

---

---

*Habilitationsschrift*

**Niedrigdimensionale Spinsysteme  
und Spin-Phonon-Kopplung**

---

---

vorgelegt von

Dr. Götz Silvester Uhrig  
Institut für Theoretische Physik  
Universität zu Köln

bei der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Universität zu Köln

Januar 1999

# INHALT

I	Inhalt	2
II	Liste vorgelegter Veröffentlichungen	3
III	Erklärungen zur Koautorenschaft	4
IV	Lebenslauf	5
V	Danksagung	6
1.	Einleitung	7
1.1	Allgemein	7
1.2	Néel- oder <i>RVB</i> -Zustand	8
1.3	Homogene Spinkette	12
1.4	Spin-Phonon-Kopplung: Spin-Peierls-Systeme	16
2.	Anregungen modulierter Ketten und Ebenen	20
2.1	Dimerisierte und frustrierte Spinketten	20
2.2	Gekoppelte Ketten, Leitern und Ebenen	32
2.3	Störstellen	33
3.	Inkommensurabel modulierte Phasen	38
3.1	Sinusoidale Modulation	38
3.2	Adaptive Modulation	39
3.3	Phasonen	42
4.	Nichtadiabatische Phononenbehandlung	45
4.1	Molekularfeldnäherung und <i>Random Phase Approximation</i>	45
4.2	Nichtadiabatische Zugänge	47
4.3	Flußgleichungszugang	48
5.	Zusammenfassung	52
6.	Vorgelegte Veröffentlichungen	58
I	Unified Picture for Confined Spinons in Dimerized Chains	58
II	Magnetic Properties of $(VO)_2P_2O_7$ from Frustrated Interchain Coupling	69
III	Dopant-Bound Spinons in $Cu_{1-x}Zn_xGeO_3$	73
IV	On the Incommensurate Phase in Modulated Heisenberg Chains	79
V	Nonadiabatic Approach to Spin-Peierls Transitions via Flow Equations	87
VI	A Magnetic Model for the Incommensurate I Phase of Spin-Peierls Systems	91
VII	Observation of Three-Magnon Light Scattering in $CuGeO_3$	97
VIII	Symmetry and Dimension of the Dispersion of Inorganic Spin-Peierls Systems	101
IX	Magnetic Excitations Spectrum of Dimerized Antiferromagnetic Chains	105

## II Liste vorgelegter Veröffentlichungen

Die folgenden Veröffentlichungen reiche ich hiermit als Habilitationsschrift ein:

- I G. S. Uhrig, F. Schönfeld, M. Laukamp und E. Dagotto,  
*Unified Quantum Mechanical Picture for Confined Spinons in Dimerized and Frustrated Spin  $S = 1/2$  Chains*,  
Eur. Phys. J. B **7**, 67 (1999)
- II G. S. Uhrig und B. Normand,  
*Magnetic Properties of  $(VO)_2P_2O_7$  from Frustrated Interchain Coupling*,  
Phys. Rev. B **58**, R14705 (1998)
- III G. Els, G. S. Uhrig, P. Lemmens, H. Vonberg, P. H. M. van Loosdrecht,  
G. Güntherodt, O. Fujita, J. Akimitsu, G. Dhalenne und A. Revcolevschi,  
*Dopant-Bound Spinons in  $Cu_{1-x}Zn_xGeO_3$*   
Europhys. Lett. **43**, 463 (1998)
- IV F. Schönfeld, G. Bouzerar, G. S. Uhrig und E. Müller-Hartmann,  
*On the Incommensurate Phase in Modulated Heisenberg Chains*,  
Eur. Phys. J. B **5**, 521 (1998)
- V G. S. Uhrig,  
*Nonadiabatic Approach to Spin-Peierls Transitions via Flow Equations*,  
Phys. Rev. B **57**, R14004 (1998)
- VI G. S. Uhrig, F. Schönfeld und J.P. Boucher,  
*A Magnetic Model for the Incommensurate I Phase of Spin-Peierls Systems*,  
Europhys. Lett. **41**, 431 (1998)
- VII G. Els, P. H. M. van Loosdrecht, P. Lemmens, H. Vonberg, G. Güntherodt,  
G. S. Uhrig, O. Fujita, J. Akimitsu, G. Dhalenne und A. Revcolevschi,  
*Observation of Three-Magnon Light Scattering in  $CuGeO_3$* ,  
Phys. Rev. Lett. **79**, 5138 (1997)
- VIII G. S. Uhrig,  
*Symmetry and Dimension of the Dispersion of Inorganic Spin-Peierls Systems*,  
Phys. Rev. Lett. **79**, 163 (1997)
- IX G. S. Uhrig und H. J. Schulz,  
*Magnetic Excitations Spectrum of Dimerized Antiferromagnetic Chains*,  
Phys. Rev. B **54**, R9624 (1996); *ibid.* Erratum zum Vorstehenden,  
Phys. Rev. B **58**, 2900 (1998)

### III Erklärungen zur Koautorenschaft

I: Idee und Ausführung lagen größtenteils bei mir. Friedhelm Schönfeld und Markus Laukamp haben die DