Form $\sqrt{1-\lambda^2}^3$. Das entspricht dem Ergebnis von Weihong *et al.* [10]. Die Übereinstimmung kommt dadurch zustande, daß die Autoren zwar einen etwas anderen Limes – nämlich den sog. *Ising-Limes* – betrachten, der Spinwellen-Hamiltonian in linearer Näherung aber derselbe ist.

Im nächsten Abschnitt werde ich die Erkenntnisse aus der linearen Spinwellentheorie nutzen, indem ich das polynomiale Ergebnis (2.39) an das oben beschriebene Verhalten anpassen.

2.6 Ergebnisse und Diskussion

Ich werde nun das Ergebnis (2.39) genauer beleuchten. Dazu schaue ich mir zuerst den Verlauf des Polynoms und das Resultat im isotropen Punkt $\lambda = 1$ an. Dort erhalte ich in 10. Ordnung λ

$$4e_0 = -2.658, \tag{2.57}$$

wie man auch graphisch in Abb. 2.7 ungefähr ablesen kann. Als Referenzwerte führe ich die Tabelle aus Weihong *et al.* [10] von 1991 auf. Die Abweichung meines Wertes von diesen Ergebnissen liegt nur im Promillebereich. Das schafft Vertrauen in die verwendete Methode und motiviert zu einer Extrapolation des Ergebnisses mit Hilfe der linearen Spinwellentheorie des letzten Abschnitts. Die tatsächliche Reihe hat demnach die Form

$$e_0(\lambda) = a_0 + a_2(1-\lambda) + a_3(1-\lambda)^{\frac{3}{2}} + O((1-\lambda)^2). \tag{2.58}$$

Diese Kenntnis nutze ich, indem ich an meinem polynomialen Ergebnis (2.39) eine voreingenommene (engl. *biased*) *Dlog-Padé-Approximation* [37] mit der zweiten Ableitung durchführe. Dazu benutze ich folgende Methode: Mehrmaliges Differenzieren liefert den Zugang zur Wurzel-Singularität, denn

$$\frac{e_0'''(\lambda)}{e_0''(\lambda} = \frac{1}{2}\frac{1}{1-\lambda}(1+O(\sqrt{1-\lambda})). \tag{2.59}$$

Referenz	Methode	$4e_0$
Gross *et al.* [23]	Monte Carlo	-2.669(3)
Reger und Young [24]	Monte Carlo	-2.680(8)
Singh [25]	Reihenentw.	-2.6785(10)
Liang *et al.* [26]	Variation	-2.6752(16)
Tang und Hirsch [27]	Endl. Gitter	-2.688(4)
Okabe *et al.* [28, 29]	Monte Carlo	-2.680(4)
Barnes *et al.* [30]	Monte Carlo	-2.676(4)
Gross *et al.* [31]	Monte Carlo	-2.6692(12)
Carlson [32]	Monte Carlo	-2.6767(4)
Trivedi *et al.* [33]	Monte Carlo	-2.6768(8)
Liang [34]	Monte Carlo	-2.6784(32)
Barnes *et al.* [35]	Monte Carlo	-2.6769(5)
Weihong *et al.* [10]	Reihenentw.	-2.6772(4)

Tabelle 2.1 *Numerische Werte für die Grundzustandsenergiedichte pro Platz und Kopplungsstärke J des Heisenberg-Antiferromagneten auf dem Quadratgitter im isotropen Fall für Spin 1/2.*

Die Gewichtung kann man nun dadurch vornehmen, daß man Padé-Approximanden von

$$\frac{e_0'''(\lambda)}{e_0''(\lambda)} - \frac{1}{2}\frac{1}{1-\lambda} \tag{2.60}$$

betrachtet und diese entsprechend hochintegriert. Sei $e_{[i,j]}(\lambda)$ ein solcher Padé-Approximand der Ordnung $[i, j]$, dann gilt näherungsweise

$$\frac{e_0'''(\lambda)}{e_0''(\lambda)} - \frac{1}{2}\frac{1}{1-\lambda} \approx e_{[i,j]}(\lambda). \tag{2.61}$$

Man beachte, daß die $e_{[i,j]}$ i. a. in $[0, 1]$ nicht mehr singulär sind. Eine Integration liefert

$$e_0''(\lambda) \approx \frac{e_0''(0)}{\sqrt{1-\lambda}} \underbrace{\exp\left(\int_0^\lambda e_{[i,j]}(\lambda')d\lambda'\right)}_{=:g_{[i,j]}(\lambda)} \tag{2.62}$$

$$\overset{(2.39)}{=} -\frac{1}{4\sqrt{1-\lambda}} g_{[i,j]}(\lambda) \tag{2.63}$$

Daraus ergibt sich ebenfalls mit (2.39)

$$e_0(\lambda) = -\frac{1}{2} - \frac{1}{4}\int_0^\lambda dy \int_0^y dx \frac{g_{[i,j]}(x)}{\sqrt{1-x}} \tag{2.64}$$

Das Doppelintegral auf der rechten Seite läßt sich noch auf ein einfaches Integral mittels partieller Integration zurückführen, denn

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\lambda dy \int_0^y dx \frac{g_{[i,j]}(x)}{\sqrt{1-x}} \\
&= \int_0^\lambda dy 1 \cdot \int_0^y dx \frac{g_{[i,j]}(x)}{\sqrt{1-x}} && (2.65) \\
&= \left[(y-1)\int_0^y dx \frac{g_{[i,j]}(x)}{\sqrt{1-x}}\right]_0^\lambda - \int_0^\lambda dy (y-1) \frac{g_{[i,j]}(y)}{\sqrt{1-y}} && (2.66) \\
&= (\lambda-1)\int_0^\lambda dx \frac{g_{[i,j]}(x)}{\sqrt{1-x}} + \int_0^\lambda dx \sqrt{1-x}\, g_{[i,j]}(x). && (2.67)
\end{aligned}
$$

Um die Wurzelsingularitäten zu eliminieren, substituiert man noch $u := \sqrt{1-x}$. So erhält man

$$
\begin{aligned}
&\int_0^\lambda dy \int_0^y dx \frac{g_{[i,j]}(x)}{\sqrt{1-x}} && (2.68) \\
&= 2(\lambda-1)\int_{\sqrt{1-\lambda}}^1 g_{[i,j]}(1-u^2) du + 2\int_{\sqrt{1-\lambda}}^1 u^2 g_{[i,j]}(1-u^2) du\,.
\end{aligned}
$$

Damit lautet die Energiedichte

$$
\boxed{4e_0(\lambda) \approx -2\left(1 + \int_{\sqrt{1-\lambda}}^1 (\lambda - 1 + u^2) g_{[i,j]}(1-u^2) du\right). \qquad (2.69)}
$$

Diese Formel habe ich mittels *Maple* numerisch ausgewertet. Für $\lambda = 1$ ergibt sich Tabelle 2.2. Die Werte der mittleren Approximanden $[2,5], [3,4], [4,3]$ liegen sehr eng zusammen. In der Darstellung von Abb. 2.7 wären ihre Graphen gar nicht aufzulösen. Deswegen habe ich nur einen Approximanden eingezeichnet. Als Endresultat gebe ich deswegen den Wert des $[4,3]$-Approximanden an. Der Fehler ist schwierig abzuschätzen, da die drei in Betracht gezogenen Approximanden $[2,5], [3,4], [4,3]$ sehr eng beeinander liegen. Ich schätze ihn wie folgt.

$$
\boxed{4e_0 = -2.6766(20). \qquad (2.70)}
$$

Dies ist ein ausgezeichneter Wert, wenn man ihn mit denen von Tabelle 2.1 vergleicht.

Approximand	$4e_0$
$[7, 0]$	-2.6742
$[6, 1]$	-2.6714
$[5, 2]$	-2.6726
$[4, 3]$	-2.6766
$[3, 4]$	-2.6765
$[2, 5]$	-2.6766
$[1, 6]$	-2.6673
$[0, 7]$	-2.6837

Tabelle 2.2 *Extrapolierte Werte für die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz. Genauere Erläuterungen im Text.*

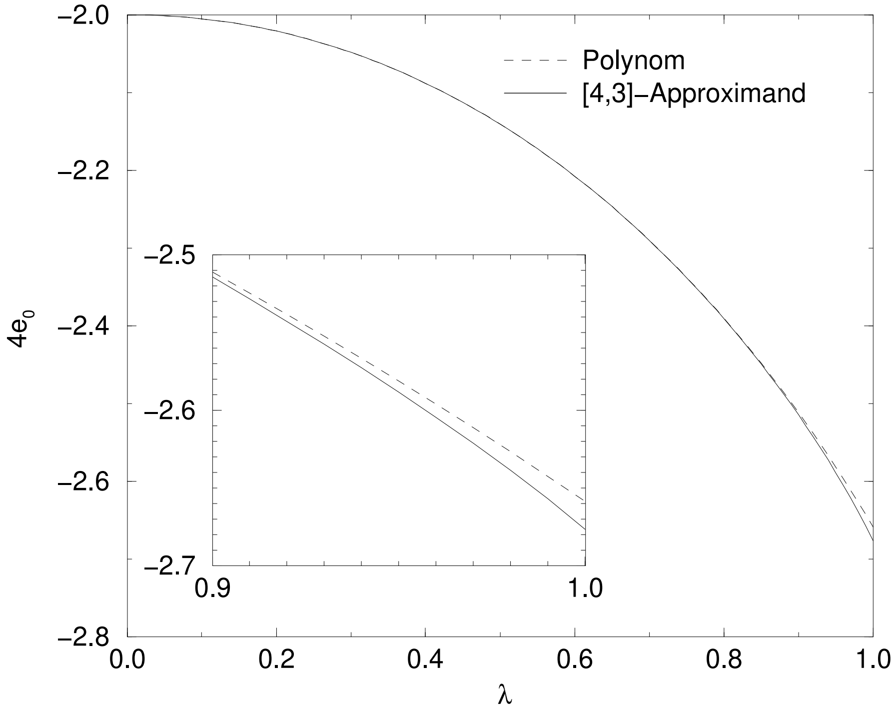

Abbildung 2.7 *Polynom und Dlog-Padé-Approximand in 10. Ordnung. Die aus der linearen Spinwellentheorie gewonnene gewichtete Extrapolation aus Gleichung (2.69) senkt die Energie im isotropen Punkt bei* $\lambda = 1$ *deutlich ab. Dadurch ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit bekannten numerischen Resultaten in Tabelle 2.1.*

Kapitel 3

Shastry-Sutherland-Modell

3.1 Motivation

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werde ich kurz das Shastry-Sutherland-Modell vorstellen und es dann im Sinne von Müller-Hartmann *et al.* [14] verallgemeinert betrachten. Anschließend leite ich die bisher bekannten klassischen Phasen bei $T = 0$ her. Diese dienen als Grundlage für eine quantenmechanische Untersuchung des Phasendiagramms. Im Abschnitt über quantenmechanische Phasen stelle ich die bisherigen exakten und approximativen Ergebnisse anderer Autoren zusammen und füge eigene hinzu. Die anschließend beschriebene Spinwellentheorie für das verallgemeinerte Modell geht auf Müller-Hartmann [39] zurück und liefert einen ersten Einblick in die Struktur des verallgemeinerten Phasendiagramms. Zum Schluß werde ich die nicht exakt bekannten Phasengrenzen mit Hilfe der Flußgleichungsmethode aus Abschnitt 1.4 perturbativ berechnen.

3.2 Modell und Verallgemeinerung

Das ursprünglich 1981 von Shastry und Sutherland [1] untersuchte Modell beschreibt lokalisierte Spins auf einem Quadratgitter mit Wechselwirkungen zwischen nächsten und gewissen übernächsten Nachbarn. Ich beschränke mich hier auf den isotropen Fall für $S = 1/2$. Dafür lautet der Hamiltonoperator

$$\boxed{H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle kl \rangle\rangle} \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l. \qquad (3.1)}$$

Die Topologie der Wechselwirkungen ist in Abb. 3.1 zu sehen. Die Spins wechselwirken über Diagonalbonds $\langle ij \rangle$ und Nächste-Nachbar-Bonds $\langle\langle kl \rangle\rangle$. Wie man anhand von Abb. 3.1 erkennen kann, ist das Modell für positive J_1 immer *frustiert,* denn unabhängig vom Vorzeichen von J_2 agieren die beiden Wechselwirkungen bei der Ausrichtung der Spins gegenläufig, wenn man im klassischen Spinvektor-Modell die Konfiguration minimaler Energie erreichen will. Ich werde ausschließlich, sofern nicht explizit anders vermerkt, den frustrierten Fall

$$\boxed{J_1 > 0 \qquad (3.2)}$$

untersuchen. Dieses Heisenberg-Modell verdient deshalb besonderes Interesse, weil sein quantenmechanischer Grundzustand für einen recht großen Parameterbereich exakt bekannt ist. Sogar im Bereich starker Frustration $J_1 \simeq J_2$ bilden sich auf den J_1-Dimeren Singuletts, die im System die ungünstige Kopplungsenergie zwischen den Dimeren zum verschwinden bringt. Der zweite Term in (3.1) bleibt dann ohne Effekt. Bezeichnet $[i,j]$ den *lokalen Singulett-Zustand* $1/\sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ auf dem Dimer $\langle ij \rangle$, dann ist der Grundzustand der Produktzustand

$$\boxed{|\psi\rangle = \bigotimes_{\langle ij \rangle} [i,j]. \qquad (3.3)}$$

aller Dimer-Singuletts. Es ist leicht zu sehen, daß $|\psi\rangle$ immer ein Eigenzustand ist. Die Singulett-Zustände koppeln, wie in Abb. 3.2 ersichtlich, über die Nächsten-Nachbar-Bonds J_2 aneinander. Diese Wechselwirkung läßt sich faktorisieren in $S_i^\alpha(S_j^\alpha + S_k^\alpha)$ für $\alpha = 1, 2, 3$, aber auf dem $\langle jk \rangle$-Bond liegt ein Singulett mit Gesamtspin 0 vor. Deshalb gilt

$$S_i^\alpha(S_j^\alpha + S_k^\alpha)[j,k] = 0. \qquad (3.4)$$

Das hat zur Folge, daß allein die Dimer-Bonds zur Energie beitragen. Diese

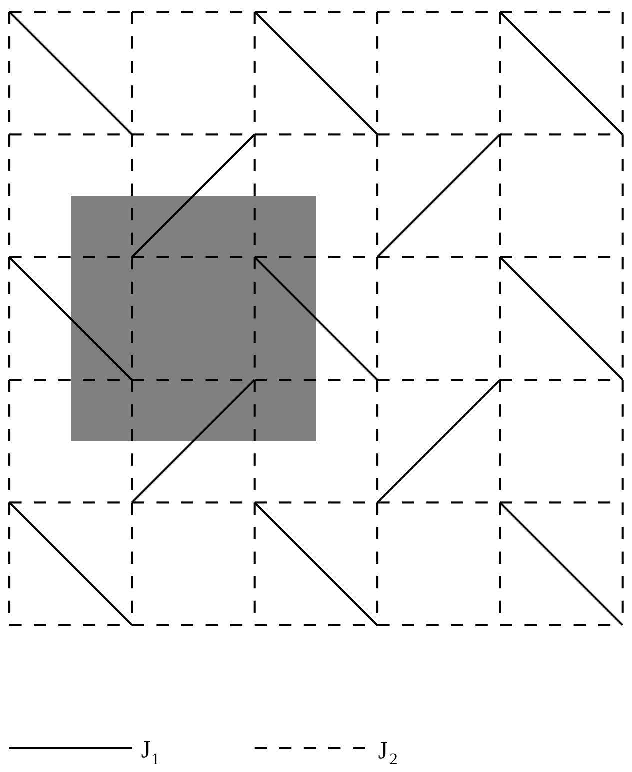

Abbildung 3.1 *Shastry-Sutherland-Gitter mit Elementarzelle (grau).*

ergibt sich pro Platz zu

$$\boxed{e_{\mathrm{dim}} = -\frac{3}{8} J_1. \qquad (3.5)}$$

Um zu zeigen, daß $|\psi\rangle$ tatsächlich der Grundzustand ist, benutzt man ein variationelles Argument, das in unserem Fall eine *untere Schranke* für die Grundzustandsenergie liefert. Zunächst führt man eine Zerlegung des Hamiltonoperators

$$H = \sum_t h_t \qquad (3.6)$$

in eine Summe kleiner Dreiecke ein,

$$h_t := \frac{J_1}{2} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k + J_2 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k). \qquad (3.7)$$

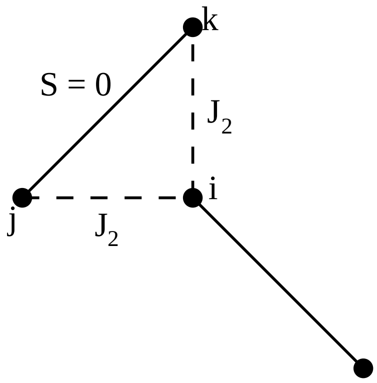

Abbildung 3.2 *Die Dimere wechselwirken nicht im Singulett-Zustand, da jeweils ein Spin i an einen Gesamtspin 0 koppelt.*

Das Dreieck i, j, k ist in Abb. 3.2 zu sehen. Dabei wird der Dimer-Bond $\langle jk \rangle$ nur halb gezählt, weil sich je zwei Dreiecke einen J_1-Bond teilen. Ist e_t die Grundzustandsenergie eines Dreiecks, so gilt für die Grundzustandsenergie des Gitters

$$E_0 \quad = \quad \langle E_0|H|E_0\rangle = \sum_t \langle E_0|h_t|E_0\rangle \overset{\text{Variation}}{\geq} \sum_t e_t = Ne_t. \qquad (3.8)$$

Es läßt sich nun aber zeigen, daß die Energie Ne_t für $-1 \leq J_2/J_1 \leq 1/2$ tatsächlich vom Singulett-Produktzustand $|\psi\rangle$ angenommen wird. Das liegt daran, daß jedes Dreieck die drei Eigenwerte

$$\begin{aligned} e_1 &= -\frac{3}{8}J_1 && \textit{Dublett } (S = 1/2, \\ e_2 &= \frac{J_1}{8} + \frac{J_2}{2} && \textit{Dublett } (S = 1/2), \\ e_3 &= \frac{J_1}{8} - J_2 && \textit{Quartett } (S = 3/2), \end{aligned} \qquad (3.9)$$

hat. Die Ursache für die Entartung der Energien von h_t ist die Spinerhaltung. Das Dublett mit der Energie e_1 ist dasjenige mit dem Zwei-Spin-Singulett $|s\rangle$ auf dem J_1-Dimer,

$$|e_1\rangle \in \text{span}\{|s\rangle \otimes |\uparrow\rangle, |s\rangle \otimes |\downarrow\rangle\}. \qquad (3.10)$$

Aus diesen Zuständen kann man sukzessive den globalen Singulett-Produktzustand (3.3) zusammenfügen. Die Energie e_1 ist die Grundzustandsenergie des

Dreiecks, solange e_1 der kleinste der drei Eigenwerte ist. Das ist gerade für

$$\boxed{-1 \leq J_2/J_1 \leq 1/2 \qquad (3.11)}$$

der Fall.

Diese Argumentationskette beinhaltet auch die *Eindeutigkeit des globalen Grundzustandes* in diesem Parameterbereich. Denn für jeden anderen Grundzustand $|\psi'\rangle$ muß in Ungleichung (3.8) ebenfalls das Gleichheitszeichen gelten, also

$$\langle\psi'|h_t|\psi'\rangle \quad = \quad e_t \qquad (3.12)$$

für alle Dreiecke t. Somit ist $|\psi'\rangle$ lokal ein Grundzustand des Dreiecks. Dieser ist in dem Parameterbereich durch einen der e_1-Dublett-Zustände gegeben. Der dritte Spin ist zwar zunächst frei bestimmbar, aber in einem benachbarten Dreieck gehört auch er zu einem Dimer-Bond und muß dort mit seinem J_1-Partner ein Singulett bilden. So konstruiert sich der Gittergrundzustand in eindeutiger Weise aus den lokal zweifach entarteten Dublettzuständen.

Shastry und Sutherland [1] nannten diesen Zustand *Spin-Flüssigkeits-Phase*, weil die Spin-Korrelationen sehr kurzreichweitig sind. Sie bestehen nur auf einzelnen Dimer-Paaren und zeichnen keine Spinrichtung aus.

Dem Modell wurde von Weihong, Hamer und Oitmaa [12] eine weitere Kopplung J_3 hinzugefügt, die in Abb. 3.3 zu sehen ist. Der Hamiltonoperator lautet damit

$$\boxed{H = J_1 \sum_{\langle ij\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle kl\rangle\rangle} \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l + J_3 \sum_{\langle\langle\langle mn\rangle\rangle\rangle} \mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n. \qquad (3.13)}$$

Der Singulett-Produktzustand (3.3) ist weiterhin stets ein Eigenzustand, weil auch hier die Dimer-Paare aufgrund der Paarigkeit der angreifenden J_3-Bonds entkoppeln. Das Argument ist genau dasselbe wie für das ursprüngliche Modell in Gleichung (3.4). Müller-Hartmann *et al.* [14] untersuchten das klassische wie das quantenmechanische Phasendiagramm dieses Shastry-Sutherland-Modells mit zusätzlicher Kopplung. Hieran möchte ich im folgenden anknüpfen.

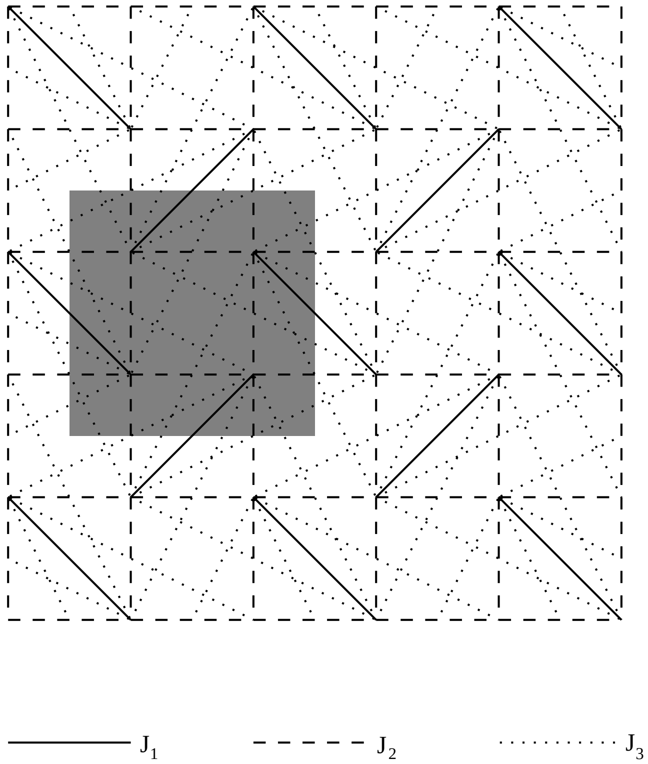

Abbildung 3.3 *Verallgemeinertes Shastry-Sutherland-Modell mit zusätzlicher Kopplung J_3 zwischen übernächsten Nachbarn. Eine mögliche Elementarzelle ist grau unterlegt.*

3.3 Klassische Phasen

Im klassischen Limes $S \to \infty$ ist der Grundzustand des Shastry-Sutherland-Modells (3.1) exakt bekannt. Hier folge ich der Argumentation der Originalautoren [1]. Die *Frustration* ($J_1 > 0$) hat entscheidenden Einfluß auf die Geometrie des Grundzustandes. Man benutzt wieder die Triangulation (3.6), um den Hamiltonoperator in einfache Bestandteile zu zerlegen. Zunächst bestimmt man den Grundzustand eines einzelnen Dreiecks. Dieser ist kontinuierlich entartet, da h_t aufgrund der dort vorkommenden euklidischen Skalarprodukte rotationsinvariant ist. Darauf konstruiert man aus diesen lokalen Grundzuständen den globalen Grundzustand des Gitters.

Für betraglich sehr große J_2 muß das System in den Néel-Zustand bzw. den vollpolarisierten ferromagnetischen Grundzustand übergehen. Dazwischen findet ein kontinuierlicher Übergang statt, wie ich im folgenden zeigen werde.

Die klassischen Spins seien nun Einheitsvektoren. Zuerst zeigt man, daß die drei Spins in einer Ebene liegen. Zwei Spinvektoren spannen eine Ebene auf, und man muß noch zeigen, daß der dritte aus dieser nicht herausragt. Einen Spin kann man fixieren, weil das Problem rotationsinvariant ist. Deshalb wähle ich für das Dreieck

$$h_t = \frac{J_1}{2}\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_2(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3) \qquad (3.14)$$

in Abb. 3.4 Kugelkoordinaten

$$\mathbf{S}_1 = \begin{pmatrix} \cos\varphi_1 \\ \sin\varphi_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \; \mathbf{S}_2 = \begin{pmatrix} \cos\theta_2\cos\varphi_2 \\ \cos\theta_2\sin\varphi_2 \\ \sin\theta_2 \end{pmatrix}, \; \mathbf{S}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \qquad (3.15)$$

Damit lautet die Energie

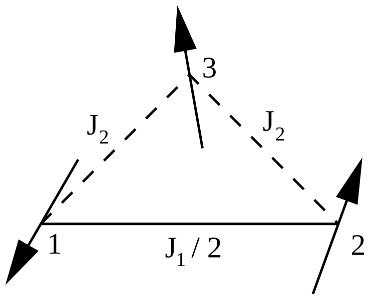

Abbildung 3.4 *Elementares Dreieck im Shastry-Sutherland-Gitter. Das vollständige Gitter läßt sich daraus aufsummieren.*

$$h_t = \frac{J_1}{2}\cos\theta_2\cos(\varphi_1 - \varphi_2) + J_2(\cos\varphi_1 + \cos\theta_2\cos\varphi_2). \qquad (3.16)$$

Zunächst seien $\varphi_2, \varphi_2 \in [0, 2\pi[$ und $\theta_2 \in]-\pi/2, \pi/2[$. Die Randwerte $\theta = \pm\pi/2$ vergleiche ich später. Sie liefern die Energie $e_t = -|J_2|$. Die notwendigen Kriterien für lokale Extrema lauten

$$\begin{aligned} \frac{J_1}{2}\cos\theta_2\sin(\varphi_1 - \varphi_2) + J_2\sin\varphi_1 &= 0, \\ \cos\theta_2\left(\frac{J_1}{2}\sin(\varphi_1 - \varphi_2) - J_2\sin\varphi_2\right) &= 0, \\ \sin\theta_2\left(\frac{J_1}{2}\cos(\varphi_1 - \varphi_2) + J_2\cos\varphi_2\right) &= 0. \end{aligned} \qquad (3.17)$$

Ist $\sin\theta_2 \neq 0$, so folgt aus den letzten beiden Gleichungen $J_1 = 2|J_2|$. Im Fall $J_1 = 2J_2$ liefert das $\varphi_1 = \pi$ und $\varphi_2 \in \{0, \pi\}$. Die Energie wird damit

$e_t = -J_2$. Im Fall $J_1 = -2J_2$ folgt $\varphi_1 = 0$ und $\varphi_2 \in \{0, \pi\}$. Die Energie ist $e_t = J_2$. In beiden Fällen ist θ_2 beliebig. Damit stimmen diese Energien mit denen am Rand überein.

Für $\sin\theta_2 = 0$ folgt $\theta_2 = 0$. Die Spins liegen dann in einer Ebene. Durch Subtraktion der ersten beiden Gleichungen in (3.17) erhält man

$$\sin\varphi_1 = -\sin\varphi_2. \tag{3.18}$$

Der Ansatz $\varphi_1 = \pi \pm \alpha$ und $\varphi_2 = \pi \mp \alpha$ löst diese Gleichung. In beiden Fällen folgt aus der mittleren Gleichung in (3.17) $\cos\alpha = J_2/J_1$, sofern dabei auch noch $\sin\alpha \neq 0$ ist. Eine Lösung existiert nur für $-1 \leq J_2/J_1 \leq 1$. Ist $\sin\alpha = 0$, so gilt $\alpha \in \{0, \pi\}$. Das sind der Néel-Zustand ($\alpha = 0$) und der ferromagnetische Zustand ($\alpha = \pi$). Damit hat man für lokale Extrema die vier Kandidaten

$$\boxed{\begin{aligned}
(\varphi_1, \varphi_2) &= (\pi + \arccos J_2/J_1, \pi - \arccos J_2/J_1) \\
(\varphi_1, \varphi_2) &= (\pi - \arccos J_2/J_1, \pi + \arccos J_2/J_1) && (3.19) \\
(\varphi_1, \varphi_2) &= (0, 0) && (3.20) \\
(\varphi_1, \varphi_2) &= (\pi, \pi) && (3.21)
\end{aligned}}$$

Es handelt sich in allen vier Fällen um lokale Minima. Die ersten beiden Punkte liefern für den Bereich $-1 \leq J_2/J_1 \leq 1$ dieselbe Energie *(zweifache Entartung)*

$$e_t = -J_2^2/J_1 - J_1/2. \tag{3.22}$$

Die Energie des ferromagnetischen Grundzustandes $(0, 0)$ und des Néel-Zustandes (π, π) sind dort größer, denn

$$e_t = \begin{cases} J_1/2 + 2J_2 & \text{für} \quad (0, 0) \\ J_1/2 - 2J_2 & \text{für} \quad (\pi, \pi) \end{cases} \tag{3.23}$$

Im Fall $J_1 = 2|J_2|$ haben die Zustände (3.19) die Energie $e_t = -3/2|J_2| < -|J_2|$, also die niedrigste Energie. In dem Bereich $-1 \leq J_2/J_1 \leq 1$ sind sie also die Grundzustände. Außerhalb dieses Bereiches liegen der ferromagnetische Zustand (3.20) für $J_2 < 0$ und der Néel-Zustand (3.21) für $J_2 > 0$ vor.

In Abb. 3.5 sind alle vier verschiedenen Typen von Grundzuständen von h_t zu sehen. Wenn die Frustration stark genug ist ($J_1 > J_2$), entwickelt sich

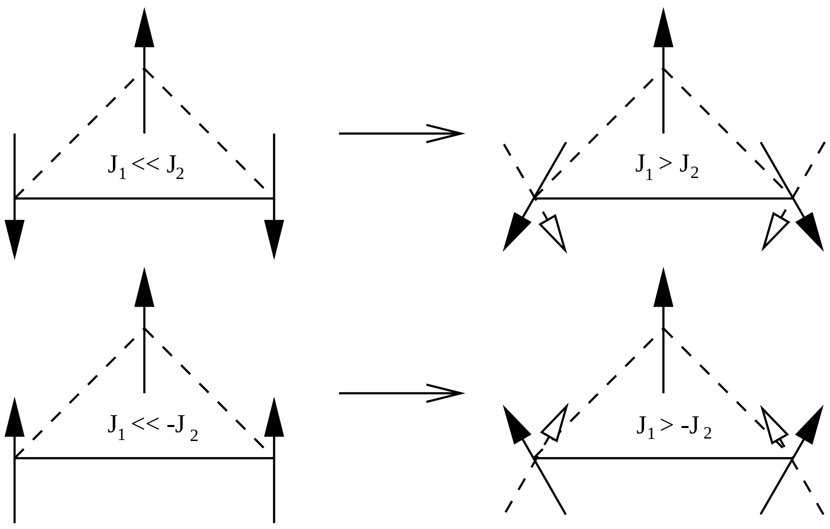

Abbildung 3.5 *Die vier möglichen Grundzustände von h_t. J_1 ist hier stets positiv (Frustration). Von links nach rechts sind die Übergänge in die helikalen Phasen angedeutet. Die gestrichelten Pfeile auf der rechten Seite sollen entartete Zustände kennzeichnen.*

aus dem Néel-Zustand ein „mercedessternartiger" Grundzustand. Das gleiche widerfährt dem ferromagnetischen Grundzustand, wenn man die J_2-Bonds stark frustriert. Diese Zustände, sind wie oben berechnet, zweifach diskret entartet, da man genauso gut die Spins an dem J_1-Bond vertauschen kann, ohne die Energie zu ändern.

Nun konstruiert man aus dem lokalen Grundzuständen der Dreiecke den globalen des Gitters. Gelingt es, das Gitter in konsistenter Weise mit einem der Zustände in Abb. 3.5 und gegebenenfalls seinem entarteten Partner auszufüllen, so hat man einen globalen Grundzustand gefunden, weil die Energie des Gitters nicht kleiner werden kann als die Summe der Minima dieser N Gitterkomponenten, aus denen sich das Gitter zusammensetzt.

Im Fall des lokalen Néel-Zustandes und des lokalen ferromagnetischen Zustandes sieht man sogleich, daß sich global eine dem Dreiecksgrundzustand entsprechende Ordnung ergibt. Im Gegensatz dazu kann man sich in den

Fällen (3.19) lokal immer für eine der beiden Möglichkeiten

$$\boxed{\varphi_\pm \;=\; \pi \pm \arccos J_2/J_1 \qquad (3.24)}$$

entscheiden. Um zu verdeutlichen, welchen der beiden Winkel ich lokal wähle, zeichne ich im folgenden einen Pfeil auf Platz j zu, wenn der Spin von Platz i zu Platz j um φ_+ gedreht wird. Dann muß man folgende Regeln auf dem Gitter erfüllen:

- In Quadraten mit Dimer-Bonds, die sich aus zwei Dreiecken mit jeweils einem Dimer-Bond als Grundseite zusammensetzen, zeigt ein Pfeil auf die Dreiecksspitze zu, der andere weg. Das liegt an den oben berechneten unterschiedlichen Drehrichtungen der Dimer-Spins in bezug auf den Spin an der Dreiecksspitze. Hat man ein Dreieck festgelegt, so ist das andere über die Winkelbeziehung (3.24) schon vollständig festgelegt, wie man auch an Abb. 3.6 erkennen kann.
- Der bei einem Umlauf um ein Quadrat ohne Dimer-Bond integrierte Strom (= Summe der Pfeilorientierungen) muß verschwinden. Das ist Ausdruck davon, daß man nach einem Umlauf wieder bei demselben Spin ankommt, der mit sich selbst den Winkel Null einschließt.

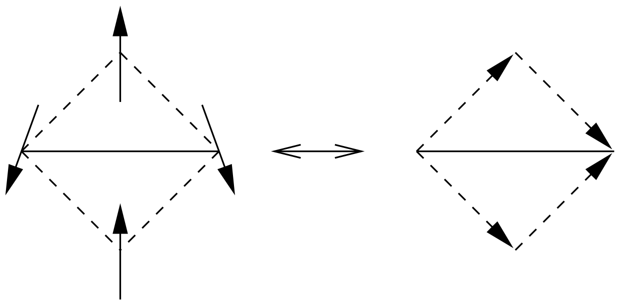

Abbildung 3.6 *Lokale Umlaufkonvention zur globalen Grundzustandskonstruktion. Die Pfeile auf der rechten Seite zeigen in die Richtung, in der die Spins um $\varphi_+ = \pi + \arccos J_2/J_1$ von Platz zu Platz gedreht werden.*

Ich nehme nun zwei benachbarte Dimere wie in Abb. 3.7 als Ausgangspunkt, um das Shastry-Sutherland-Gitter nach diesen Regeln mit Dreiecksgrundzuständen auszufüllen. Dann kann man an jedem Dimer, wie in Abb. 3.7 gezeigt, je einen Dreiecksgrundzustand frei wählen, ohne eine Regel zu

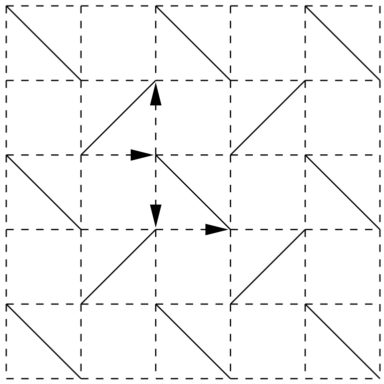

Abbildung 3.7 *Startkonfiguration zur Bestimmung des globalen Grundzustands. Die Pfeile repräsentieren eine bestimmte Wahl der relativen Winkel zwischen den Spins im Grundzustand eines jeden Dreiecks. Nähere Erläuterungen im Text.*

verletzen. Möchte man nun das oben rechts angrenzende Quadrat mit Pfeilen besetzen, so erscheint es, als habe man eine Wahlfreiheit zwischen den in Abb. 3.8 sichtbaren Möglichkeiten A und B. Dieses Problem entsteht nicht,

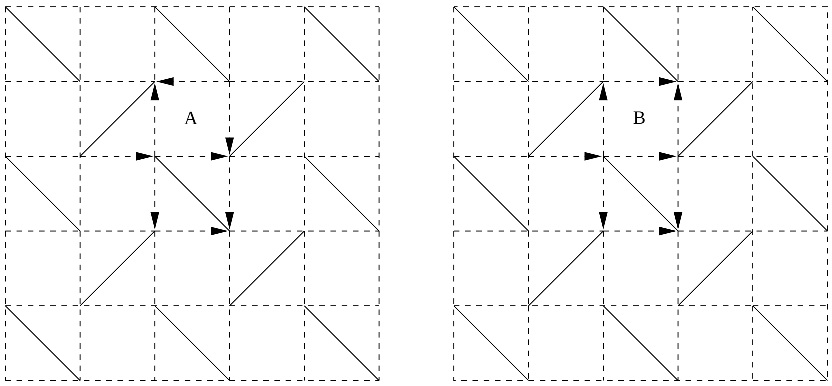

Abbildung 3.8 *Scheinbare Mehrdeutigkeit nach Start mit Dreiecksgrundzuständen wie in Abb. 3.7 gezeigt. Weiter in Abb. 3.9.*

wenn man von der Startkonfiguration in Abb. 3.9 ausgehend in der durch Zahlen angedeuteten Reihenfolge gegen den Uhrzeigersinn mit der Festlegung der Spins voranschreitet, so daß man zwangsläufig zu Konfiguration B gelangt. Man hat also schon alle Freiheiten ausgeschöpft, wenn man die Startkonfiguration festgelegt hat.

Auf diese Weise erhält man einen eindeutigen globalen Grundzustand wie in Abb. 3.10. Man erkennt dort, daß sich von links nach rechts ein effektiver Fluß ergibt, der in jeder Zeile des Gitters einer *Spin-Helix* entspricht. Geht

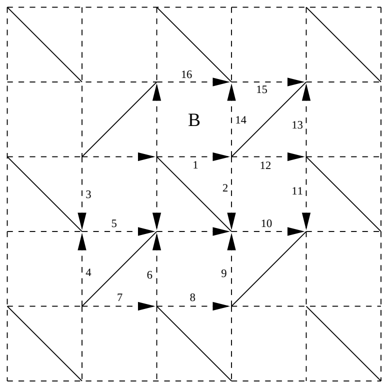

Abbildung 3.9 *Auflösung des Problems aus Abb. 3.8. Man besetzt von der Startkonfiguration in Abb. 3.7 ausgehend mit Hilfe der im Text beschriebenen Regeln die J_2 Bonds (gestrichelt) mit Pfeilen. Dabei geht man in der durch Zahlen angedeuteten Reihenfolge vor. So gelangt man eindeutig zu dem Zustand B auf der in Abb. 3.8 fraglichen Plakette oben rechts.*

man in die benachbarte Zeile, so erfahren die Spinvektoren eine Drehung um $\varphi_{\pm}$, die in der übernächsten Zeile wieder rückgängig gemacht wird.

Die Energie dieses helikalen Zustands ist neben der $O(3)$-Entartung (Rotationsinvarianz des Hamiltonoperators) aufgrund seiner Konstruktion vierfach diskret entartet. Das entspricht global gesehen den vier Richtungen, in die die Helix auf dem Quadratgitter zeigen kann.

Schaltet man J_2 komplett aus, so liegen *isolierte Dimere* vor, die je nach Vorzeichen von J_1 lokal antiferromagnetisch oder ferromagnetisch geordnet sind. Untereinander sind diese lokalen Zustände unkorreliert (siehe Abb. 3.11).

Das vollständige klassische Phasendiagramm des ursprünglichen Shastry-Sutherland-Modells ist in Abb. 3.12 zu sehen. Dort sind die unfrustrierten Bereiche $J_1 < 0$ mitaufgeführt. Die Geraden, die die helikalen Phasen von den anderen Phasen trennen, haben die Steigung ± 1.

Die Phasenübergänge der helikalen Phasen in die antiferromagnetische bzw. ferromagnetische Phase sind von zweiter Ordnung. Das erkennt man an der Energiedichte e als Funktion von J_2/J_1 in Abb. 3.13. Dort sieht man stetig differenzierbare Übergänge zwischen den verschiedenen Phasen.

Nun gehen wir zum verallgemeinerten Modell aus Gleichung (3.13) über. Leider läßt sich hier der Grundzustand klassisch nicht mehr überall exakt begründen. Mit Abb. 3.12 kennt man aber einen Teil des Phasendiagramms exakt, weil sich das Modell für $J_3 = 0$ auf das herkömmliche Shastry-Sutherland-Modell reduziert. In Einheiten von J_1 ist dieser Teil des Phasendiagramms in Abb. 3.14 zu sehen. Der Einfluß von J_3 ist grob gesagt der,

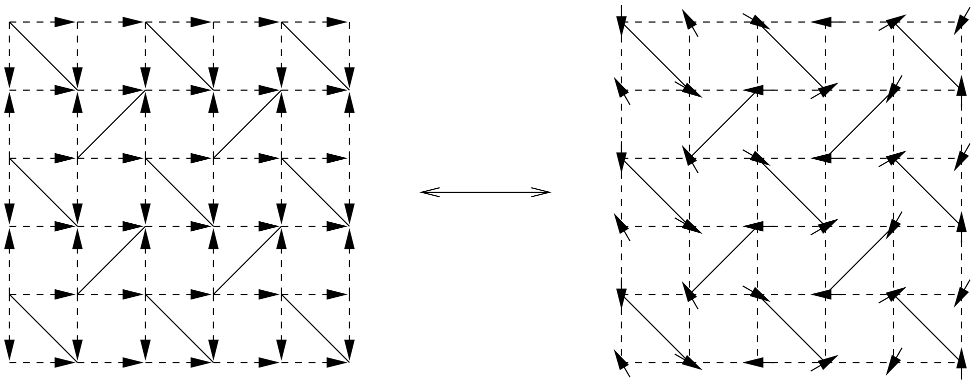

Abbildung 3.10 *Globaler Grundzustand nach Start mit Konfiguration aus Abb. 3.7. Rechts ist das „Drehwinkel-Bild" in das Spin-Bild zurück übersetzt. Man erkennt in jeder Zeile die Struktur einer Helix. Von Zeile zu Zeile wird diese vor und zurück gedreht (2-Periodizität in den Spalten).*

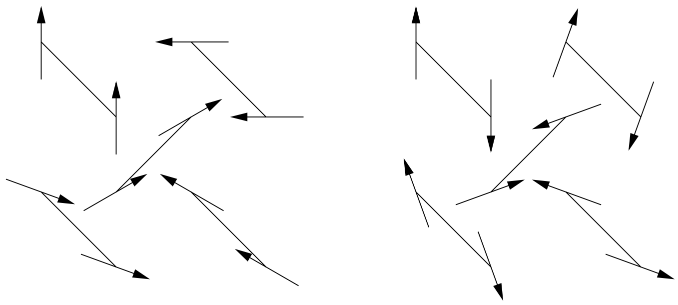

Abbildung 3.11 *Isolierte Dimere für $J_2 = 0$, links ferromagnetisch, rechts antiferromagnetisch. Die Richtungen der Dimer-Spins sind für verschiedene Dimere voneinander unabhängig.*

daß sich in den Bereichen, in denen J_3 eine *weitere Frustration* bewirkt, die helikale Phase ausdehnt. Das ist leicht einzusehen, weil die helikale Phase aus den beiden anderen Phasen erst durch Frustration entstanden ist.

Das Grundzustandsphasendiagramm besitzt nach Müller-Hartmann *et al.* [14] eine *Spiegelungssymmetrie* an $J_2 = J_3$. Vertauscht man nämlich J_2 und J_3, so stellt das Ergebnis dieselbe Bond-Topologie dar. Das wird sichtbar, wenn man die Spins der J_1-Bonds vertauscht. Dadurch gelangt man wieder zu dem ursprünglichen Modell, ohne topologisch etwas geändert zu haben.

Die oben genannten Autoren nahmen neben den bereits erwähnten Phasen noch weitere klassische Phasen an, die sog. *kolumnaren Phasen*, die in einem recht großen Bereich im zweiten und vierten Quadranten ($J_2 J_3 < 0$) des J_2-J_3-Diagramms die helikalen Phasen verdrängen. Je nach Vorzeichen

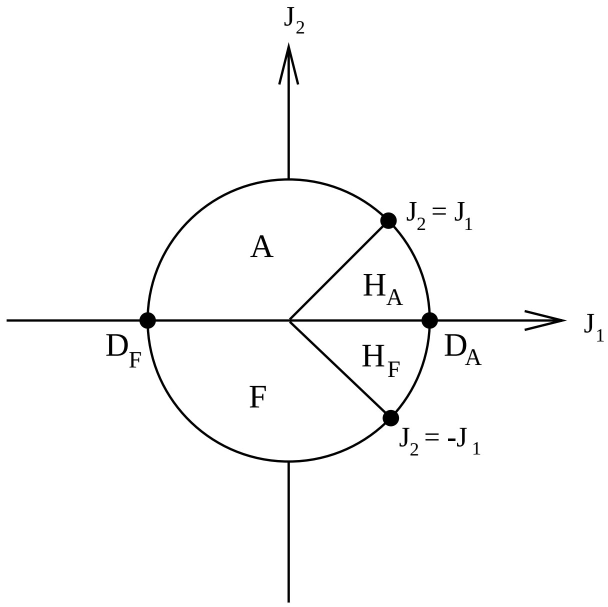

Abbildung 3.12 *Klassisches Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells (A: Néel-Phase; F: ferromagnetische Phase; H_A, H_F: helikale Phasen; D_A, D_F: isolierte Dimere).*

von J_2, J_3 gibt es eine antiferromagnetische kolumnare Phase C_A und eine ferromagnetische kolumnare Phase C_F (Abb. 3.15). Die Spins sind in diesen Phasen in einer Gitterrichtung antiferromagnetisch bzw. ferromagnetisch geordnet, während sie in der dazu senkrechten Richtung wie in Abb. 3.15 vierperiodisch strukturiert sind. Der Effekt davon ist, daß die Dimer-Energien sich gegenseitig wegheben. Die Energien dieser Phasen pro Gitterplatz sind

$$e_{C_A} = \frac{1}{4}(J_3 - J_2) \qquad (3.25)$$

$$e_{C_F} = \frac{1}{4}(J_2 - J_3). \qquad (3.26)$$

Müller-Hartmann [39] führte später in den helikalen Phasen einen zweiten Winkel ein. In diesen neuen helikalen Phasen beschreibt ein Winkel φ die Schraubenbewegung in die eine Gitterrichtung. Der andere Winkel ψ kennzeichnet das Vor- und Zurückdrehen in der dazu senkrechten Gitterrichtung, siehe Abb. 3.16. Die Energie dieses Zustandes pro Gitterplatz ist

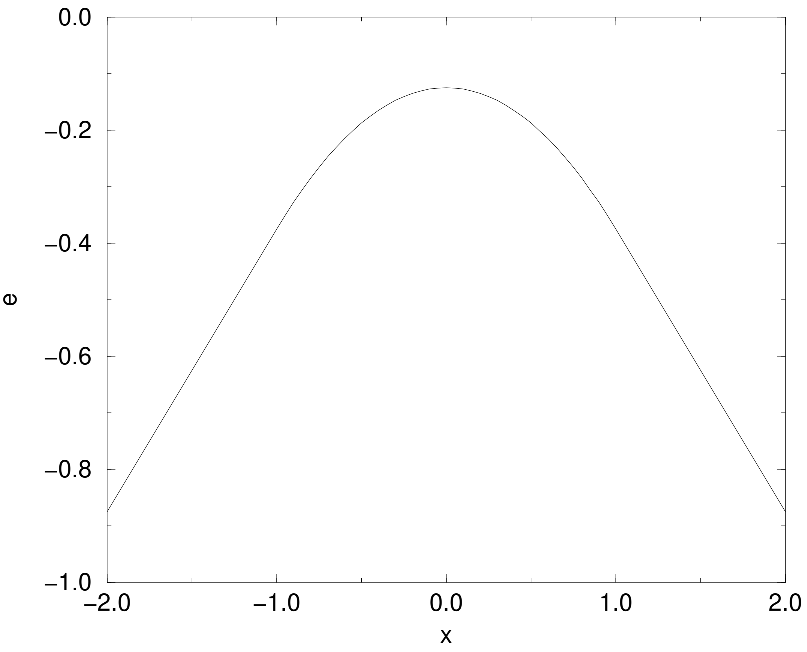

Abbildung 3.13 *Energiedichte e des Grundzustands des klassischen Shastry-Sutherland-Modells als Funktion von $x = J_2/J_1$.*

$$\boxed{e(\varphi,\psi) \;=\; \frac{J_1}{8}\cos(\varphi+\psi) + \frac{J_2}{4}(\cos\varphi + \cos\psi) + \frac{J_3}{4}(\cos\varphi + \cos(2\varphi+\psi)). \qquad (3.27)}$$

Setzt man beide Winkel gleich, so gelangt man zu den herkömmlichen helikalen Phasen. Durch diesen zusätzlichen Freiheitsgrad gelingt es, die Grundzustandsenergie so abzusenken, daß die kolumnaren Phasen vollständig aus dem Phasendiagramm verdrängt werden. Das werde ich später noch zeigen, nachdem ich die Energien der helikalen Phasen bestimmt habe.

Für die neuen helikalen Phasen werde ich nachfolgend die optimalen Zustände bzw. Energien in Abhängigkeit von den Kopplungsparametern berechnen. Dafür muß man die Energiedichte (3.27) minimieren. Zur Abkürzung führen wir $x := J_2/J_1$ und $y := J_3/J_1$ ein und setzen von nun an $J_1 := 1$.

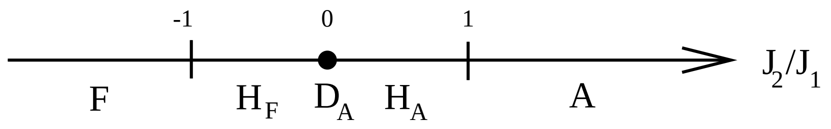

Abbildung 3.14 *Klassisches Phasendiagramm in Einheiten von J_1 (A: Néel-Phase; F: ferromagnetische Phase; H_A, H_F: helikale Phasen; D_A: isolierte antiferromagnetische Dimere). Der in Abb. 3.12 zu sehende Kreis wird bei D_F aufgeschnitten, da nur $J_1 > 0$ betrachtet wird.*

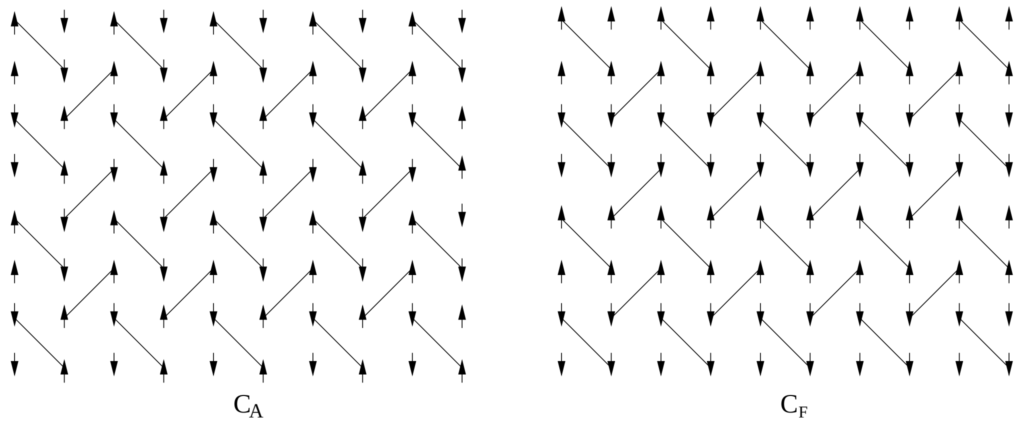

Abbildung 3.15 *Die beiden kolumnaren Phasen C_A (antiferromagnetisch, $J_2 > 0, J_3 < 3$) und C_F (ferromagnetisch, $J_2 < 0$ und $J_3 > 0$). Die J_2- und die J_3-Bonds sind nicht eingezeichnet. Beide Phasen liegen energetisch höher als die helikale Phase mit zwei Winkeln φ, ψ, verschwinden also vollständig aus dem klassischen Phasendiagramm.*

Das Auswerten der notwendigen Kriterien $\partial e/\partial\varphi = 0$ und $\partial e/\partial\psi = 0$ liefert

$$\begin{aligned} \sin(\varphi+\psi) + 2x\sin\varphi + 2y(\sin\varphi + 2\sin(2\varphi+\psi)) &= 0, && (3.28) \\ \sin(\varphi+\psi) + 2x\sin\psi + 2y\sin(2\varphi+\psi) &= 0. && (3.29) \end{aligned}$$

Als nächstes faktorisiert man die einzelnen Summanden mit Hilfe trigonometrischer Theoreme in $\sin\varphi, \sin\psi, \cos\varphi, \cos\psi$. Für die folgende Rechnung habe ich das Computeralgebra-Programm *Maple* zu Hilfe genommen. Im ersten Schritt löst man Gleichung (3.29) nach $\tan\psi$ auf,

$$\tan\psi = -\sin\varphi \frac{1 + 4y\cos\varphi}{2(x-y) + \cos\varphi(1 + 4y\cos\varphi)}. \qquad (3.30)$$

Wäre der Nenner auf der linken Seite gleich Null, so würde auf der x-Achse $\cos\varphi = -2x$ gelten. Dort muß aber Formel (3.24) erfüllt sein, die $\cos\varphi = -x$

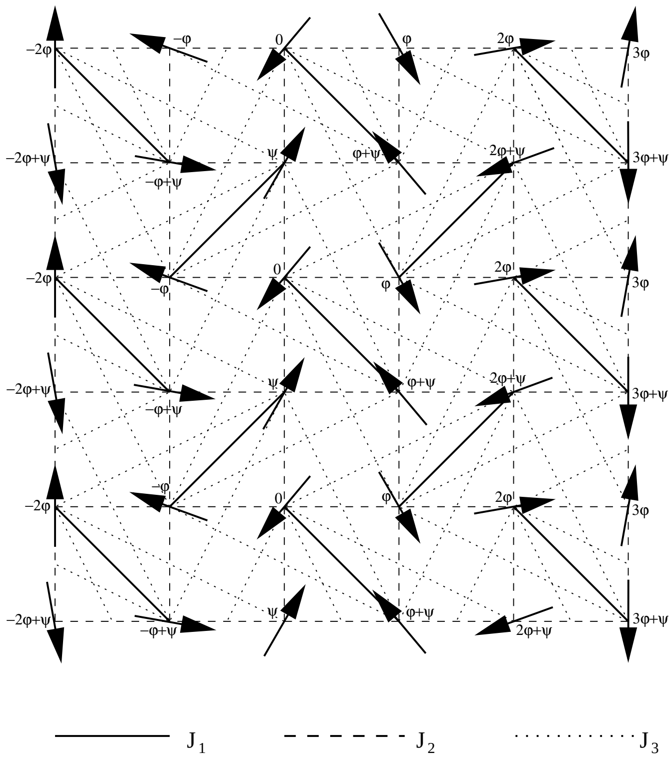

Abbildung 3.16 *Typischer klassischer helikaler Grundzustand mit lokalen Drehwinkeln der Spins gegenüber einem ausgezeichneten mit Drehwinkel 0.*

verlangt. Also tritt dieser Fall nicht ein. Im nächsten Schritt dividiert man Gleichung (3.28) durch $\cos\psi$. Dieser ist von Null verschieden, weil sonst nach Gleichung (3.30) auch $\sin\psi = 0$ gelten muß. Das kann aber nicht gleichzeitig der Fall sein. In die resultierende Gleichung

$$\begin{aligned} \tan\psi \quad & \left\{\cos\varphi(1+8y\cos^2\varphi) - 4y\right\} + \sin\varphi(1+8y\cos\varphi) \\ = \quad & -\frac{2(x+y)\sin\varphi}{\cos\psi} \end{aligned} \tag{3.31}$$

setze ich (3.30) ein. Ist $\sin\varphi \neq 0$, so dividiere ich dadurch, um im nächsten Schritt beide Seiten zu quadrieren. Der Fall $\sin\varphi = 0$ scheidet aus, da er auf der x-Achse zu einem falschen Ergebnis führt. Mit $1/\cos^2\psi = 1 + \tan^2\psi$ kann man wiederum Gleichung (3.30) einsetzen. Das Resultat davon kann man mit Maple faktorisieren und erhält

$$-16\,\frac{(x-y)^2\,(x^2 + \cos\varphi\,x + 4\,xy\cos\varphi^2 + 2\,xy + y^2 + y\cos\varphi)}{(\cos\varphi + 2\,x + 4\,y\cos\varphi^2 - 2\,y)^2} \quad = \quad 0. \tag{3.32}$$

Diese Gleichung wird durch

$$\cos\varphi = -\frac{2(x+y)}{1 \pm \sqrt{1-16xy}} \tag{3.33}$$

gelöst. Dabei ist die „+“-Lösung die physikalische, weil diese auf der x-Achse endlich bleibt und dort den richtigen Winkel $\cos\varphi = -2x$ liefert. Unter Beachtung der Beziehungen

$$\cos\psi = -(x+y)\frac{2(x-y)+\cos\varphi+4y\cos^2\varphi}{x+y+8xy\cos\varphi}, \tag{3.34}$$

$$\sin\psi = (x+y)\frac{(1+4y\cos\varphi)\sin\varphi}{x+y+8xy\cos\varphi}. \tag{3.35}$$

und durch Einsetzen in (3.27) erhält man die Energiedichte

$$\boxed{e_{\mathrm{hel}} = -\frac{1}{4}\frac{2(x-y)^4+(x^2+y^2)}{(x-y)^2\sqrt{1-16xy}+(x+y)^2}.} \tag{3.36}$$

Das muß die richtige helikale Energiedichte sein, weil sich hieraus im Spezialfall $y=0$ die Energiedichte $e = -J_2^2/4J_1 - J_1/8$ des herkömmlichen Modells wie in Gleichung (3.22) ergibt.

Formel (3.34) eignet sich auch zur Berechnung der Phasengrenzen. In der Néel-Phase sind die beiden Winkel gleich π, in der ferromagnetischen Phase gleich Null. Wenn man diese Winkel in Gleichung (3.33) einsetzt, bekommt man als Phasengrenzen zwei Quadriken

$$x^2+y^2+6xy-(x+y) = 0 \text{ für } \varphi=\pi \tag{3.37}$$

$$x^2+y^2+6xy+(x+y) = 0 \text{ für } \varphi=0, \tag{3.38}$$

die verschobene Hyperbeln darstellen. Es sind jeweils die Äste

$$\boxed{\begin{aligned} y &= \frac{1}{2}-3x+\frac{1}{2}\sqrt{1-8x+32x^2} \quad \textit{Néel – Helix}, \\ y &= -\frac{1}{2}-3x-\frac{1}{2}\sqrt{1+8x+32x^2} \quad \textit{Ferro – Helix} \end{aligned}.} \tag{3.39}$$

zu nehmen, die die x-Achse gemäß Abb. 3.14 bei $x=\pm1$ schneiden. Das Phasendiagramm ist in Abb. 3.17 zu sehen. Dort kann man erkennen, daß aus den ursprünglich zwei helikalen Phasen eine zusammenhängende geworden ist.

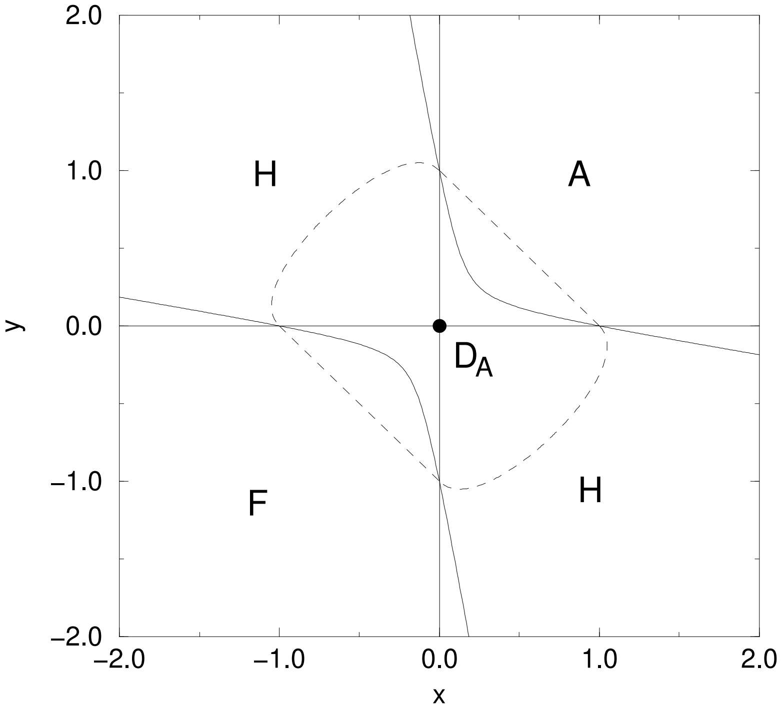

Abbildung 3.17 *Klassisches Phasendiagramm des verallgemeinerten Shastry-Sutherland-Gitters. Die gestrichelte Linie markiert den Übergang in die quantenmechanische Dimer-Phase in nullter Ordnung in* $1/S$ *(A: Néel-Phase; F: ferromagnetische Phase; H: helikale Phase;* D_A*: isolierte antiferromagnetische Dimere).*

Die Phasengrenzen zwischen den langreichweitig geordneten Phasen lassen sich auch wesentlich einfacher berechnen. Dazu benötigt man den Wert der helikalen Energie (3.36) gar nicht. Es genügt zu wissen, für welche x, y die ferromagnetische bzw. antiferromagnetische Energie als Funktion der beiden Winkel φ, ψ instabil wird (Sattelpunkt). Spätestens dort können diese Phasen nicht mehr eine optimale Energie liefern. Die Instabilität zeigt sich mathematisch in einer Änderung der *Definitheit der Hesse-Matrix* $\mathrm{hess}(e(\varphi, \psi))$ der Energie (3.27) in den Punkten $(0, 0)$ (Ferro-Helix) und (π, π) (Néel-Helix). Damit ein lokales Minimum der Energie vorliegen kann, muß die Hesse-Matrix positiv semidefinit sein. Das ist in zwei Dimensionen äquivalent zu

$$\boxed{\det(\mathrm{hess}(e(\varphi,\psi))) \geq 0 \text{ und } \mathrm{tr}(\mathrm{hess}(e(\varphi,\psi))) \geq 0. \qquad (3.40)}$$

Wenn also die Hesse-Determinante oder die Spur der Hesse-Matrix das Vorzeichen wechselt, liegt Instabilität vor. Berechnet man für die Energie (3.27) die Nullstellen der Hesse-Determinante in den beiden Punkten $(0,0)$ und (π,π), so erhält man sofort die beiden Quadriken (3.37) und (3.38).

Als Kriterium für die Übergänge zwischen den verschiedenen Phasen vergleicht man Energien oder sucht Instabilitäten. Dadurch erhält man zumindest definitive Phasengrenzen zwischen den hier angenommenen Phasen. Ich werde die Energien der helikalen mit denen der kolumnaren Phasen vergleichen, um zu zeigen, daß letztere aufgrund ihrer stets höheren Energie als Grundzustand nicht vorkommen. Setzt man

$$e_{\mathrm{hel}} = e_{C_F}, \qquad (3.41)$$

so erhält man die Gleichung

$$x^2 + y^2 + 2(x+y)^2(x-y)(x-y+1) = 0. \qquad (3.42)$$

Diese Gleichung ist nirgends lösbar. Der Faktor $(x-y)(x-y+1)$ verschwindet für $y = x, y = x+1$. In dem Streifen $y = x + c, c \in]0,1[$ ist er negativ, aber die linke Seite von Gleichung (3.42) bleibt immer noch positiv. In der antiferromagnetischen kolumnaren Phase gilt dasselbe, denn $e_{C_A}(x,y) = e_{C_F}(y,x)$ nach (3.25), aber $e_{\mathrm{hel}}(x,y) = e_{\mathrm{hel}}(y,x)$ nach (3.36). Es handelt sich also um dieselbe Fragestellung.

Die hier betrachteten klassischen Übergänge der geordneten Phasen sind von *zweiter Ordnung,* weil die helikalen Winkel sich kontinuierlich ändern und die Energien dabei stetig differenzierbar ineinander übergehen. Der Übergang von der helikalen Phase in die Phase der isolierten antiferromagnetischen Dimere kann nicht sinnvoll klassifiziert werden, weil letztere Phase nur aus einem Punkt besteht.

Um sich eine Vorstellung von den quantenmechanischen Verhältnissen zu schaffen, kann man zusätzlich durch Gleichsetzen der Energien einen Übergang *erster Ordnung* in die rein quantenmechanische Dimer-Phase (3.3) einführen. Er ist als gestrichelte Linie in Abb. 3.17 zu sehen und stellt quantenmechanisch die nullte Ordnung einer $1/S$-Entwicklung dar. Diese Singulett-Phase hat eine verschwindende Magnetisierung, infolgedessen diese unstetig von einem endlichen Wert in den geordneten Phasen auf Null springen muß. Mit Magnetisierung ist hier diejenige gemeint, welche lokal in Richtung des klassischen Spins gemessen wird. Insofern hat sie einen der klassischen Phase nachgeführten Charakter. Im Bereich der helikalen Phase ist der Übergang in die Dimer-Phase nach (3.36) und (3.5) über das Gleichsetzen der Energien durch

$$(x+y)^2 + (x-y)^4 = 2(x-y)^2 \tag{3.43}$$

charakterisiert. Eine geeignete Parametrisierung im zweiten Quadranten ist

$$x = -u\cos\alpha,\ y = u\sin\alpha \tag{3.44}$$

mit

$$u = \frac{\sqrt{1+3\sin(2\alpha)}}{(\cos\alpha+\sin\alpha)^2}. \tag{3.45}$$

Den anderen Teil erhält man durch Spiegelung an der Diagonalen. Die geraden Stücke werden durch die Gleichungen $y = 1 - x$ und $y = -1 - x$ beschrieben. Sie entstehen durch Gleichsetzen der Grundzustandsenergien (siehe hierfür (3.27) mit den Winkeln (π, π) bzw. $(0, 0)$)

$$e_{\text{néel}} = \frac{1}{8} - \frac{x}{2} - \frac{y}{2}, \tag{3.46}$$

$$e_{\text{ferro}} = \frac{1}{8} + \frac{x}{2} + \frac{y}{2} \tag{3.47}$$

mit $e_{\text{dim}} = -3/8$. Es kann nicht ausgeschlossen werden – wie bei den kolumnaren Phasen sichtbar wurde – daß es noch weitere klassische Phasen gibt.

Damit soll die Diskussion der Eigenschaften des klassischen Modells abgeschlossen sein. Sie war wichtig zum grundlegenden Verständnis des Shastry-Sutherland-Modells, und die dabei gefundenen klassischen Phasen dienen als Anhaltspunkt für eine semiklassische Behandlung des Quantenspin-Systems, das ich im restlichen Kapitel untersuchen werde.

3.4 Quantenmechanische Phasen

Das auffälligste Merkmal des quantenmechanischen Shastry-Sutherland-Modells ist das Auftreten der *Dimer-Phase.* Sie wird im Phasendiagramm in Abb. 3.17 um den Ursprung herum einen recht großen Raum einnehmen.

Für das Modell (3.1) weiß man nach Abschnitt 3.2, daß der Singulett-Produktzustand (3.2) für $-1 \leq J_2/J_1 \leq 1/2$ der exakte Grundzustand ist. Das gleiche gilt dann für den Hamiltonoperator (3.13) im Fall $J_3 = 0$. Wegen der Spiegelungs-Symmetrie des Phasendiagramms [14] erhält man dann ein Kreuz $-1 \leq x \leq 1/2, y = 0$ und $x = 0, -1 \leq y \leq 1/2$, auf dem der Dimer-Grundzustand vorliegen muß. Ich werde nun eine zu Abschnitt 3.2 analoge Rechnung durchführen, um einen Bereich im quantenmechanischen x-y-Phasendiagramm anzugeben, in dem der Singulett-Produktzustand *exakter Grundzustand* ist. Dazu diagonalisiere ich die in Abb. 3.18 gezeigte Vier-Spin-Plakette. Der Hamiltonoperator ist eine Summe solcher Plaketten. An jedem

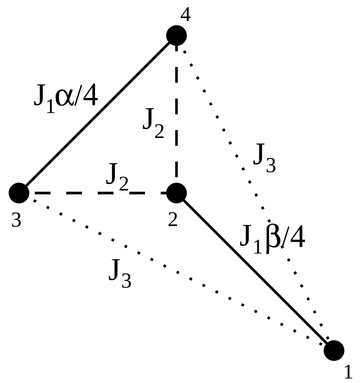

Abbildung 3.18 *Vier-Spin-Plakette zur Berechnung der Ausdehnung des Dimer-Grundzustandes im verallgemeinerten Shastry-Sutherland-Modell.*

Dimer-Bond hängen vier Plaketten, so daß der Plaketten-Hamiltonoperator

$$h_p = \frac{J_1}{4}(\alpha \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \beta \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) + J_2(\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4) + J_3(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4) \tag{3.48}$$

mit

$$\alpha + \beta = 2 \text{ und } \alpha, \beta \in [0, 2] \tag{3.49}$$

lautet. Dabei habe ich die Freiheit ausgenutzt, die Dimer-Bonds innerhalb einer Plakette unterschiedlich zu gewichten, denn es muß nur in der Summe aller Plaketten der Gitter-Hamiltonoperator herauskommen. Dieser zusätzliche Parameter wird später der Optimierung der Phasengrenze dienen. Die Vorgehensweise und Argumentation ist dieselbe wie in Abschnitt 3.2 und beruht wie dort auf der zu (3.8) analogen Ungleichung

$$E_0 \geq N e_p \tag{3.50}$$

für die tatsächliche Grundzustandsenergie E_0 und die Grundzustandsenergie der Vier-Spin-Plakette e_p. Die Plakette muß so gewählt werden, daß sie den Singulett-Produktzustand der beteiligten Dimere 1-2 und 3-4 als Eigenzustand hat, denn ist dieser der Grundzustand der Plakette, so ist der globale Singulett-Produktzustand der Dimere wegen Ungleichung (3.50) der Grundzustand des Gitters. Er ist nämlich wie in Abschnitt 3.2 begründet, ein Eigenzustand des Gitters, dessen Energie nach (3.50) eine *untere Schranke* der Grundzustandsenergie bildet.

Zur Diagonalisierung von h_p klassifiziert man die Eigenzustände wegen Spinerhaltung nach dem Dimer-Spin $\mathbf{S}_{34} = \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4$ und dem Gesamtspin $\mathbf{S}_{\text{ges}}$. Zur Kennzeichnung der Multipletts notiere ich noch den Gesamtspin $\mathbf{S}_{12} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ auf dem anderen Dimer und wähle die Notation

$$|S_{12} S_{34}; S m_z\rangle \tag{3.51}$$

für die Vier-Spin-Zustände der Plakette. Für die Zwei-Spin-Zustände auf den Dimeren schreibe ich das Singulett und die drei Triplett-Zustände als

$$\begin{aligned} |s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |t_1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |t_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |t_{-1}\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{3.52}$$

Die Plätze sind wie in Abb. 3.18 durchnumeriert, d. h.

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \tag{3.53}$$

bedeutet Zustand $|\psi_1\rangle$ auf Dimer 1-2 und Zustand $|\psi_2\rangle$ auf Dimer 3-4.
$\mathbf{S} = \mathbf{0}$. Der Spin-0-Unterraum wird von den beiden Singuletts

$$|00;00\rangle = |s\rangle \otimes |s\rangle \tag{3.54}$$

$$|11;00\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|t_{-1}\rangle \otimes |t_1\rangle - |t_0\rangle \otimes |t_0\rangle + |t_1\rangle \otimes |t_{-1}\rangle) \tag{3.55}$$

aufgespannt. Der Zustand $|00;00\rangle$ ist derjenige, der Grundzustand der Plakette sein soll, da man aus ihm den Singulett-Produktzustand des Gitters zusammensetzen kann. Im weiteren setzte ich wie im letzten Abschnitt $J_1 := 1, x := J_2/J_1$ und $y := J_3/J_1$. Die Energien der Singuletts sind

$$e_1 = = -\frac{3}{8} \tag{3.56}$$

$$e_2 = \frac{1}{8} - (x + y), \tag{3.57}$$

und hängen nicht von α, β ab. Der Zustand $|e_1\rangle$ liegt energetisch niedriger als der Zustand $|e_2\rangle$, falls

$$\boxed{y \leq \frac{1}{2} - x. \qquad (3.58)}$$

S = 1. Zu diesem Sektor gehören die drei Tripletts

$$|10;1m\rangle = |t_m\rangle \otimes |s\rangle, \qquad (3.59)$$

$$|01;1m\rangle = |s\rangle \otimes |t_m\rangle, \qquad (3.60)$$

$$|11;11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_0\rangle \otimes |t_1\rangle - |t_1\rangle \otimes |t_0\rangle), \qquad (3.61)$$

$$|11;10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_{-1}\rangle \otimes |t_1\rangle - |t_1\rangle \otimes |t_{-1}\rangle), \qquad (3.62)$$

$$|11;1{-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_{-1}\rangle \otimes |t_0\rangle - |t_0\rangle \otimes |t_{-1}\rangle), \qquad (3.63)$$

die jeweils entartet sind, und von denen die beiden letzteren mischen. Auf dem ersten Triplett (3.59) ist h_p diagonal mit der Energie

$$e_3 = \frac{1}{8}(2\alpha - 3). \qquad (3.64)$$

Diese ist mindestens so groß wie e_1 ($\alpha = 0$). Interessanter sind die anderen Tripletts. Für festes m mischen diese zu zweidimensionalen invarianten Unterräumen U_m, weil $[h_p, \mathbf{S}^z_{\text{ges}}] = 0$. Die zugehörigen 2×2-Blöcke von h_p lauten in der Basis $(|01;1m\rangle, |11;1m\rangle)$

$$h := h_p|_{U_m} = \begin{pmatrix} \frac{1}{8}(1-2\alpha) & \frac{1}{\sqrt{2}}(y-x) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(y-x) & \frac{1}{8} - \frac{1}{2}(x+y) \end{pmatrix}. \qquad (3.65)$$

Die Blöcke sind wegen $[h_p, \mathbf{S}^\pm_{\text{ges}}] = 0$ identisch und die Energien dementsprechend dreifach entartet. Die Energien berechnen sich aus

$$e_\pm = \frac{1}{2}\left(\mathrm{tr}h \pm \sqrt{(\mathrm{tr}h)^2 - 4\det h}\right). \qquad (3.66)$$

Durch Gleichsetzen mit $e_1 = -3/8$ erhält man

$$\frac{3}{2}\mathrm{tr}h + 4\det h + \frac{9}{16} = 0. \qquad (3.67)$$

Das liefert mit $\lambda := 1/2(1/2 - \alpha/4) \in [0, 1/4]$ die Quadrik

$$(y - x)^2 + 2\lambda(x + y - 1) = 0, \tag{3.68}$$

Führt man eine Hauptachsentransformation durch, so erhält man die Normalform

$$\boxed{\tilde{y}^2 + \sqrt{2}\,\lambda\tilde{x} = \lambda. \tag{3.69}}$$

Es handelt sich also für $\lambda > 0$ um eine Parabel. Die Hauptachsentransformation hängt nicht von λ ab. Der Singulett-Produktzustand liegt dabei im Inneren der Parabel vor. Dieser Bereich sollte möglichst groß sein, um eine exakte Aussage über den Grundzustand in einem maximalen Parameterbereich zu liefern. Anhand von Gleichung (3.69) erkennt man, daß der Scheitelpunkt nicht von λ abhängt und die Öffnung der Parabel proportional zu λ ist. Das ergibt ein optimales $\lambda = 1/4$ oder $\alpha = 0$.

Löst man nach Gleichung (3.68) nach y auf, so erhält man den für das Phasendiagramm relevanten Ausschnitt

$$\boxed{y = x - \frac{1}{4} \pm \frac{1}{4}\sqrt{9 - 16x}. \tag{3.70}}$$

S = 2. Das Quintuplett

$$\begin{aligned}
|11;22\rangle &= |t_1\rangle \otimes |t_1\rangle, && (3.71)\\
|11;21\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|t_0\rangle \otimes |t_1\rangle + |t_1\rangle \otimes |t_0\rangle\right), && (3.72)\\
|11;20\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}\left(|t_{-1}\rangle \otimes |t_1\rangle + 2|t_0\rangle \otimes |t_0\rangle + |t_1\rangle \otimes |t_{-1}\rangle\right), && (3.73)\\
|11;2{-1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|t_{-1}\rangle \otimes |t_0+\rangle + |t_0\rangle \otimes |t_{-1}\rangle\right), && (3.74)\\
|11;2{-2}\rangle &= |t_{-1}\rangle \otimes |t_{-1}\rangle. && (3.75)
\end{aligned}$$

ist entartet und hat die Energie

$$e_4 = \frac{1}{8} + \frac{1}{2}(x + y). \tag{3.76}$$

Die Ungleichung $-3/8 \leq e_4$ führt auf

$$\boxed{y \;=\; \geq -1 - x. \qquad (3.77)}$$

Nun bilde ich den Durchschnitt aller drei Bereiche (3.58), (3.163) und (3.77). Das resultierende Gebiet, in dem der Singulett-Produktzustand (3.3) exakter Grundzustand ist, wird in Abb. 3.19 dargestellt.

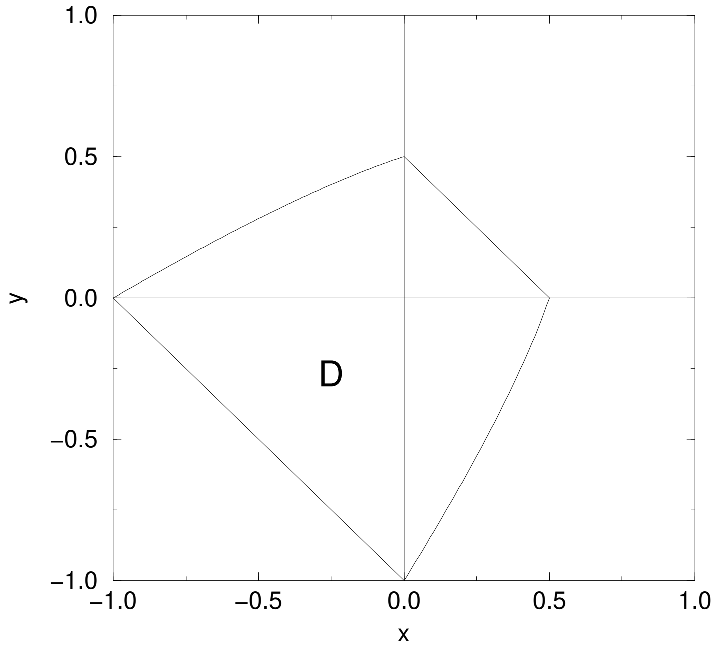

Abbildung 3.19 *Exakte untere Schranke für die Ausdehnung des Dimer-Grundzustandes D aus Gleichung (3.3) im verallgemeinerten Shastry-Sutherland-Modell. Die Bereiche auf den Koordinatenachsen sind bereits aus dem herkömmlichen Modell (3.1) bekannt.*

Welche Phase sich mit welcher Ordnung an den Singulett-Produktzustand anschließt, ist quantenmechanisch überwiegend unbekannt. Nur im Fall des Ferromagneten $J_2, J_3 < 0$ kann man noch eine exakte Aussage machen. Der global in einer Raumrichtung voll polarisierte ferromagnetische Zustand ist immer ein Eigenzustand des Modells, weil die Fluktuationsterme im Hamiltonoperator (3.13) verschwinden. Seine Energie ist genau die klassische (3.47), so daß sich die schon bekannte klassische Phasengrenze aus Abb. 3.17 (gestrichelte Linie) ergibt. Diese fällt genau mit der oben berechneten exakten Linie für die Ausdehnung des Singulett-Produktzustandes zusammen. Der hier beobachtete Phasenübergang erster Ordnung ist also eine exakte Eigenschaft des Modells im dritten Quadranten des x-y-Phasendiagramms.

Die klassische Phasengrenzlinie zwischen der ferromagnetischen Phase und der helikalen Phase bleibt ebenfalls quantenmechanisch erhalten. Der Grund hierfür ist aber subtiler. Ich werde einer Darstellung von Müller-Hartmann [39] folgend die helikale Energie in einer gewöhnlichen Schrödingerschen Störungstheorie bis zur zweiter Ordnung in den Winkeln entwickeln, um damit die Hesse-Matrix der quantenmechanischen Energie $e(\varphi, \psi)$ zu berechnen.

Im ersten Schritt drehe ich die lokalen Quantisierungsachsen in die klassische helikale Richtung wie in Abb. 3.16. Die lokalen Winkel, um die die klassischen Spins am Platz i gegen einen Referenz-Spin gedreht sind, bezeichne ich mit β_i. Rotiert werde um die y-Achse

$$\widetilde{\mathbf{S}}_i := D(\beta_i)\mathbf{S}_i \tag{3.78}$$

mit der lokalen Drehmatrix

$$D(\beta_i) \;:=\; \begin{pmatrix} \cos\beta_i & 0 & \sin\beta_i \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta_i & 0 & \cos\beta_i \end{pmatrix} \tag{3.79}$$

Diese Wahl der Rotationsachse hat den ästhetischen Vorteil, reelle Matrixelemente zu gewährleisten. Dann wird aus den Spinprodukten

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= (D(-\beta_i)\widetilde{\mathbf{S}}_i) \cdot (D(-\beta_j)\widetilde{\mathbf{S}}_j) && (3.80)\\ &= \widetilde{\mathbf{S}}_i \cdot (D(\alpha_{ij})\widetilde{\mathbf{S}}_j) && (3.81)\\ &= \widetilde{S}_i^x(\cos\alpha_{ij}\widetilde{S}_j^x + \sin\alpha_{ij}\widetilde{S}_j^z) + \widetilde{S}_i^y\widetilde{S}_j^y \\ &\quad + \widetilde{S}_i^z(-\sin\alpha_{ij}\widetilde{S}_j^x + \cos\alpha_{ij}\widetilde{S}_j^z) && (3.82)\\ &= h_{ij}^0(\alpha_{ij}) + h_{ij}^1(\alpha_{ij}) + h_{ij}^2(\alpha_{ij}) && (3.83) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \alpha_{ij} &:= \beta_i - \beta_j, && (3.84)\\ h_{ij}^0(\alpha_{ij}) &:= \cos\alpha_{ij}\widetilde{\mathbf{S}}_i \cdot \widetilde{\mathbf{S}}_j, && (3.85)\\ h_{ij}^1(\alpha_{ij}) &:= \sin\alpha_{ij}(\widetilde{S}_i^x\widetilde{S}_j^z - \widetilde{S}_i^z\widetilde{S}_j^x), && (3.86)\\ h_{ij}^2(\alpha_{ij}) &:= (1-\cos\alpha_{ij})\widetilde{S}_i^y\widetilde{S}_j^y. && (3.87) \end{aligned}$$

Mit der Definition

$$H_k := \sum_{\substack{\text{alle Bonds}\\ ij}} h_{ij}^k(\alpha_{ij}) \tag{3.88}$$

lautet der Modell-Hamiltonoperator (3.13)

$$\boxed{H = H_0 + H_1 + H_2. \tag{3.89}}$$

Dem klassischen Zustand entspricht jetzt der voll polarisierte Zustand

$$|\Uparrow\rangle = \bigotimes_{i=1}^{N} |\uparrow\rangle_i. \tag{3.90}$$

H_0 repräsentiert den klassischen Anteil, weil

$$\langle\Uparrow|H_0|\Uparrow\rangle = Ne(\varphi,\psi), \tag{3.91}$$

vgl. Gleichung (3.27). H_1 und H_2 beschreiben Quantenfluktuationen.

Für die Festlegung der relativen Winkel α_{ij} betrachte man Abb. 3.16. Je nach Kopplungstyp und relativem Winkel sind verschiedene Typen von Bonds zu erkennen, siehe Abb. 3.20. Zunächst kommen die relativen Winkel

$$\alpha_{ij} = \pm \begin{cases} \varphi+\psi & \textit{für Typ 1} \\ \varphi & \textit{für Typ 2} \\ \psi & \textit{für Typ 3} \\ \varphi & \textit{für Typ 4} \\ 2\varphi+\psi & \textit{für Typ 5} \end{cases} \tag{3.92}$$

vor. Wenn man für jeden Bond-Typ ein globales Vorzeichen von α_{ij} festlegt, so ist damit auch eine Reihenfolge der Operatoren in (3.86) festgelegt. Diese Konvention hat den Vorteil, daß man die sin- und cos-Terme bei den Summationen über die verschiedenen Bondtypen ausklammern kann.

Ich formuliere jetzt die Schrödingersche Störungstheorie für die helikale Phase formulieren. Wenn ich nach Gleichung (3.89) den Hamiltonoperator als Summe eines ungestörten Systems H_0 mit Grundzustand $|\Uparrow\rangle$ und einer Störung $H_1 + H_2$ auffasse, so lautet die Formel für die Grundzustandsenergie

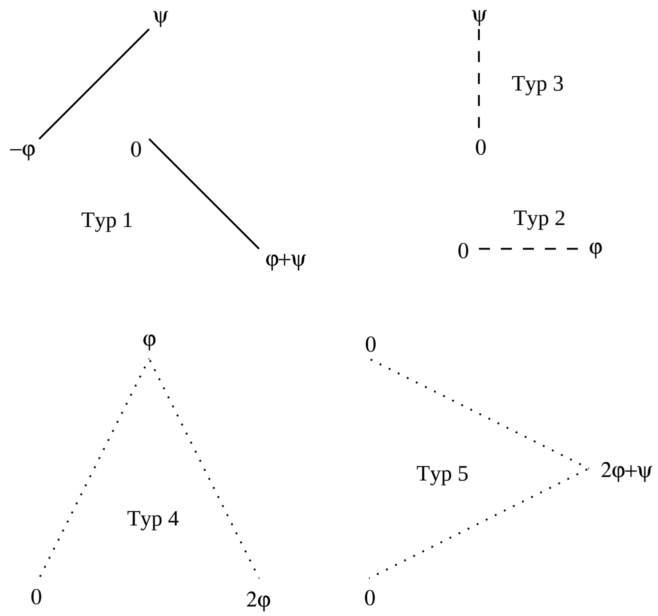

Abbildung 3.20 *Verschiedene Bond-Typen in der helikalen Phase.*

von H in zweiter Ordnung

$$\boxed{E_0^{(2)} = E_0 + \langle\uparrow|(H_1+H_2)|\uparrow\rangle - \sum_{n>0}\frac{|\langle E_n|(H_1+H_2)|\uparrow\rangle|^2}{E_n-E_0}. \quad (3.93)}$$

E_0 ist die klassische Energie

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{N}{8}[J_1\cos(\varphi+\psi)+2J_2(\cos\varphi+\cos\psi) \\ &\quad +J_3(\cos\varphi+\cos(2\varphi+\psi))] \qquad (3.94) \\ &\approx \frac{N}{8}(J_1+4J_2+4J_3)-\frac{N}{16}[J_1(\varphi+\psi)^2+2J_2(\varphi^2+\psi^2) \\ &\quad +2J_3(\varphi^2+(2\varphi+\psi)^2)]. \qquad (3.95) \end{aligned}$$

Der Beitrag erster Ordnung $\langle\uparrow|(H_1+H_2)|\uparrow\rangle$ verschwindet.

Bezeichnet ähnlich wie in Abschnitt 3.2 $[i,j]$ den Zustand, der aus

$$|\Uparrow\rangle = \bigotimes_{i=1}^{N}|\uparrow\rangle_i \qquad (3.96)$$

entsteht, wenn man das Triplett $|\uparrow\uparrow\rangle$ auf den Plätzen i,j durch den Singulett-Zustand $(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle)$ ersetzt, so ist die Wirkung von H_1 auf den Grundzustand $|\uparrow\rangle$ von H_0

$$\begin{aligned}
H_1|\uparrow\rangle &= J_1\frac{\sin(\varphi+\psi)}{2}\sum_{\text{Typ 1}}(S_i^- S_j^z - S_i^z S_j^-)|\uparrow\rangle \\
&\quad +J_2\frac{\sin\varphi}{2}\sum_{\text{Typ 2}}(S_i^- S_j^z - S_i^z S_j^-)|\uparrow\rangle \\
&\quad +J_2\frac{\sin\psi}{2}\sum_{\text{Typ 3}}(S_i^- S_j^z - S_i^z S_j^-)|\uparrow\rangle \\
&\quad +J_3\frac{\sin\varphi}{2}\sum_{\text{Typ 4}}(S_i^- S_j^z - S_i^z S_j^-)|\uparrow\rangle \\
&\quad +J_3\frac{\sin(2\varphi+\psi)}{2}\sum_{\text{Typ 5}}(S_i^- S_j^z - S_i^z S_j^-)|\uparrow\rangle \qquad (3.97)\\
&= \frac{1}{4}\left(J_1\sin(\phi+\psi)+2J_2\sin\psi+2J_3\sin(2\phi+\psi)\right)\sum_{\langle ij\rangle}[i,j] \\
&= \frac{1}{4}(J_1(\varphi+\psi)+2J_2\psi+2J_3(2\varphi+\psi))\sum_{\langle ij\rangle}[i,j] \\
&\quad +O(\varphi\psi,\varphi^2,\psi^2). \qquad (3.98)
\end{aligned}$$

Der Zustand $\sum_{\langle ij\rangle}[i,j]$ ist ein Eigenzustand von H_0 mit der Anregungsenergie

$$E - E_0 = -(J_1+2J_2+2J_3), \qquad (3.99)$$

die durch die Spinflip-Terme in H_0 zustande kommt, und der Norm $\sqrt{N}$. Damit erhält man das Matrixelement

$$\langle E|H_1|\uparrow\rangle \approx \frac{\sqrt{N}}{4}(J_1(\varphi+\psi)+2J_2\psi+2J_3(2\varphi+\psi)), \qquad (3.100)$$

das in führender Ordnung linear in den Winkeln ist. Wegen des Faktors $1-\cos\alpha_{ij} = O(\alpha_{ij}^2)$ liefert H_2 in der Störungsformel (3.93) über die Korrekturformel in zweiter Ordnung der Störung nur Beiträge von höherer als zweiter Ordnung in den Winkeln. Somit lautet die Energiekorrektur in zweiter Ordnung bzgl. φ, ψ pro Platz

$$\boxed{\begin{aligned} E_0^{(2)} &= \frac{1}{8}(J_1 + 4J_2 + 4J_3) \\ &\quad -\frac{1}{16}\left(J_1 + 2J_2 + 10J_3 - \frac{(J_1+4J_3)^2}{J_1+2J_2+2J_3}\right)\varphi^2. \end{aligned}} \tag{3.101}$$

Bemerkenswert ist, daß der Winkel ψ vollständig aus der Korrektur herausfällt, weil sich klassische und quantenmechanische Beiträge gegenseitig wegheben. Das bedeutet, daß die Energielandschaft im Punkt $(0,0)$ in Richtung von $\mathbf{e}_\psi$ flach ist. Die Hesse-Determinante

$$\frac{\partial^2 e}{\partial\varphi^2}(0,0)\frac{\partial^2 e}{\partial\psi^2}(0,0) - \left(\frac{\partial^2 e}{\partial\varphi\partial\psi}\right)(0,0) \tag{3.102}$$

verschwindet überall. Aber die Spur der Hesse-Matrix

$$\frac{\partial^2 e}{\partial\varphi^2}(0,0) + \frac{\partial^2 e}{\partial\psi^2}(0,0) = -\frac{1}{8}\left(1 + 2x + 10y - \frac{(1+4y)^2}{1+2x+2y}\right) \tag{3.103}$$

vollzieht einen Vorzeichenwechsel, wenn

$$\boxed{x^2 + y^2 + 6xy + (x+y) = 0.} \tag{3.104}$$

Diese Quadrik beschreibt aber nach Gleichung (3.38) genau die klassische Phasengrenze. Das bedeutet, daß es *keine Quantenkorrekturen* längs dieser klassischen Phasengrenze gibt. Das kann man auch so verstehen, daß wegen der Unabhängigkeit der Energiekorrekturen von ψ bis zur zweiter Ordnung dieser Winkel beliebig ist, so daß die rein quantenmechanischen Korrekturen durch die Wahl von

$$\psi = -\varphi\frac{J_1 + 4J_3}{J_1 + 2J_2 + 2J_3}. \tag{3.105}$$

zum Verschwinden gebracht werden können. Dann muß aber bereits die klassische Energie die richtige Phasengrenze liefern.

Damit habe ich alle bekannten exakten Aussagen über das quantenmechanische Grundzustandsphasendiagramm des Modells (3.13) zusammengefaßt. Darüber hinausgehend ist man auf Approximationen angewiesen. Der naheliegendste Ansatz ist es zu untersuchen, ob die klassischen Phasen, die ich im letzten Abschnitt beschrieben habe, ihr quantenmechanisches Analogon haben. Genauer bedeutet das die Fragestellung, ob die klassischen Phasen bei Quantenfluktuationen stabil bleiben oder deren langreichweitige Ordnung kollabiert. Hier bietet sich wieder die *lineare Spinwellentheorie* an. Diese entwickelt Quantenfluktuationen in $1/S$ um den lokalen klassischen Zustand. Dabei wird die spontan gebrochene Symmetrie in den Hamiltonoperator eingebaut, indem man die lokalen Abweichungen von der klassischen Spin-Richtung als bosonische Anregungen beschreibt.

Albrecht und Mila [11] untersuchten als erste den Hamilton-Operator (3.1) mit Hilfe dieser Methode. Überwiegend benutzten sie aber die Methode der *Schwinger-Bosonen-Mean-Field-Theorie (SBMFT),* die den Vorteil bietet, einen $SU(2)$-symmetrischer Ansatz darzustellen, der im Gegensatz zur Spinwellentheorie prinzipiell in der Lage ist, eine *Spinflüssigkeit* wie die Dimer-Phase zu beschreiben. So finden die Autoren auch einen Phasenübergang erster Ordnung einer Spinflüssigkeit *(Anregungslücke, zerfallende Korrelationen,verschwindende Magnetisierung)*, die das Äquivalent der Dimer-Phase in der SBMFT darstellt, in eine helikale Phase bei $x = 0.61$.

Die Néel-Phase wird laut ihnen bei $x = 0.91$ instabil und geht in zweiter Ordnung in die helikale Phase über. Die lineare Spinwellentheorie liefert einen kleineren Stabilitätsbereich der Néel-Phase gegenüber Quantenfluktuationen. Für $S = 1/2$ liegen die Phasengrenzen nur geringfügig auseinander, zeigen aber gegenüber dem klassischen Wert bei $x = 1$ gegenläufige Trends.

In der helikalen Phase zeigt sich in linearer Spinwellennäherung im Gegensatz zur SBMFT überhaupt keine langreichweitige Ordnung, weil dort die Impulsverteilung der Spinwellen $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ im gesamten Ausdehnungsbereich der Phase für gewisse $\mathbf{k}$ divergent ist. Das gilt nach Albrecht und Mila für beliebig große Spins. Sie identifizierten das als Artefakt der Methode. Die Ursache der Divergenz ist eine ganze *Nullmoden-Kreislinie* in der helikalen Phase, die zusätzlich zu der aus der Néel-Phase bekannten Nullmode im Ursprung $\mathbf{k} = 0$ existiert. Exakt darf das aber nicht gelten, weil die helikale Energie nach den Überlegungen des letzten Abschnitts nur vierfach *diskret* entartet ist. Für das Quanten-Spinsystem können die Amplituden lokaler Fluktuationen nicht beliebig klein werden , weshalb sich eine endliche Frequenz ergeben muß. Klassisch gibt es diese Beschränkung nicht, da die Spinwellen-Dispersion im Limes $S \to \infty$ zu Moden mit verschwindend geringer Amplitude gehört.

Miyahara und Ueda [5] fanden mittels *Monte-Carlo-Simulation und exakter Diagonalisierung* einen direkten Phasenübergang zwischen Dimer-Phase und Néel-Phase bei $x = 0.70(1)$. Er ist entweder von einer schwachen ersten Ordnung oder von zweiter Ordnung.

Weihong *et al.* [12] bestätigten dieses Ergebnis, ohne jedoch andere mögliche Phasen in Erwägung zu ziehen. Sie benutzten dabei eine Reihenentwicklungsmethode sog. *(Ising-Entwicklung* und *Dimer-Entwicklung)* und errechneten für den kritischen Punkt $x = 0.691(6)$. Bei ihnen findet dort ein Phasenübergang erster Ordnung statt, der sich in einer unstetigen Ableitung der Grundzustandsenergie als Funktion von x ausdrückt. Ein Sprung in der Untergittermagnetisierung wie bei Albrecht und Mila [11] konnte jedoch nicht gezeigt werden.

Denkbar sind andererseits auch weitere quantenmechanische Phasen. So liegt es nahe, aufgrund der starken Frustration in dem untersuchten Bereich die mögliche Existenz einer weiteren Singulett-Phase mit Anregungslücke anzunehmen, die sich noch zwischen die Dimer-Phase und die geordnete Phase schiebt. Koga und Kawakami [13] schlugen eine *Singulett-Plaketten-Phase* vor, die als Ausgangspunkt für eine Reihenentwicklung [38] dient. Die tatsächliche Phase soll mit diesem Limes adiabatisch zusammenhängen. Die Dimer-Phase geht in diese neue Phase bei $x = 0.677(2)$ in erster Ordnung über, um dann in zweiter Ordnung bei $x = 0.86(1)$ in die Néel-Phase zu münden. Etwas widersprüchlich daran ist, daß man bei Weihong *et al.* [12] in diesem Bereich noch eine endliche Untergittermagnetisierung sieht.

Müller-Hartmann *et al.* [14] bestätigten eher das Szenarium von Weihong et al., indem sie die *Flußgleichungsmethode* [18] benutzten, um das Schließen einer Triplett-Anregungslücke der Dimer-Phase bei $x = 0.697(2)$ zu zeigen. Dabei konnte der Übergang nicht von der geordneten Seite untersucht werden. Das werde ich in den folgenden Abschnitten ebenfalls mit der Flußgleichungsmethode tun. Zunächst aber approximiere ich die quantenmechanischen Phasen mit Hilfe der linearen Spinwellentheorie .

3.5 Spinwellentheorie

Die Spinwellentheorie nimmt lokal den klassischen Zustandsvektor als Ausgangspunkt, um den sie die Spinfluktuationen in $1/S$ entwickelt. Ich werde hier einer Darstellung von Müller-Hartmann [39] folgen. Ausgehend von den rotierten Spinoperatoren des letzten Abschnitts führe ich eine Holstein-Primakoff-Transformation wie in Abschnitt 2.5 durch. Führt man die Spinrotation (3.78) mit den optimalen helikalen Winkeln durch, so braucht man für die lineare Spinwellentheorie den Operator H_1 nicht zu berücksichtigen. Wie nämlich in (3.98) gezeigt, führt H_1 von dem Grundzustand $|\Uparrow\rangle$ in den angeregten Zustand $\sum_{\langle ij\rangle}[i,j]$. Der Vorfaktor dabei ist proportional zur partiellen Ableitung $\partial e/\partial\psi$. Diese muß aber für den optimalen helikalen Zustand verschwinden, weil dieser ein lokales Minimum der Grundzustandsenergie $e(\varphi,\psi)$ (3.27) liefert. Das bedeutet, daß der Operator H_1 den Grundzustand nicht mit angeregten Zuständen verbindet,

$$H_1|\uparrow\rangle \;=\; 0. \tag{3.106}$$

Genau das würden lineare Beiträge in den Holstein-Primakoff-Bosonen nicht tun, weshalb sie in H_1 nicht vertreten sein dürfen. H_1 liefert dann frühestens Beiträge in dritter Ordnung, weil sie die nächsthöhere ist.

Für die weitere Rechnung müssen wir explizite Gitter-Koordinaten wählen. Dazu verwenden wir eine Elementarzelle der Kantenlänge 1 wie in Abb. 3.21. Es handelt sich um ein *Quadratgitter mit vieratomiger Basis.* Zur besseren

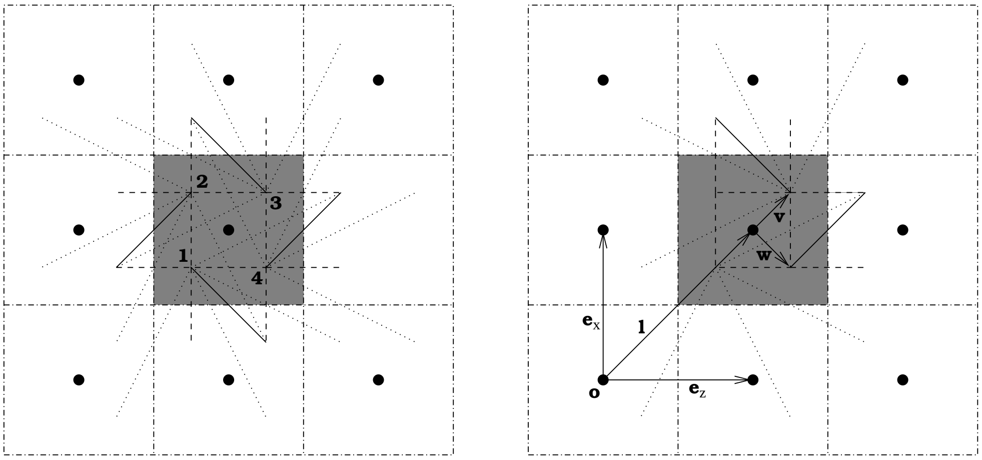

Abbildung 3.21 *Elementarzellen mit jeweils vier Spins im verallgemeinerten Shastry-Sutherland-Gitter. Nur die Plätze der mittleren Elementarzelle sind eingezeichnet. Links sind alle in die Zelle hineinragenden Bonds dargestellt. Rechts sind nur noch die Bonds sichtbar, die ganz zu dieser Elementarzelle gezählt werden.*

Übersicht definieren wir

$$\begin{aligned} h_{ij}(\alpha_{ij}) \;&:=\; h^0_{ij}(\alpha_{ij}) + h^2_{ij}(\alpha_{ij}) \\ &=\; \cos\alpha_{ij}\widetilde{\mathbf{S}}_i\cdot\widetilde{\mathbf{S}}_j + (1-\cos\alpha_{ij})\widetilde{S}^y_i\widetilde{S}^y_j. \end{aligned} \tag{3.107}$$

In linearer Näherung behält man davon

$$\begin{aligned} h_{ij}(\alpha_{ij}) \;\approx\; & \cos\alpha_{ij}\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}(b^\dagger_i b_i + b^\dagger_j b_j)\right) + \frac{\cos\alpha_{ij}+1}{4}\left(b_i b^\dagger_j + b^\dagger_i b_j\right) \\ & + \frac{\cos\alpha_{ij}-1}{4}\left(b_i b_j + b^\dagger_i b^\dagger_j\right). \end{aligned} \tag{3.108}$$

Der Gittervektor $\mathbf{l}\in\mathbb{Z}^2$ zähle die Elementarzellen ab. Für die Ortsvektoren der vier Plätze $\mathbf{r}_i$ in der Elementarzelle $\mathbf{l}$ gilt dann

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}_1(\mathbf{l}) &= \mathbf{l}-\mathbf{v} && (3.109)\\
\mathbf{r}_2(\mathbf{l}) &= \mathbf{l}-\mathbf{w} && (3.110)\\
\mathbf{r}_3(\mathbf{l}) &= \mathbf{l}+\mathbf{v} && (3.111)\\
\mathbf{r}_4(\mathbf{l}) &= \mathbf{l}+\mathbf{w}, && (3.112)
\end{aligned}$$

wenn zusätzlich $\mathbf{v} := (\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x)/4$ und $\mathbf{w} := (\mathbf{e}_z - \mathbf{e}_x)/4$ definiert wird. Der Hamiltonoperator lautet mit diesen Konventionen

$$\begin{aligned}
H \;=\; & \sum_{\mathbf{l}} \{ J_1[h_{\mathbf{r}_4(\mathbf{l}),\mathbf{r}_2(\mathbf{l}+\mathbf{e}_z)}(\varphi+\psi) + h_{\mathbf{r}_3(\mathbf{l}),\mathbf{r}_1(\mathbf{l}+\mathbf{e}_x)}(\varphi+\psi)] \\
& +J_2[h_{\mathbf{r}_1(\mathbf{l}),\mathbf{r}_2(\mathbf{l})}(\psi) + h_{\mathbf{r}_2(\mathbf{l}),\mathbf{r}_3(\mathbf{l})}(\varphi) + h_{\mathbf{r}_3(\mathbf{l}),\mathbf{r}_4(\mathbf{l})}(\psi) + h_{\mathbf{r}_4(\mathbf{l}),\mathbf{r}_1(\mathbf{l})}(\varphi) \\
& +h_{\mathbf{r}_4(\mathbf{l}),\mathbf{r}_1(\mathbf{l}+\mathbf{e}_z)}(\varphi) + h_{\mathbf{r}_3(\mathbf{l}),\mathbf{r}_2(\mathbf{l}+\mathbf{e}_z)}(\varphi) + h_{\mathbf{r}_2(\mathbf{l}),\mathbf{r}_1(\mathbf{l}+\mathbf{e}_x)}(\psi) + h_{\mathbf{r}_3(\mathbf{l}),\mathbf{r}_4(\mathbf{l}+\mathbf{e}_x)}(\psi)] \\
& +J_3[h_{\mathbf{r}_1(\mathbf{l}),\mathbf{r}_2(\mathbf{l}+\mathbf{e}_z)}(2\varphi+\psi) + h_{\mathbf{r}_3(\mathbf{l}),\mathbf{r}_2(\mathbf{l}+\mathbf{e}_z+\mathbf{e}_x)}(\varphi) + h_{\mathbf{r}_1(\mathbf{l}),\mathbf{r}_2(\mathbf{l}+\mathbf{e}_z-\mathbf{e}_x)}(2\varphi+\psi) \\
& +h_{\mathbf{r}_3(\mathbf{l}),\mathbf{r}_2(\mathbf{l}+\mathbf{e}_x)}(\varphi) + h_{\mathbf{r}_1(\mathbf{l}),\mathbf{r}_4(\mathbf{l}-\mathbf{e}_z-\mathbf{e}_x)}(\varphi) + h_{\mathbf{r}_1(\mathbf{l}),\mathbf{r}_4(\mathbf{l}-\mathbf{e}_x)}(\varphi) \\
& +h_{\mathbf{r}_3(\mathbf{l}),\mathbf{r}_4(\mathbf{l}-\mathbf{e}_z)}(2\varphi+\psi) + h_{\mathbf{r}_3(\mathbf{l}),\mathbf{r}_4(\mathbf{l}-\mathbf{e}_z+\mathbf{e}_x)}(2\varphi+\psi)]\}. \qquad (3.113)
\end{aligned}$$

Die Herkunft der Summanden kann man graphisch in Abb. 3.21 ablesen. Im nächsten Schritt setze ich die Bosonen-Darstellung (3.108) ein und führe eine Gitter-Fourier-Transformation

$$b_{\mathbf{k}_i} := \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{l}} b_{\mathbf{r}_i(\mathbf{l})} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i(\mathbf{l})} \qquad (3.114)$$

für $i = 1, \ldots, 4$ durch. Dabei bezeichne V die Anzahl der Elementarzellen des Gitters, in unserem Fall also $N/4$. Die Rücktransformation lautet

$$b_{\mathbf{r}_i(\mathbf{l})} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}}^{1.\ \mathrm{BZ}} b_{\mathbf{k}_i} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i(\mathbf{l})}. \qquad (3.115)$$

In der Fourier-Darstellung wird aus dem in den Holstein-Primakoff-Bosonen linearisierten Hamiltonoperator

$$
\begin{aligned}
H_{\text{lsw}} &= \sum_{\mathbf{k}} \{4e_{\text{kl}}(1 - n_{\mathbf{k}_1} - n_{\mathbf{k}_2} - n_{\mathbf{k}_3} - n_{\mathbf{k}_4}) \\
&\frac{1}{4}\Big[J_1(\cos(\varphi+\psi)-1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_4} b^\dagger_{-\mathbf{k}_2} e^{-i(k_z+k_x)/2} + b^\dagger_{\mathbf{k}_3} b^\dagger_{-\mathbf{k}_1} e^{i(k_z-k_x)/2} + h.c.) \\
&+2J_2(\cos\varphi - 1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_2} b^\dagger_{-\mathbf{k}_3}\cos(k_z/2) + b^\dagger_{\mathbf{k}_4} b^\dagger_{-\mathbf{k}_1}\cos(k_z/2) + h.c.) \\
&+2J_2(\cos\psi - 1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_1} b^\dagger_{-\mathbf{k}_2}\cos(k_x/2) + b^\dagger_{\mathbf{k}_3} b^\dagger_{-\mathbf{k}_4}\cos(k_x/2) + h.c.) \\
&+2J_3(\cos\varphi - 1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_3} b^\dagger_{-\mathbf{k}_2} e^{-ik_x}\cos(k_z/2) + b^\dagger_{\mathbf{k}_1} b^\dagger_{-\mathbf{k}_4} e^{ik_x}\cos(k_z/2) + h.c.) \\
&+2J_3(\cos(2\varphi+\psi) - 1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_1} b^\dagger_{-\mathbf{k}_2} e^{-ik_z}\cos(k_x/2) \\
&+b^\dagger_{\mathbf{k}_3} b^\dagger_{-\mathbf{k}_4} e^{ik_z}\cos(k_x/2) + h.c.)\Big] \\
&\frac{1}{4}\Big[J_1(\cos(\varphi+\psi)+1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_2} e^{-i(k_z+k_x)/2} + b^\dagger_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_1} e^{i(k_z-k_x)/2} + h.c.) \\
&+2J_2(\cos\varphi + 1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} + b^\dagger_{\mathbf{k}_4} b_{\mathbf{k}_1} + h.c.)\cos(k_z/2) \\
&+2J_2(\cos\psi + 1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} + b^\dagger_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} + h.c.)\cos(k_x/2) \\
&+2J_3(\cos\varphi + 1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_2} e^{-ik_x} + b^\dagger_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_4} e^{ik_x} + h.c.)\cos(k_z/2) \\
&+2J_3(\cos(2\varphi+\psi) + 1)(b^\dagger_{\mathbf{k}_1} b_{\mathbf{k}_2} e^{-ik_z} + b^\dagger_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} e^{ik_z} + h.c.)\cos(k_x/2)\Big]\Big\}
\end{aligned}
\tag{3.116}
$$

mit der klassischen Energiedichte (vgl. (3.27) und (3.36))

$$
\begin{aligned}
e_{\text{kl}} &= \frac{J_1}{8}\cos(\varphi+\psi) + \frac{J_2}{4}(\cos\varphi + \cos\psi)) + \frac{J_3}{4}(\cos\varphi + (2\varphi+\psi)) \\
&= -\frac{1}{4}\frac{2(x-y)^4 + (x^2+y^2)}{(x-y)^2\sqrt{1-16xy} + (x+y)^2}.
\end{aligned}
\tag{3.117}
$$

Zur Diagonalisierung faßt man Terme zu $\mathbf{k}$ und $-\mathbf{k}$ zusammen. Dabei benutze ich die Vektor-Schreibweise

$$X^t_{\mathbf{k}} := (b_{\mathbf{k}_1}, b_{\mathbf{k}_2}, b_{\mathbf{k}_3}, b_{\mathbf{k}_4}, b^\dagger_{-\mathbf{k}_1}, b^\dagger_{-\mathbf{k}_2}, b^\dagger_{-\mathbf{k}_3}, b^\dagger_{-\mathbf{k}_4}). \tag{3.118}$$

Damit erhält man die Matrix-Darstellung

$$H_{\text{lsw}} = \sum_{\mathbf{k}, k_x \geq 0} H^{(\mathbf{k},-\mathbf{k})}_{\text{lsw}} \tag{3.119}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}, k_x \geq 0} \left(24e_{\text{kl}} + (X^t_{\mathbf{k}})^\dagger M_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}}\right) \tag{3.120}$$

mit der 4×4-Block-Matrix

$$M_{\mathbf{k}} \;:=\; \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}} & B_{\mathbf{k}} \\ B_{\mathbf{k}} & A_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \tag{3.121}$$

Die beiden hermiteschen Matrizen $A_{\mathbf{k}}$ und $B_{\mathbf{k}}$ sind in Anhang A angegeben. In der x-p-Darstellung

$$x_{\mathbf{k}_i} \;:=\; \frac{1}{\sqrt{2}}(b^\dagger_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}_i}) \tag{3.122}$$

$$p_{\mathbf{k}_i} \;:=\; \frac{i}{\sqrt{2}}(b^\dagger_{\mathbf{k}} - b_{-\mathbf{k}_i}) \tag{3.123}$$

$$Y^t_{\mathbf{k}} \;:=\; (x_{-\mathbf{k}_1}, x_{-\mathbf{k}_2}, x_{-\mathbf{k}_3}, x_{-\mathbf{k}_4}, p_{\mathbf{k}_1}, p_{\mathbf{k}_2}, p_{\mathbf{k}_3}, p_{\mathbf{k}_4}) \tag{3.124}$$

werden aus den $(X^t_{\mathbf{k}})^\dagger M_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}}$ gekoppelte harmonische Oszillatoren,

$$(X^t_{\mathbf{k}})^\dagger M_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}} \;=\; (Y^t_{\mathbf{k}})^\dagger T_{\mathbf{k}} Y_{\mathbf{k}} \tag{3.125}$$

mit der blockdiagonalen Matrix

$$\boxed{T_{\mathbf{k}} \;:=\; S^\dagger M S = \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & A_{\mathbf{k}} - B_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.} \tag{3.126}$$

Die vektoriell geschriebenen Bosonen werden durch $X_{\mathbf{k}} = SY_{\mathbf{k}}$ ineinander transformiert. Die 8×8-Matrix S besteht aus 4×4-Blöcken,

$$S \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix}. \tag{3.127}$$

Zusammenfassend hat man die Form

$$\boxed{H_{\mathrm{lsw}} \;=\; \sum_{\mathbf{k}, k_x \geq 0} \left(24 e_{\mathrm{kl}} + (Y^t_{\mathbf{k}})^\dagger T_{\mathbf{k}} Y_{\mathbf{k}}\right)} \tag{3.128}$$

Um die vier gekoppelten Oszillatoren zu diagonalisieren, finde man als erstes eine unitäre Transformation U, die $A_{\mathbf{k}} - B_{\mathbf{k}}$ diagonal macht

$$D^p_{\mathbf{k}} \;:=\; U^\dagger (A_{\mathbf{k}} - B_{\mathbf{k}}) U. \tag{3.129}$$

Die $x_{\mathbf{k}_i}$ werden mittransformiert

$$X_{\mathbf{k}} \;=\; \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix} Z^{(1)}_{\mathbf{k}}. \tag{3.130}$$

Die $Z^{(1)}_{\mathbf{k}}$ werden noch umskaliert

$$Z^{(1)}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \sqrt{D^p_{\mathbf{k}}} & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{D^p_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} Z^{(2)}_{\mathbf{k}}. \tag{3.131}$$

Die unitäre Transformation V diagonalisiere den verbleibenden $x_{\mathbf{k}}$-Block,

$$D^x_{\mathbf{k}} := V^\dagger \sqrt{D^p_{\mathbf{k}}} U^\dagger (A_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}}) U \sqrt{D^p_{\mathbf{k}}} V \tag{3.132}$$

und

$$Z^{(2)}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} V & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} Z^{(3)}_{\mathbf{k}}. \tag{3.133}$$

Damit lautet jetzt der Spinwellen-Hamiltonoperator

$$H_{\mathrm{lsw}} = \sum_{\mathbf{k},k_x \geq 0} \left(24 e_{\mathrm{kl}} + ((Z^{(3)}_{\mathbf{k}})^t)^\dagger \begin{pmatrix} D^x_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} Z^{(3)}_{\mathbf{k}} \right) \tag{3.134}$$

$$= 3 e_{\mathrm{kl}} N + \sum_{\mathbf{k},k_x \geq 0} \sum_{i=1}^{4} \left(p^{(3)\dagger}_{\mathbf{k}_i} p^{(3)}_{\mathbf{k}_i} + (D^x_{\mathbf{k}})_{ii} x^{(3)\dagger}_{\mathbf{k}_i} x^{(3)}_{\mathbf{k}_i} \right) \tag{3.135}$$

Dabei ist zu beachten, daß die erste Brillouin-Zone, über die hier summiert wird, $N/4$ Wellenvektoren $\mathbf{k}$ enthält, weil das Quadratgitter eine vieratomige Basis hat.

Um die Grundzustandsenergie zu berechnen, muß man die vom harmonischen Oszillator bekannte Formel $E_0 = \hbar\omega/2$ für die Nullpunktsenergie einsetzen. Wegen $(D^x_{\mathbf{k}})_{ii} = \omega_i^2/4$ nach (3.135) folgt für die Energie pro Platz im thermodynamischen Limes

$$\boxed{e_0 = 3 e_{\mathrm{kl}} + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{[0,\pi]} dk_x \int_{[-\pi,\pi]} dk_z \,\mathrm{tr} \sqrt{D^x_{\mathbf{k}}}. \qquad (3.136)}$$

Ab hier habe ich numerisch mit Hilfe des Computeralgebra-Programms *Mathematica* die Matrix $D^x_{\mathbf{k}}$ berechnet und die Grundzustandsenergie nach Formel (3.136) integriert. Die Energie ist im Gegensatz zur den Impulsverteilungen $\langle n_{\mathbf{k}_i} \rangle$ der vier Spinwellen-Moden im betrachteten Bereich des Phasendiagramms konvergent. Die Mittelwerte der Verteilungen über die erste Brioullin-Zone sind identisch, und der Mittelwert über i divergiert wie k^{-1} in $\mathbf{k} = 0$ und längs einer ganzen Nullmoden-Linie bei $\cos k_x + \cos k_y = 2\cos^2\varphi$ wie δk^{-1}. Das führt zu einer logarithmischen Divergenz der Mittelwerte

$\langle n_{\mathbf{k}_i} \rangle_{1.\,\mathrm{BZ}}$ der vier Spinwellen-Besetzungszahlen, die schon Albrecht und Mila [11] für das herkömmliche Shastry-Sutherland-Modell (3.1) beobachtet haben. Wie schon im letzten Abschnitt erläutert, deuteten sie den Zusammenbruch der Methode an dieser Stelle als Artefakt. Trotzdem ist es prinzipiell möglich, für die Grundzustandsenergie eine gute Abschätzung durch die lineare Spinwellennäherung zu bekommen.

Die resultierende Phasengrenze zur Dimer-Phase, die durch Gleichsetzen der beiden Energien gewonnen wurde, ist in Abb. 3.22 zu sehen. Dort habe ich nur den vierten Quadraten dargestellt, weil die Phasengrenze im zweiten Quadranten durch Spiegelung an $y = x$ hervorgeht. Durch die Quantenfluk-

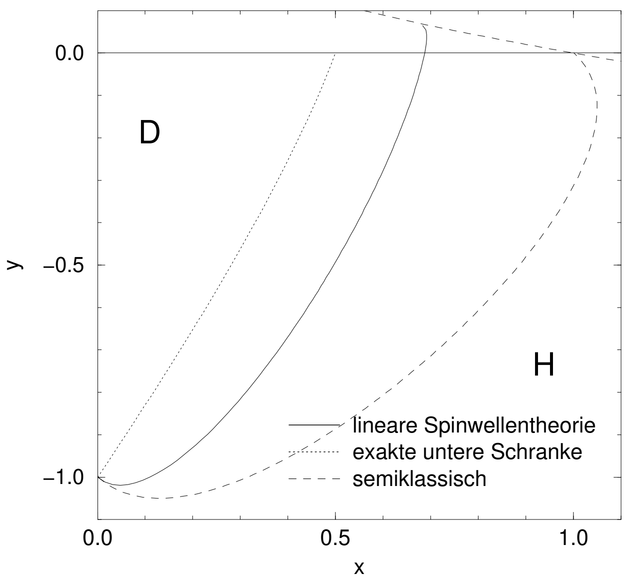

Abbildung 3.22 *Grenze zwischen der helikalen Phase H und der Dimer-Phase D in linearer Spinwellennäherung. Zum Vergleich sieht man die entsprechenden Ausschnitte aus Abb. 3.17 und Abb. 3.19. Die Quantenfluktuationen liefern eine deutliche Renormierung der Energie der helikalen Phase.*

tuationen wird die Energie der helikalen Phase renormiert. Es findet eine deutliche Verschiebung der semiklassischen Phasengrenze zugunsten der helikalen Phase statt.

Das Resultat ist auch im Einklang mit der exakten unteren Schranke für die Ausdehnung der Dimer-Phase aus dem letzten Abschnitt, weil diese Grenze nicht überschritten wird. Mangels absoluter Vergleichswerte aus anderen Verfahren läßt sich die Güte der linearen Spinwellentheorie in diesem Modell schwer abschätzen.

Im nächsten Abschnitt wende ich die Flußgleichungsmethode auf das Shastry-Sutherland-Modell an, um die Ergebnisse der linearen Spinwellentheorie mit denen einer anderen Methode zu vergleichen. Diese Methode hatte ich im zweiten Kapitel schon erfolgreich am Quadratgitter erprobt, und wie ich gleich zeigen werde, ist sie auch für den allgemeineren Fall des Shastry-Sutherland-Gitters analog anwendbar.

3.6 Flußgleichungsmethode

Um die Flußgleichungsmethode wie in Kapitel 2 erfolgreich anwenden zu können, muß ich den Hamiltonoperator (3.13) wie dort auf die in Abschnitt 1.4 beschriebene Ausgangsform bringen. Das gelingt an dieser Stelle ähnlich wie in Abschnitt 2.2. Ich rotiere als erstes die lokalen Quantisierungsachsen der Spins in die Richtungen des klassischen lokalen Spinvektors, wie schon in den Gleichungen (3.78) und (3.79) geschehen,

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= \widetilde{S}_i^x \left(\cos\alpha_{ij}\widetilde{S}_j^x + \sin\alpha_{ij}\widetilde{S}_j^z\right) + \widetilde{S}_i^z \left(-\sin\alpha_{ij}\widetilde{S}_j^x + \cos\alpha_{ij}\widetilde{S}_j^z\right) \\
&\quad + \widetilde{S}_i^y \widetilde{S}_j^y \qquad (3.137) \\
&= \cos\alpha_{ij}\widetilde{S}_i^z\widetilde{S}_j^z + \frac{\cos\alpha_{ij}}{4}\left(\widetilde{S}_i^+ + \widetilde{S}_i^-\right)\left(\widetilde{S}_j^+ + \widetilde{S}_j^-\right) \\
&\quad + \frac{\sin\alpha_{ij}}{2}\left(\widetilde{S}_i^+ + \widetilde{S}_i^-\right)\widetilde{S}_j^z \\
&\quad - \frac{\sin\alpha_{ij}}{2}\widetilde{S}_i^z\left(\widetilde{S}_j^+ + \widetilde{S}_j^-\right) - \frac{1}{4}\left(\widetilde{S}_i^+ - \widetilde{S}_i^-\right)\left(\widetilde{S}_j^+ - \widetilde{S}_j^-\right). \qquad (3.138)
\end{aligned}$$

Unter Beachtung von

$$\widetilde{S}_i^z\widetilde{S}_j^z = \left(\widetilde{S}_i^z - \frac{1}{2}\right)\left(\widetilde{S}_j^z - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\left(\widetilde{S}_i^z + \widetilde{S}_j^z\right) - \frac{1}{4} \qquad (3.139)$$

erhält man

$$
\begin{aligned}
\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \;\; = \;\; & \frac{\cos\alpha_{ij}}{4} - \frac{\cos\alpha_{ij}}{2}\left(\frac{1}{2} - \widetilde{S}_i^z + \frac{1}{2} - \widetilde{S}_j^z\right) \\
& \underbrace{+\cos\alpha_{ij}\left(\widetilde{S}_i^z - \frac{1}{2}\right)\left(\widetilde{S}_j^z - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{4}\left(\cos\alpha_{ij}+1\right)\left(\widetilde{S}_i^+\widetilde{S}_j^- + \widetilde{S}_i^-\widetilde{S}_j^+\right)}_{=:\mathcal{T}_0^{ij}(\alpha_{ij})} \\
& + \underbrace{\frac{\sin\alpha_{ij}}{2}\left(\widetilde{S}_i^-\widetilde{S}_j^z - \widetilde{S}_i^z\widetilde{S}_j^-\right)}_{=:\mathcal{T}_1^{ij}(\alpha_{ij})} + \underbrace{\frac{\sin\alpha_{ij}}{2}\left(\widetilde{S}_i^+\widetilde{S}_j^z - \widetilde{S}_i^z\widetilde{S}_j^+\right)}_{=:\mathcal{T}_{-1}^{ij}(\alpha_{ij})} \\
& + \underbrace{\frac{1}{4}\left(\cos\alpha_{ij}-1\right)\widetilde{S}_i^-\widetilde{S}_j^-}_{=:\mathcal{T}_2^{ij}(\alpha_{ij})} + \underbrace{\frac{1}{4}\left(\cos\alpha_{ij}-1\right)\widetilde{S}_i^+\widetilde{S}_j^+}_{=:\mathcal{T}_{-2}^{ij}(\alpha_{ij})}.
\end{aligned}
\tag{3.140}
$$

Dem klassischen Zustandsvektor entspricht wieder der voll polarisierte, homogene Zustand

$$
|\Uparrow\rangle \;\; = \;\; \bigotimes_{i=1}^{N} |\uparrow\rangle_i . \tag{3.141}
$$

Wie im letzten Abschnitt führt man eine Zerlegung der Bonds in Typen 1-5 nach Abb. 3.20 durch, so daß man pro Typ den gleichen Bond-Winkel α_{ij} gemäß (3.92) hat. Für die folgende Darstellung beachte man, daß es von den Bonds vom Typ 1 (Dimere) $N/2$ Stück und von allen anderen jeweils N Stück gibt. Der Hamiltonoperator lautet dann

$$
\boxed{H \;\; = \;\; E_{\text{kl}} + \Delta H_0 + \sum_{q=-2}^{2} T_q . \qquad (3.142)}
$$

mit

$$\begin{aligned}
E_{\mathrm{kl}} &:= J_1 \cos(\varphi+\psi)\frac{N}{8} + J_2\left(\cos\varphi + \cos\psi\right)\frac{N}{4} \\
&\quad + J_3\left(\cos\varphi + \cos(2\varphi+\psi)\right)\frac{N}{4}, && (3.143)\\
\Delta &:= -\frac{J_1}{2}\cos(\varphi+\psi) - J_2(\cos\varphi+\cos\psi) \\
&\quad - J_3(\cos\varphi + \cos(2\varphi+\psi)) && (3.144)\\
&= -\frac{4E_{\mathrm{kl}}}{N} && (3.145)\\
H_0 &:= \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{2} - \widetilde{S}_i^z\right), && (3.146)\\
T_q &:= J_1 \sum_{\langle ij\rangle}^{\text{Typ 1}} \mathcal{T}_q^{ij}(\varphi+\psi) + J_2\left(\sum_{\langle\langle kl\rangle\rangle}^{\text{Typ 2}} \mathcal{T}_q^{kl}(\varphi) + \sum_{\langle\langle kl\rangle\rangle}^{\text{Typ 3}} \mathcal{T}_q^{kl}(\psi)\right) \\
&\quad + J_3\left(\sum_{\langle\langle\langle mn\rangle\rangle\rangle}^{\text{Typ 4}} \mathcal{T}_q^{mn}(\varphi) + \sum_{\langle\langle\langle mn\rangle\rangle\rangle}^{\text{Typ 5}} \mathcal{T}_q^{mn}(2\varphi+\psi)\right). && (3.147)
\end{aligned}$$

Die Operatoren $T_{\pm 1}$ verschwinden in der Néel-Phase, weil dort $\sin\alpha_{ij} = 0$ ist. Das erleichtert die Störungsrechnung deutlich und wird letztendlich dazu führen, daß ich in der Néel-Phase in der Störungsrechnung drei Ordnungen mehr erreiche als in der helikalen Phase.

Die Energieskala Δ ist in den physikalisch relevanten Bereichen immer von der Größenordnung 1, weil man davon ausgehen kann, daß sich die Phasengrenze zur quantenmechanischen Dimer-Phase nicht allzu weit verschiebt, und die klassische Energiedichte im Bereich der Dimer-Energie $-3/8$ ist. Das bedeutet aber $\Delta \approx 3/2$, und man kann sorglos durch Δ dividieren. Der Operator

$$\widetilde{H} := H_0 + \frac{1}{\Delta}\sum_{q=-2}^{2} T_q = \frac{H - E_{\mathrm{kl}}}{\Delta} \tag{3.148}$$

ist dann – ähnlich zu Kapitel 2 – ein geeigneter Ausgangspunkt für die Flußgleichungsmethode wie in Abschnitt 1.4 beschrieben: H_0 besitzt ein äquidistantes, nach unten beschränktes Spektrum $\{0, \ldots, N\}$ mit nichtentartetem Grundzustand $|\uparrow\rangle$ und die gewünschte überlappende Blockdiagonalgestalt. Wie in Kapitel 2 führe ich einen reellen Parameter λ ein,

$$\widetilde{H}(\lambda) := H_0 + \frac{\lambda}{\Delta}\sum_{q=-2}^{2} T_q, \tag{3.149}$$

der die Spin-Fluktuationen bis zum isotropen Punkt $\lambda = 1$ einschaltet. Nach Gleichung (3.148) definiert man

$$H(\lambda) \;:=\; E_{\text{kl}} + \Delta \widetilde{H}(\lambda). \tag{3.150}$$

Die unitäre Transformation aus Abschnitt 1.4 dreht $H(\lambda)$ bzw. $\widetilde{H}(\lambda)$ in eine echte Blockdiagonalgestalt,

$$\boxed{H_{\text{eff}}(\lambda) \;=\; E_{\text{kl}} + \Delta H_0 + \Delta \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{\Delta}\right)^k \sum_{\substack{|\mathbf{m}|=k \\ M(\mathbf{m})=0}} C(\mathbf{m}) T(\mathbf{m}), \quad (3.151)}$$

und insbesondere ist der Grundzustand von H_0 nach Abschnitt 1.4 auch derjenige des effektiven Operators, weil die Grundzustandsenergie von H_0 nichtentartet ist.

Mit dieser Erkenntnis kann man die Grundzustandsenergie von $H(\lambda)$ durch

$$\boxed{E_0(\lambda) \;=\; E_{\text{kl}} + \Delta \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{\Delta}\right)^k \sum_{\substack{|\mathbf{m}|=k \\ M(\mathbf{m})=0}} C(\mathbf{m}) \langle \uparrow | T(\mathbf{m}) | \uparrow \rangle \quad (3.152)}$$

berechnen. Sie ist im Bereich der Winkel $\varphi, \psi \in [0, 2\pi]$ zweifach entartet. Dafür verantwortlich ist eine diskrete Symmetrie des Gitters, die in Abb. 3.23 gezeigt ist. Es handelt sich hierbei um eine Raumgruppentransformation. Sie bildet die von links nach rechts laufende Helix aus Abb. 3.16 in eine von rechts nach links laufende ab, so daß die Entartung offensichtlich ist. In der φ-ψ-Energielandschaft bedeutet diese Invarianz eine Punkt-Spiegelungssymmetrie an (π, π). Formel (3.152) liefert uns nachfolgend die Grundlage zur Berechnung der nicht exakt bekannten Phasengrenzen.

3.7 Implementierung der Flußgleichungsmethode

Ich werde nun erläutern, wie ich Formel (3.152) in ein C++-Programm umgesetzt habe. Genauer gesagt sind es zwei Programme, weil in der Néel-Phase die beiden Winkelabhängigkeiten wegfallen ($(\varphi, \psi) = (\pi, \pi)$), und deswegen

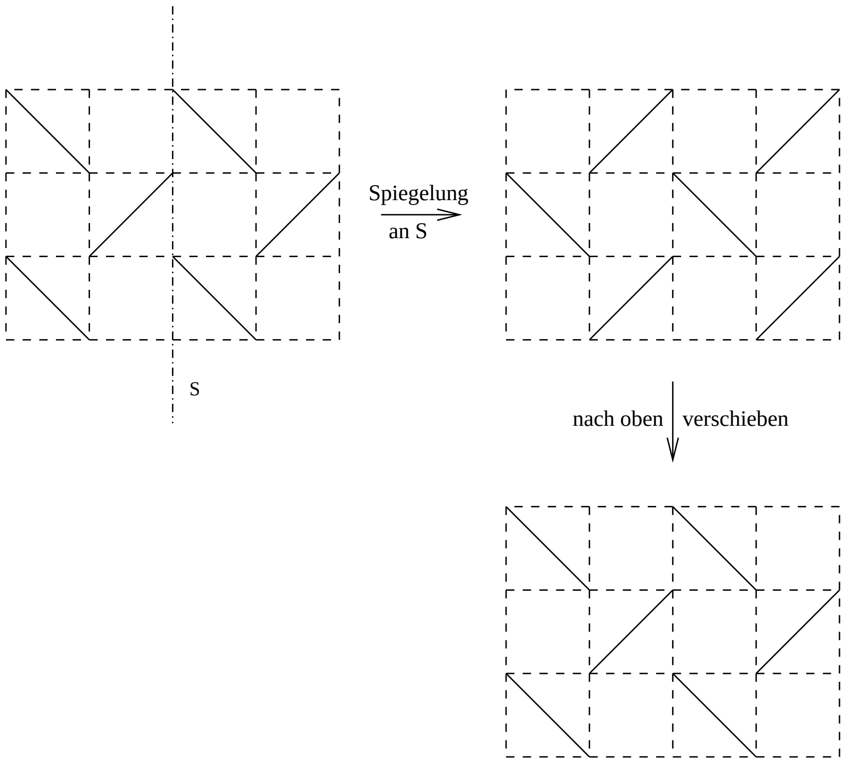

Abbildung 3.23 *Diskrete Symmetrieoperation des Shastry-Sutherland-Gitters, die für die zweifache Entartung der Grundzustandsenergie bzgl. der Winkel φ, ψ verantwortlich ist. Dabei geht φ in $2\pi - \varphi$ und ψ in $2\pi - \psi$ über, so daß die Helix aus Abb. 3.16 jetzt von rechts nach links verläuft.*

die Gewichtung zwischen Laufzeit und RAM-Verbrauch anders als in der helikalen Phase ist. Die Überlegungen in diesem Abschnitt sind analog zu denen in Abschnitt 2.4.

Im ersten Schritt muß ein hinreichend großes Gittersegment spezifiziert werden, das nach dem Linked-Cluster-Theorem zur Berechnung des thermodynamischen Beitrages zur Energiedichte in k-ter Ordnung benutzt werden kann. Dazu veranschaulicht man sich die größten Cluster in einem Diagramm, indem man ihre Schwerpunkte so nahe wie möglich aneinander legt. Die Cluster bestehen aus maximal k Bonds. In Abb. 3.24 habe ich dieses Verfahren beispielhaft für die 3. Ordnung durchgeführt. Dort kann man erkennen, daß ein periodisch geschlossenes 4×4-Segment wie in Abb. 3.25 ausreicht, um alle zusammenhängenden Graphen, die aus höchstens drei Bonds bestehen, aufzunehmen. Die größten aus den J_3-Bonds konstruierten Graphen scheinen zwar zu lang zu sein, weil sie am Rand des Pflasters überstehen und durch die in Abb. 3.25 definierte periodische Schließung dem Ausgangspunkt

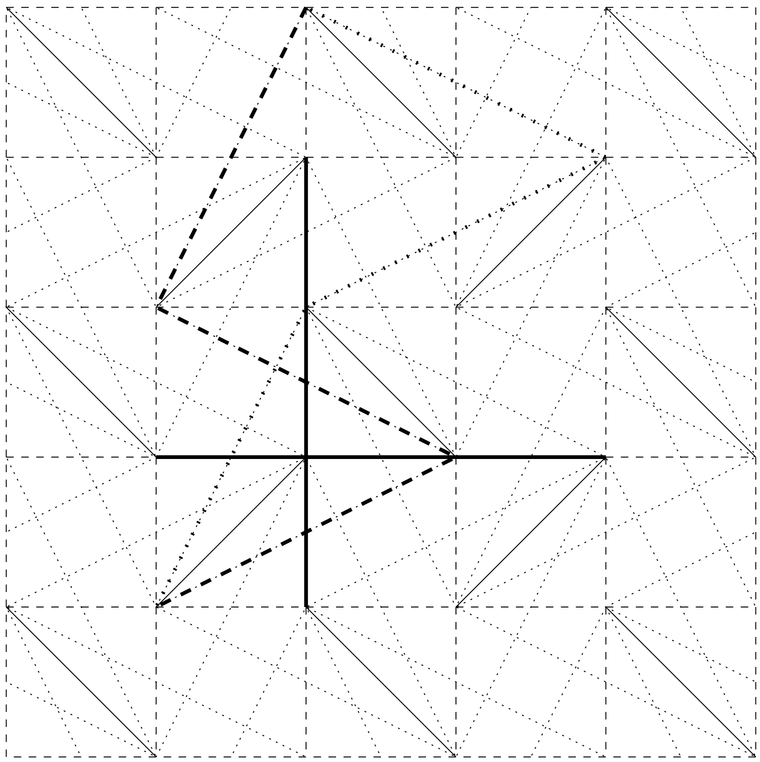

Abbildung 3.24 *Die größten zusammenhängenden Graphen in 3. Ordnung.*

sehr nahe kommen. Durch die Topologie der Wechselwirkungen schaffen diese Graphen es aber trotzdem nicht, sich zu schließen. Es verbleibt immer noch ein minimaler Restabstand von einem Gitterplatz. Daher genügen für die k-te Ordnung

$$N = \begin{cases} (k+1)^2 & \text{für } k \text{ ungerade} \\ (k+2)^2 & \text{für } k \text{ gerade} \end{cases} \tag{3.153}$$

Gitterplätze. Für die geraden Ordnungen brauch man relativ zu den ungeraden mehr Platz, weil die Linearausdehnungen Vielfache der Elementarzellengröße (siehe Abb. 3.3) sein müssen, damit man periodisch schließen kann. Ansonsten könnte man die Gittertranslationsgruppe nicht auf diesem *Torus* darstellen (siehe Abb. 3.26). Die Richtigkeit dieser Überlegungen läßt sich auch „experimentell“ an der Konstanz des errechneten Beitrages zur Grundzustandsenergiedichte in der jeweiligen Ordnung ab der oben angegebenen Gittergröße überprüfen.

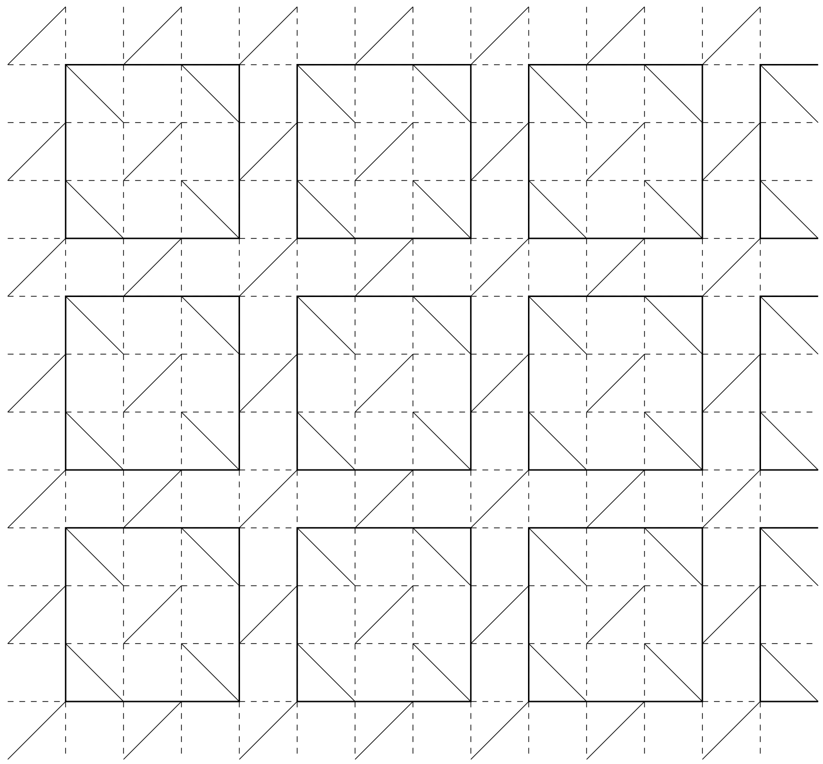

Abbildung 3.25 *Pflasterung des Shastry-Sutherland-Gitters. Die J_3-Bonds sind für eine bessere Übersichtlichkeit weggelassen. Die gezeigten Segmente genügen für Berechnungen bis zur 3. Ordnung.*

Die benötigte Anzahl der Gitterplätze liegt nun durch die länger reichweitigen Kopplungen wesentlich höher als auf dem Quadratgitter (2.29). In der Néel-Phase habe ich maximal die 9. Ordnung erreicht. Das entspricht $10 \times 10 = 100$ Gitterplätzen. In einer binären Kodierung der Spins wie in Abschnitt 2.4 reicht dann ein `unsigned long long` von 64 Bit nicht mehr aus. Deswegen bin ich dazu übergegangen, zwei davon in einem `array` hintereinander zu hängen (= 128 Bit) und die benötigten Bitoperatoren zu *überladen.* Dadurch entstanden Objekte der Klasse `Superlang`, die zusammen mit geeignet großen Zahlen ein Basisobjekt `Summand` wie in Abschnitt 2.4 bilden. Diese stellen einen Basisvektor mit einem Vorfaktor dar, aus denen man die Zustände linearkombinieren kann.

Die Störungsoperatoren T_q habe ich in ihren einzelnen Bestandteilen wie

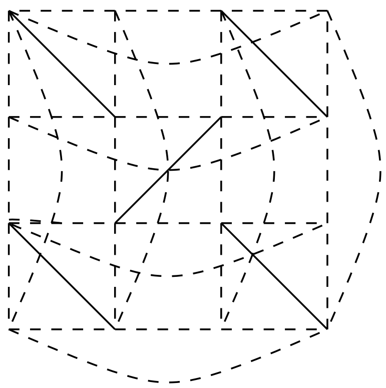

Abbildung 3.26 *Periodisch geschlossenes Gittersegment (Torus) für Berechnungen bis zur 3. Ordnung. Die J_3-Bonds sind für eine bessere Übersichtlichkeit weggelassen.*

in Abschnitt 2.4 kodiert. Die neu hinzugekommenen Operatoren lauten

$$\widetilde{S}_i^+\widetilde{S}_j^- + \widetilde{S}_i^-\widetilde{S}_j^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.154}$$

$$2(\widetilde{S}_i^-\widetilde{S}_j^z - \widetilde{S}_i^z\widetilde{S}_j^-) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.155}$$

$$2(\widetilde{S}_i^+\widetilde{S}_j^z - \widetilde{S}_i^z\widetilde{S}_j^+) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.156}$$

Die Bonds habe ich wie Kapitel 2 auf dem Quadratgitter in einer Matrix kodiert. Der Unterschied zum Quadratgitter besteht darin, daß ich in der Néel-Phase drei Typen J_1, J_2, J_3 und in der helikalen Phase die fünf Typen von Bonds in Abb. 3.20 unterscheiden muß, da sich jedesmal ein anderer Vorfaktor der Operatoren ergibt. Jeder einzelne Typ wird in einer Adjazenz-Matrix kodiert, die gegenüber dem Quadratgitterfall den Bond-Typ als dritten Index hinzubekommt. So entsteht eine $3 \times N \times 2$- bzw. $5 \times N \times 2$-Matrix zur Kodierung der Bonds.

Die Berechnung der Matrixelemente $\langle\uparrow|T(\mathbf{m})|\uparrow\rangle$ erfolgt, indem das Operatorprodukt $T(\mathbf{m}) = T_{m_1}\cdots T_{m_k}$ ausmultipliziert wird. Jeder einzelne Faktor T_q ist nach (3.147) eine Summe von Operatoren, die auf verschiedene

Typen von Bonds wirken, etwa

$$T_q = \sum_{\text{Typ } i} \gamma_q^i T_q^i. \tag{3.157}$$

Damit berechne ich die Erwartungswerte durch

$$\langle\uparrow|T(\mathbf{m})|\uparrow\rangle = \sum_{\substack{\text{Typ}\\ i_1,\cdots,i_k}} \gamma_{m_1}^{i_1}\cdots\gamma_{m_k}^{i_k}\langle\uparrow|T_{m_1}^{i_1}\cdots T_{m_k}^{i_k}|\uparrow\rangle. \tag{3.158}$$

In der Néel-Phase habe ich in einer Mehrfachschleife über die Indizes $i_j = 1, 2, 3$ die Erwartungswerte $\langle\uparrow|T_{m_1}^{i_1}\cdots T_{m_k}^{i_k}|\uparrow\rangle$ berechnet, indem ich die Operatoren sukzessive auf den Grundzustand $|\uparrow\rangle$ anwende. Da ich zwischendurch nach Anwendung eines einzelnen Faktors die Beiträge mit gleichen Basisvektoren mittels des Sortieralgorithmus *Quicksort* [40] zusammenfasse, bleibt zum Schluß nur der Grundzustand mit dem gesuchten Erwartungswert als Vorfaktor übrig. Das ist eine unmittelbare Folge der Teilchenzahlerhaltung $[H_{\text{eff}}, T(\mathbf{m})] = 0$, die ich damit ausgenutzt habe.

Diese einfache Vorgehensweise mit einer Mehrfachschleife über die Bond-Typen ist in der helikalen Phase nicht mehr praktikabel, weil man es jetzt mit fünf verschiedenen Typen von Bonds zu tun hat. Dadurch wird das Verfahren zu langsam. Die für die Néel-Phase beschriebene Methode hat auch den Nachteil, bei jedem einzelnen Erwartungswert in der Summe (3.158) noch einmal von Anfang an die Berechnung durchzuführen, und sich keine Zwischenzustände zu merken. Also speichere ich in der helikalen Phase die zwischendurch erzeugten Zustände so ab, daß ich sie letztendlich möglichst nur einmal berechnen muß. Die Erwartungswerte $\langle\uparrow|T_{m_1}^{i_1}\cdots T_{m_k}^{i_k}|\uparrow\rangle$ berechne ich jetzt von außen nach innen: Ich teile das Operatorprodukt ungefähr in der Mitte j auf und berechne getrennt *bra- und ket-Vektor* durch

$$T_{-m_j}^{i_j}\cdots T_{-m_1}^{i_1}|\uparrow\rangle \text{ und } T_{m_{j+1}}^{i_{j+1}}\cdots T_{m_k}^{i_k}|\uparrow\rangle. \tag{3.159}$$

Wichtig ist, daß man sich dabei sukzessiv die Resultate nach Anwendung eines einzelnen Faktors merkt, da man sonst vielfach dieselbe Rechnung durchführt. Zu diesem Zweck habe ich eine weitere Klasse namens `Summe` definiert. Sie kodiert die bra- und die ket-Zustände (3.159), indem sie in einem Index-Vektor $\mathbf{i}$ die vormals auf den Grundzustand $|\uparrow\rangle$ angewendeten Operatoren abspeichert, und für den eigentlichen Speicherort des resultierenden Zustandes (Linearkombination bzw. Liste aus `Summand`-Objekten) einen Zeiger bereit hält. Hat man für ein $T(\mathbf{m})$ alle bras und alle kets berechnet, so bildet man ihr *Skalarprodukt*, um letztendlich nach Formel (3.158) aufzusummieren. Die Ergebnisse werden in einer Liste verwaltet und zusammengefaßt, falls das Produkt der Vorfaktoren $\gamma_{m_1}^{i_1}\cdots\gamma_{m_k}^{i_k}$ identisch ist.

Ist der Erwartungswert $\langle\uparrow|T(\mathbf{m})|\uparrow\rangle$ berechnet, so wird er an das Computeralgebra-Programm *Maple* übergeben und dort zu dem bisherigen Zwischenergebnis der Summation (3.152) hinzuaddiert, bis der Beitrag für eine Ordnung vollständig berechnet ist.

Wie im Fall des Quadratgitters in Abschnitt 2.4 kann man die Homogenität des Grundzustandes ausnutzen, und in dem periodisch geschlossenen Gittersegment in Abb. 3.25 die Rechnung weiter vereinfachen. Begründung und Resultat sind analog zu Gleichung (2.38),

$$\boxed{\langle\uparrow|T_{m_1}^{i_1}\cdots T_{m_k}^{i_k}|\uparrow\rangle = \#M\langle\uparrow|T_{m_1}^{i_1}\cdots T_{m_{k-1}}^{i_{k-1}}\mathcal{T}_O|\uparrow\rangle. \qquad (3.160)}$$

Wie früher entspricht $\#M$ der Anzahl der Elementarzellen im Gittersegment, die hier deutlich geringer als im Fall des Quadratgitters ist. Der Operator $\mathcal{T}_O$ ist der Anteil von $T_{m_k}^{i_k}$, der zu der ausgewählten Elementarzelle gehört.

Desweiteren kann man noch die J_2-J_3-Austauschsymmetrie (Abschnitt 3.3, Referenz [14]) nutzen, um die Berechnung zu verkürzen. Dazu habe ich nur die Erwartungswerte berechnet, deren Potenz in J_2 kleiner oder gleich derjenigen in J_3 ist, um diese Ergebnisse symmetrisiert in die Summe (3.158) aufzunehmen. Die Beiträge mit gleicher Potenz in J_2 und J_3 müssen von der Symmetrisierung ausgenommen werden, das sie schon symmetrisch sind und sonst doppelt gezählt würden. Zur Ergebniskontrolle habe ich folgende Verfahren benutzt:

- Spezialisierung der Grundzustandsenergien auf den Quadratgitter-Fall aus Kapitel 2 und Vergleich mit (2.39).
- Spezialisierung der helikalen Energie auf den Néel-Fall $(\varphi,\psi)=(\pi,\pi)$ und Vergleich beider Ergebnisse.
- Überprüfung auf J_2-J_3-Austauschsymmetrie bei ausgeschalteter automatischer Symmetrisierung.
- In der helikalen Phase Überprüfung der Punktspiegelungssymmetrie bzgl. $(\varphi,\psi)=(\pi,\pi)$.
- Berechnung der niedrigsten Ordnungen von Hand.
- Vergleich mit bekannten Ergebnissen aus der Literatur (siehe später).

3.8 Ergebnisse und Diskussion

Die Flußgleichungsmethode liefert in der Néel-Phase nach Gleichung (3.152) als Ergebnis in k-ter Ordnung ein Polynom in den Spinflips (dividiert durch die Energieskala) λ/Δ vom Grad k, dessen Koeffizienten

$$\sum_{\substack{|\mathbf{m}|=k \\ M(\mathbf{m})=0}} C(\mathbf{m})\langle\uparrow|T(\mathbf{m})|\uparrow\rangle \tag{3.161}$$

wiederum Polynome in den Kopplungsparametern J_1, J_2, J_3 sind. Ihr Grad ist ebenfalls k. Das bezieht sich aber jetzt auf die Summe der Potenzen in den einzelne Summanden.

Im ersten Quadranten des Phasendiagramms erwartet man eine stabile Néel-Phase, die bei starker Frustration ähnlich wie im klassischen Modell in Abb. 3.17 in die Dimer-Phase übergeht. Dort war der als gestichelte Linie dargestellte Übergang durch Vergleich der quantenmechanischen Dimer-Energie mit der klassischen Néel-Energie bestimmt worden. Er kann quantenmechanisch als nullte Näherung einer $1/S$-Entwicklung verstanden werden.

Ein genaueres Bild hiervon zeichneten schon Müller-Hartmann *et al.* [14]. Den Übergangspunkt auf der Diagonalen $y = x$ des Phasendiagramms (in Einheiten von J_1) kann man sehr genau bestimmen, weil das Modell dort zu einem bekannten Spin-1-Modell wird. Der Gesamtspin auf jedem J_1-Dimer ist eine Erhaltungsgröße, weil jeweils der Kommutator mit H verschwindet. Dann kann man die Eigenzustände von H nach Anzahl und Position der Tripletts auf den Dimeren klassifizieren. Diese Tripletts bilden ein effektives und i. allg. verdünntes Spin-1-Heisenberg-Modell mit Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn auf dem Quadratgitter. Dieses Gitter erhält man, wenn man die Dimer-Bonds jeweils auf einen Punkt zusammenzieht. Dazu betrachte man am besten Abb. 3.3. Es ist gegen das ursprüngliche Quadratgitter der J_2-Bonds um $\pi/4$ gedreht.

Für $J_2 \gg J_1$ ist der Grundzustand unseres Modells für $J_2 = J_3$ derjenige des unverdünnten Spin-1-Heisenberg-Modells, der Ordnung aufweist [41]. Seine Energie pro Platz ist (unter Berücksichtigung der „Nullpunktsenergie“ der J_1-Dimere bzw. Punkte)

$$e_0 \quad = \quad \frac{J_1}{8} + \frac{J_2}{2} e_{0,\mathrm{Spin}\ 1}. \tag{3.162}$$

Bei starker Frustration $J_2 \approx J_1$ hat des Modell einen *Phasenübergang erster Ordnung* in den bekannten Singulett-Produktzustand (3.3) des Shastry-Sutherland-Modells. Dieser hat die Energie $e_0 = -3/8 J_1$, so daß der Über-

Referenz	Methode	$e_{0,\text{Spin 1}}$	x_{krit}
Lin und Emery [42]	Endl. Gitter	-2.3323(6)	0.4288(1)
Singh [43]	Reihenentw.	-2.327(1)	0.4297(2)
Weihong *et al.* [10]	Reihenentw.	-2.3279(2)	0.42957(4)

Tabelle 3.1 *Numerische Werte für den Ort $x_{krit} = J_2/J_1$ des Phasenübergangs von der Néel- in die Dimer-Phase auf der Diagonalen $y = x$ des Phasendiagramms.*

gang bei

$$\boxed{x_{\text{krit}} = -1/e_{0,\text{Spin 1}}} \tag{3.163}$$

stattfindet.

Diese Überlegungen sind deshalb nützlich, weil für die Grundzustandsenergie $e_{0,\text{Spin 1}}$ des Spin-1-Heisenberg-Modells auf dem Quadratgitter recht genaue numerische Werte bekannt sind, und deshalb über Formel (3.163) Vergleichswerte für die Phasengrenze auf der Diagonalen des Phasendiagramms herangezogen werden können. Ich orientiere mich wie im letzten Abschnitt von Kapitel 2 an einer Zusammenstellung von Werten aus Referenz [10], die in Tabelle 3.1 aufgeführt sind. Die Flußgleichungsmethode liefert über Formel (3.152) als Ergebnis des Polynoms in neunter Ordnung (siehe Anhang B) im isotropen Punkt $\lambda = 1$

$$x_{\text{krit}} = 0.4319 \tag{3.164}$$

Wenn man diesen Wert mit denen in Tabelle 3.1 vergleicht, so liegt die Abweichung im Promillebereich. Der Wert liegt etwas zu hoch. Dieselbe Beobachtung hatte ich schon in Abschnitt 2.6 bei Spin 1/2 gemacht.

Desweiteren habe ich die Extrapolation in λ aus Abschnitt 2.6 durchgeführt. Die funktionale Abhängigkeit von der Anisotropie λ im singulären Punkt $\lambda = 1$ hängt nach Weihong *et al.* [10] nicht vom Spin ab. Ich hätte auch in Abschnitt 2.5 die lineare Spinwellentheorie, die als Grundlage der Extrapolationsformel (2.69) diente, für beliebigen Spin durchführen können, ohne daß sich am Ergebnis $e_0(\lambda) \propto \sqrt{1-\lambda}^3$ für $\lambda \to 1$ etwas geändert hätte. Die Resultate dieses Verfahrens habe ich in Tabelle 3.2 aufgeführt. Es zeigt sich dabei wie im Fall des isotropen Heisenberg-Modells auf dem Quadratgitter eine Absenkung der Grundzustandsenergie. Aus Tabelle 3.2 schätze ich

Approximand	x_{krit}
$[5,1]$	0.42965
$[4,2]$	0.42994
$[3,3]$	0.42979
$[2,4]$	0.42987

Tabelle 3.2 *Extrapolierte Werte für den kritischen Punkt x_{krit} beim Übergang von der Néel- in die Dimer-Phase auf der Diagonalen $y = x$. Das Verfahren ist dasselbe wie in Abschnitt 2.6.*

den Wert

$$\boxed{x_{\text{krit}} = 0.4298(2) \qquad (3.165)}$$

ab. Er hat einen Überlapp mit den Werten von Singh und Weihong et al., wobei der absolute Wert besser mit dem von Singh übereinstimmt. Lin und Emery haben einen davon recht stark abweichenden Wert gefunden. Zusammenfassend kann gesagt werden, daß mein Extrapolationsergebnis sehr gut mit den Reihenentwicklungsmethoden von Singh und Weihong *et al.* übereinstimmt. Letztere benutzen ebenfalls eine Extrapolation ihrer Ergebnisse an die Spinwellentheorie, auch wenn die numerische Signifikanz ihrer Daten dafür nicht sehr groß ist. Sie rechtfertigen ihre Vorgehensweise *a posteriori* mit der guten Übereinstimmung der so extrapolierten Daten mit der Spinwellentheorie in zweiter Ordnung. Dieser Argumentation schließe ich mich hier an.

Umgekehrt kann man aus dem Ergebnis (3.165) mit Formel (3.163) durch einfaches Umformen einen Wert für die Grundzustandsenergie pro Spin und Kopplungsstärke des isotropen Spin-1-Heisenberg-Modells auf dem Quadratgitter berechnen,

$$\boxed{e_{0,\text{Spin 1}} = -1/x_{\text{krit}} = -2.327(1). \qquad (3.166)}$$

Ich habe das Extrapolationsverfahren auf den ganzen ersten Quadranten des x-y-Phasendiagramms ausgedehnt, indem ich die Energie mit dieser Methode längs Ursprungsgeraden genähert habe, weil ich dadurch nach Müller-

Hartmann *et al.* [14] ein nahezu senkrechtes Durchlaufen der Phasengrenze erwarte. In der Nähe der x-Achse erwartet man nach den Ergebnissen der linearen Spinwellentheorie einen trikritischen Punkt, weil ein Übergang in eine helikale Phase möglich wird. Das deutet sich in meinen Extrapolationen durch das Auftreten von Defekten in den Padé-Approximanden an. Einzig der $[4,2]$-Approximand läßt sich defektfrei bis zur x-Achse fortführen. Bei den anderen wandern Pole von oberhalb in das λ-Intervall $[0,1]$, wenn man von großen x-Werten auf der Ursprungsgeraden gegen die Phasengrenze geht. die die Methode zusammenbrechen lassen. Auch bei dem $[4,2]$-Approximanden ist in Abb. 3.27 ein auffälliges Verhalten nahe der x-Achse zu erkennen, weil die Werte dort stark von denen des Polynoms abweichen. Die genauere Gestalt der Phasengrenze nahe der x-Achse kann nur im Zusammenhang mit den anderen Phasengrenzen untersucht werden. Der Übergang ist durchgehend

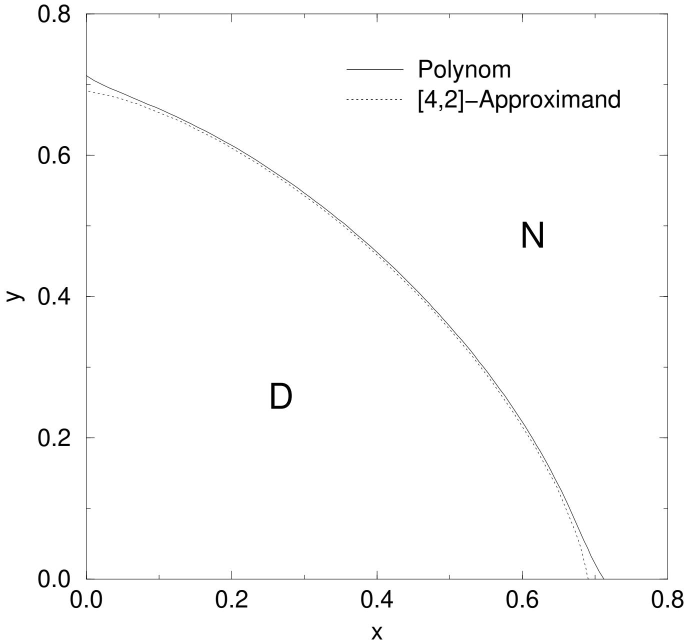

Abbildung 3.27 *Phasengrenze zwischen der Néel-Phase N und der Dimer-Phase D im ersten Quadranten des Phasendiagramms in neunter Ordnung in λ. Die Extrapolation ist dieselbe wie in Abschnitt 2.6 und leitet sich von der linearen Spinwellentheorie ab. Der Übergang ist von erster Ordnung. Die Vergleichswerte auf der Diagonalen aus Tabelle 3.1 würden auf dieser Skala genau auf dem $[4,2]$-Approximanden liegen.*

von *erster Ordnung.* Dies erkennt man deutlich am Kreuzen der Energien in einem nicht-verschwindenden Winkel, was ich hier nicht explizit gezeigt habe. Das bestätigt die Berechnungen der Autoren in Tabelle 3.1, die im Spin-1-Fall eine Untergittermagnetisierung von ca. 80% angeben. Beim Übergang in die Dimer-Phase fällt diese unstetig auf den Wert Null ab.

Als nächstes werde ich die Phasengrenze von der Néel-Phase zur helikalen Phase untersuchen. Ein grundlegendes Problem in der helikalen Phase ist, daß man zwei zusätzliche Operatoren $T_{\pm 1}$ und die beiden Winkel φ und ψ zu berücksichtigen hat. Deshalb habe ich hier nur die sechste Ordnung in λ für die Grundzustandsenergie (3.152) (siehe Anhang B, dort aus Platzgründen nur bis zur vierten Ordnung) erreicht. Die Bestimmung der Phasengrenze erfolgt wie im klassischen Fall über die Instabilität des Néel-Punktes $(\varphi, \psi) = (\pi, \pi)$. Dazu muß man wie in Abschnitt 3.3 die Definitheit der Hesse-Matrix in diesem Punkt untersuchen. Beim Übergang in die helikale Phase muß die Definitheit sich von positiv semidefinit nach indefinit ändern. Um das zu untersuchen, bestimme ich die Nullstellen der Hesse-Determinante. Hierbei habe ich zunächst unvoreingenommen einfache Padé-Approximanden der Energie längs Parallelen zur y-Achse benutzt, weil die genaue λ-Abhängigkeit in diesem Fall unbekannt ist. Die so gewonnenen Phasengrenzen sind in Abb. 3.28 gemeinsam mit dem polynomialen Ergebnis zu sehen. Die Graphen sind nach links nur bis zum ungefähren Beginn der Dimer-Phase dargestellt.

Die gezeigten Ordnungen der Approximanden sind $[2,4], [3,3], [4,2]$ und $[5,1]$.Das Polynom zeigt in sechster Ordnung im Bereich starker Frustration nahe der Dimer-Phase einen „Ausreißer“, wie man durch Vergleich mit der fünften Ordnung feststellen kann. Diese starke Schwankung wird durch die Padé-Approximanden ausgeglichen. Dieser Sachverhalt und die an der niedrigen Ordnung gemessene geringe Schwankung in den Approximanden rechtfertigt a posteriori die Verwendung einer Padé-Approximation. Es zeigt sich insgesamt eine starke Renormierung des Ergebnisses der linearen Spinwellentheorie. Der Phasenübergang ist nach Voraussetzung von *zweiter Ordnung.*

Albrecht und Mila [11] haben längs der x-Achse zur Bestimmung der Ordnung des Phasenübergangs die Magnetisierung in Richtung des klassischen helikalen Zustands bestimmt. Am Übergangspunkt sieht man bei ihnen eine stetige Änderung dieser Größe, die später beim Eintritt in die Dimer-Phase von ca. 20% des voll polarisierten Wertes auf Null herunter springt.

Nun behandele ich den Übergang der helikalen Phase in die Dimer-Phase. Die Extrapolation erfolgt wie in der Néel-Phase längs Ursprungsgeraden. Dort bestimme ich die helikale Energie. Diese suche ich als lokales Minimum der Grundzustandsenergie in der Nähe der klassischen helikalen Winkel. Die Idee dabei ist, daß der klassische helikale Zustand ein geeigneter variationeller Zustand ist, dessen energetisches Minimum sich durch Quantenfluk-

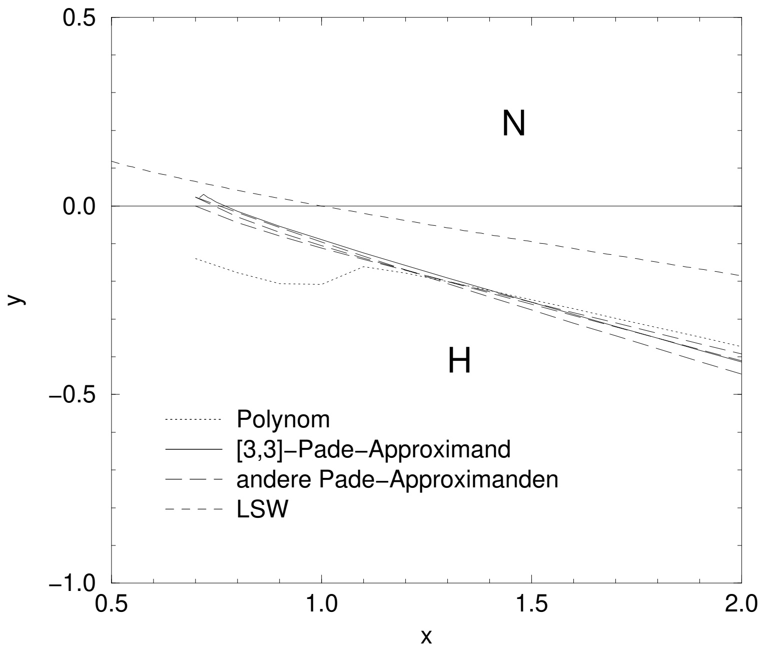

Abbildung 3.28 *Phasengrenzlinie zwischen der Néel-Phase N und der helikalen Phase H, bestimmt aus der Instabilität der Néel-Phase. Das Ergebnis der linearen Spinwellentheorie (LSW) entspricht nach Konstruktion dem klassischen. Der Übergang ist von zweiter Ordnung.*

tuationen nicht allzu weit verschiebt. Da die lineare Spinwellentheorie des letzten Abschnitts die Frage, ob der klassische helikale Zustand auch quantenmechanisch stabil ist – zumindest, was seine Energie angeht – positiv beantwortet hat, gibt es einen guten Grund für diese Vorgehensweise. Um ein eventuelles Minimum aufzuspüren, habe ich den sog. *Downhill-Simplex-Algorithmus* [40] verwendet. Die anschließende Nullstellensuche zur Bestimmung der Phasengrenze habe ich mit einem Sekanten-Verfahren [40] durchgeführt. Die Padé-Approximanden sind leider größtenteils instabil. Einzig der $[3,3]$-Approximand liefert klar definierte lokale Minima, die über den ganzen vierten Quadranten eine Phasengrenzlinie liefern. Sie ist in Abb. 3.29 zu sehen.

Wie aus der Abbildung hervorgeht, liegen die Korrekturen durch die Flußgleichungsmethode im Bereich der linearen Spinwellentheorie. Im unteren Teil des Diagramms verschwindet der Nenner des Padé-Approximanden, wodurch die Extrapolation numerisch instabil wird. Im Bereich der x-Achse, wo die

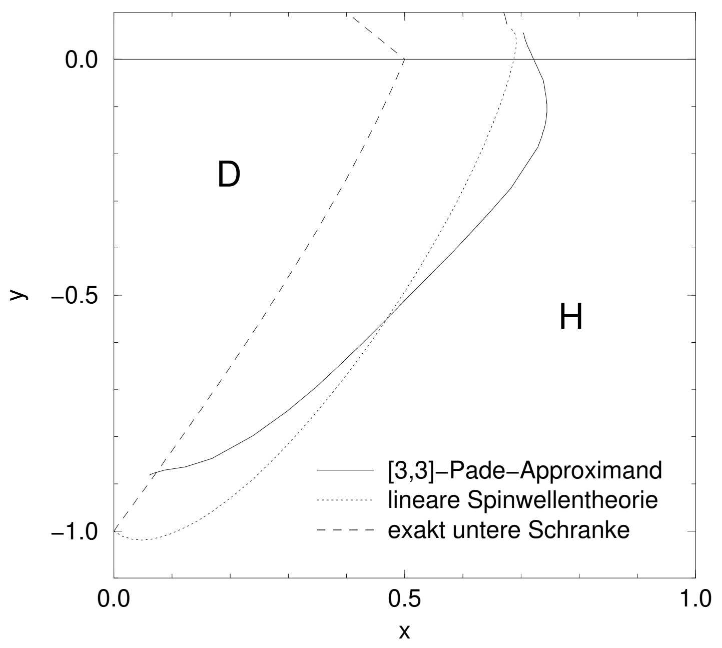

Abbildung 3.29 *Phasengrenzlinie zwischen der helikalen Phase H und der Dimer-Phase D, bestimmt mittels* $[3,3]$*-Padé-Approximand und Gleichsetzen der Energien. Am unteren Ende verschwindet der Nenner des Approximanden, so daß das Verfahren numerisch instabil wird. Zum Vergleich dienen die Phasengrenzlinie der linearen Spinwellentheorie aus Abschnitt 3.5 und die exakte Schranke für die Ausdehnung des Dimer-Grundzustandes aus Abschnitt 3.4.*

die verschiedenen Phasengrenzen zu einem Tripelpunkt zusammentreffen, ist der $[3,3]$-Padé-Approximand sehr empfindlich, weil dort das lokale Minimum der Energie sehr flach wird.

Schlußendlich habe ich noch einmal alle Phasengrenzen in Abb. 3.30 zu einem vollständigen Diagramm zusammengefaßt. Dabei habe ich für den Übergang der Néel-Phase in die helikale Phase den $[3,3]$-Approximanden gewählt, weil ich ihn auch für die Phasengrenze zur Dimer-Phase verwendet habe. Die Phasengrenzen passen aufgrund der verschieden hohen Ordnungen in Néel-Phase und helikaler Phase nicht optimal zusammen. Sie müßten sich eigentlich im ersten Quadranten zu zwei Tripelpunkten treffen.

Den unteren Teil der Phasengrenze zwischen helikaler Phase und Dimer-Phase mußte ich extrapolieren, um die oben erwähnte numerische Instabilität zu überbrücken. Diese Linien sind in Abb. 3.30 gestrichelt eingezeichnet.

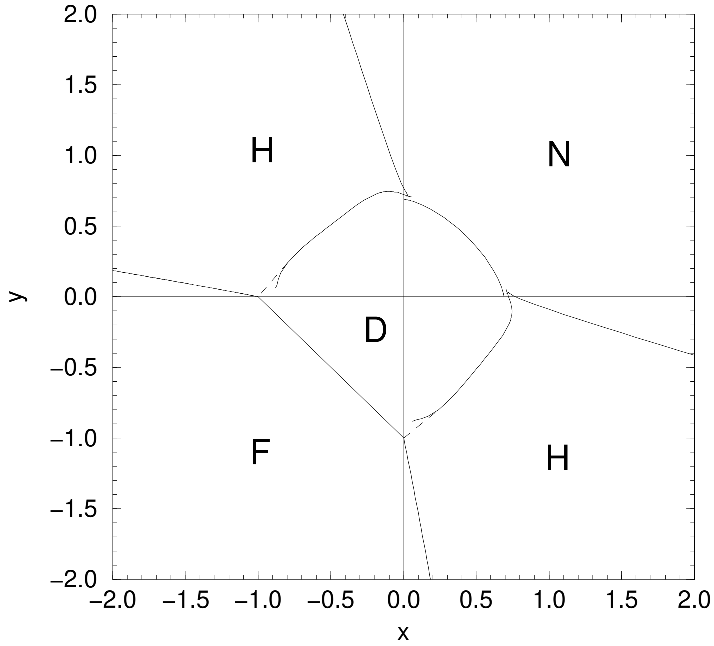

Abbildung 3.30 *Vollständiges Phasendiagramm mit Hilfe der Flußgleichungsmethode und der exakten Grenzen zur ferromagnetischen Phase (N: Néel-Phase; H: helikale Phase; F: ferromagnetische Phase; D: Dimer-Phase). Verwendet werden der [4,2]-Approximand aus Abb. 3.27 und die [3,3]-Padé-Approximanden aus Abb. 3.28 und 3.29. Die gestrichelte Linie ist extrapoliert und dient dazu, das Diagramm im Bereich der numerischen Instabilität abzuschließen.*

Den Tripelpunkt in Abb. 3.30 bestimme ich aus den verschiedenen Padé-Approximanden in Abb. 3.28 zu $(x_t, y_t) = (0.71(2), 0.02(2))$. Bei $x = 0.76(2)$ geht die Néel-Phase in zweiter Ordnung in die helikale Phase über. Diese wiederum vollzieht einen Übergang erster Ordnung bei $x = 0.70(2)$ in die Dimer-Phase. Die Lage dieses Übergangs ist schwierig abzuschätzen, da die beiden Phasengrenzen in Abb. 3.30 um ca. 0.04 auseinander klaffen. Die Verhältniss sollten eigentlich anders herum sein, d. h. die Phasengrenze Néel-Dimer sollte die x-Achse rechts von der Phasengrenze Helix-Dimer schneiden. Daraus kann man zumindest schließen, daß in sechster Ordnung die helikale Energie noch zu hoch liegt und sich weiter absenken wird.

3.9 Fazit und Ausblick

Die Qualität der Ergebnisse der Flußgleichungsmethode in den untersuchten zweidimensionalen Spinmodellen sind je nach Frustrationsgrad und erreichbarer Ordnung recht unterschiedlich. Für das Spin-1/2-Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter liefert die Methode in Kombination mit der linearen Spinwellentheorie einen sehr guten Wert für die Grundzustandsenergie. Hier liegt auch die erreichbare Ordnung mit zehn am höchsten.

In neunter Ordnung bekommt man auch für den Spin-1-Fall gute Ergebnisse. Die sich hieran anschließenden Berechnungen im ersten Quadranten des Phasendiagramms des verallgemeinerten Shastry-Sutherland-Modells bleiben im Bereich geringer Frustration sehr stabil, und die verschiedenen Approximanden fangen erst merklich an zu differieren bzw. instabil zu werden, wenn man sich dem in der Nähe der x-Achse bei ca. $x = 0.7$ vermuteten Tripelpunkt nähert.

In diesem Bereich und im vierten Quadranten kann ich leider nur auf Polynome in λ in sechster Ordnung zurückgreifen. Ihre Auswertung bestätigen qualitativ das Bild, das die lineare Spinwellentheorie aus Abschnitt 3.5 (Referenzen [14] und [39]) gezeichnet hat. Die Ergebnisse am Phasenübergang zweiter Ordnung von der Néel- in die helikale Phase zeigen jedoch eine deutliche Abweichung von der linearen Spinwellentheorie. Diese liefert hier aber auch per construktionem die klassische Phasengrenze. Die von den anderen genannten Autoren [5, 11–16] vieldiskutierte Frage, welche Phasen das Modell für $y = J_3/J_1 = 0$ bzw. durchläuft, kann hier auch nicht mit Sicherheit beantwortet werden, weil dies von der Lage des Tripelpunktes in Abb. 3.30 abhängt. Er liegt sehr nahe bei der x-Achse und kann nicht so genau bestimmt werden, daß eine Lage auf der x-Achse ausgeschlossen werden kann. Das würde auch dazwischen entscheiden, ob auf der x-Achse, die von den anderen Autoren bis auf Müller-Hartmann *et al.* [14] ausschließlich diskutiert wurde, eine helikale Zwischenphase existiert oder nicht. Denkbar ist nach den bisherigen Ergebnissen immer noch beides. Eine Vorantreiben der Flußgleichungsmethode im fraglichen Bereich bis zu höheren Ordnungen könnte hier mehr Aufschluß geben. Insbesondere sollte der widersprüchliche Verlauf der Phasengrenzen in der Nähe des Tripelpunktes behebbar sein, wenn man sie in einer gleichen hinreichend hohen Ordnung berechnen kann. Zunächst einmal sollte man in der helikalen Phase die nächste siebte Ordnung erreichen. Das ist mit einem größeren Rechenaufwand (ca. 2 Wochen Laufzeit, in der Spitze mit dem bisherigen Programm 2.5 GB Arbeitsspeicher-Verbrauch) erreichbar.

101

Anhang A

Hermitesche 4×4-Matrizen $A_{\mathbf{k}} =: (a_{ij})$ und $B_{\mathbf{k}} =: (b_{ij})$ aus Abschnitt 3.5

$$
\begin{aligned}
a_{ii} &= -\frac{1}{2}\left\{J_1\cos(\varphi+\psi)+2J_2(\cos\varphi+\cos\psi)+2J_3(\cos\varphi+\cos(2\varphi+\psi))\right\} \\
&= -4e_{\mathrm{kl}} \text{ für } i=1,\ldots,4 \\
a_{12} &= \bar{a}_{21} = \frac{1}{2}\left\{J_2(\cos\psi+1)+J_3(\cos(2\varphi+\psi)+1)e^{-ik_z}\right\}\cos(k_x/2) \\
a_{13} &= \bar{a}_{31} = \frac{J_1}{4}\left(\cos(\varphi+\psi)+1\right)e^{-i(k_z-k_x)/2} \\
a_{14} &= \bar{a}_{41} = \frac{1}{2}\left(J_2+J_3e^{ik_x}\right)(\cos\varphi+1)\cos(k_z/2) \\
a_{23} &= \bar{a}_{32} = \frac{1}{2}\left(J_2+J_3e^{ik_z}\right)(\cos\varphi+1)\cos(k_z/2) \\
a_{24} &= \bar{a}_{42} = \frac{J_1}{4}\left(\cos(\varphi+\psi)+1\right)e^{i(k_z+k_x)/2} \\
a_{34} &= \bar{a}_{43} = \frac{1}{2}\left\{J_2(\cos\psi+1)+J_3(\cos(2\varphi+\psi)+1)e^{ik_z}\right\}\cos(k_x/2)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
b_{ii} &= 0 \text{ für } i=1,\ldots,4 \\
b_{12} &= \bar{b}_{21} = \frac{1}{2}\left\{J_2(\cos\psi-1)+J_3(\cos(2\varphi+\psi)-1)e^{-ik_z}\right\}\cos(k_x/2) \\
b_{13} &= \bar{b}_{31} = \frac{J_1}{4}\left(\cos(\varphi+\psi)-1\right)e^{-i(k_z-k_x)/2} \\
b_{14} &= \bar{b}_{41} = \frac{1}{2}\left(J_2+J_3e^{ik_x}\right)(\cos\varphi-1)\cos(k_z/2) \\
b_{23} &= \bar{b}_{32} = \frac{1}{2}\left(J_2+J_3e^{ik_z}\right)(\cos\varphi-1)\cos(k_z/2) \\
b_{24} &= \bar{b}_{42} = \frac{J_1}{4}\left(\cos(\varphi+\psi)-1\right)e^{i(k_z+k_x)/2} \\
b_{34} &= \bar{b}_{43} = \frac{1}{2}\left\{J_2(\cos\psi-1)+J_3(\cos(2\varphi+\psi)-1)e^{ik_z}\right\}\cos(k_x/2)
\end{aligned}
$$

Anhang B

Auf den folgenden Seiten sind die Ergebnisse der Grundzustandsenergie-Berechnungen mittels der Flußgleichungsmethode sowohl für die Néel- als auch für die helikale Phase dargestellt.

Literaturverzeichnis

[1] B. S. Shastry und B. Sutherland, Physica B **108**, 1069 (1981).

[2] Kageyama et al., Phys. Rev. Lett. **82**, 3168 (1999).

[3] S. Taniguchi, T. Nishikawa, Y. Yasui, Y. Kobayashi, M. Sato, T. Nishioka, M. Kontani und K. Sano, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 2758, (1995).

[4] R. W. Smith und D. A.Keszler, J. Solid State Chem. **93**, 430 (1991).

[5] S. Miyahara und K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **82**, 3701 (1999).

[6] P. W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952).

[7] R. Kubo, Phys. Rev. **87**, 568 (1952).

[8] T. Oguchi, Phys. Rev. **117**, 117 (1960).

[9] R. B. Stinchcombe, J. Phys. C **4**, L79 (1971).

[10] Z. Weihong, J. Oitmaa und C. J. Hamer, Phys. Rev. B **43**, 8321 (1991).

[11] M. Albrech und F. Mila, Europhys. Lett. **34**, 145-150 (1996).

[12] Z. Weihong, C. J. Hamer und J. Oitmaa, Phys. Rev. B **60**, 6608 (1999).

[13] A. Koga und N. Kawakami, cond-mat/0003435 (2000).

[14] E. Müller-Hartmann, R. R. P. Singh, C. Knetter und G. S. Uhrig, Phys. Rev. Lett. **84**, 1808 (2000).

[15] C. Knetter, A. Bühler, E. Müller-Hartmann und G. S. Uhrig, Phys. Rev. Lett. **85**, 3958 (2000).

[16] C. Knetter, E. Müller-Hartmann und G. S. Uhrig, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 9069 (2000).

[17] F. Wegner, Ann. d. Phys. **3**, 77 (1994).

[18] C. Knetter und G. S. Uhrig, Eur. Phys. J. B, **13**, 209-225 (2000).

[19] A. Mielke, Eur. Phys. J. B **5**, 605 (1998).

[20] J. Stein, J. Stat. Phys. **88**, 487 (1997).

[21] T. Holstein und H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1908 (1940).

[22] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh und D. A. Huse, J. Stat. Phys. **59**, 1093 (1990).

[23] M. Gross, E. Sanchez-Velasco und E. Siggia, Phys. Rev. B **39**, 2484 (1989).

[24] J. D. Reger und A. P. Young, Phys. Rev. B **37**, 5978 (1988).

[25] R. R. P. Singh, Phys. Rev. B **39**, 9760 (1989).

[26] S. Liang, B. Doucot und P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **61**, 365 (1988).

[27] S. Tang und J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **39**, 4548 (1989).

[28] Y. Okabe und M. Kikuchi, J. Phys. Soc. Jpn. **57**, 4351 (1988).

[29] Y. Okabe und M. Kikuchi, J. Phys. (Paris) Colloq. **49**, C8-1393 (1988).

[30] T. Barnes, D. Kotchan und E. S. Swanson, Phys. Rev. B **39**, 4357 (1989).

[31] M. Gross, E. Sanchez-Velasco und E. Siggia, Phys. Rev. B **40**, 11328 (1989).

[32] J. Carlson, Phys. Rev. B **40**, 846 (1989).

[33] N. Trivedi und D. M. Ceperley, Phys. Rev. B **40**, 2737 (1989).

[34] S. Liang, Phys. Rev. B **42**, 6555 (1990).

[35] T. Barnes und M. D. Kovarik, Phys. Rev. B **42**, 6159 (1990).

[36] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism,* Springer-Verlag (1994).

[37] C. D. Domb und J. L. Lebowitz, *Phase Transitions and Critical Phenomena* **13**, Academic Press (1989).

[38] R. R. P. Singh, M. P. Gelfand und D. A. Huse, Phys. Rev. Lett. **61**, 2484 (1988).

[39] E. Müller-Hartmann, unveröffentlicht.

[40] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C,* Cambridge University Press (1992).

[41] E. Jordao Neves und J. Fernando Perez, Phys. Lett. **114A**, 331 (1986).

[42] H. G. Lin und V. J. Emery, Phys. Rev. B **40**, 2730 (1989).

[43] R. R. P. Singh, Phys. Rev. B **41**, 4873 (1990).

Danksagung

Mein Dank gilt zuerst Priv.-Doz. Dr. G. S. Uhrig für die hervorragende Betreuung und die Vergabe des ausgewogenen Themas. Herrn Prof. Dr. E. Müller-Hartmann danke ich für die vielen fachlichen Anregungen und Diskussionen. Ohne Christian Knetter hätte ich die erforderlichen Koeffizienten meiner Entwicklung selber ausrechnen müssen. Ihm danke ich besonders für die vielen Diskussionen rund um das Thema und die gewissenhafte Durchsicht meines Manuskriptes. Ich danke auch herzlich Robert Schmitz für das Korrekturlesen und Alexander Bühler für die vielen praktischen Tips. Herrn Prof. Dr. Abd-Elmeguid danke ich im voraus für die Übernahme des Zweitgutachtens. Christopher Ronnewinkel war für alles gut.

Petra Wickenhäuser hat besonders in den letzten Wochen der Diplomarbeit viele Versprechungen auf eine bessere Zukunft hinnehmen müssen, die ich bald einlösen werde.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß die vorliegende Arbeit von mir selbständig angefertigt wurde, und außer den angegebenen Quellen keine weiteren Hilfsmittel benutzt wurden.

Carsten Rath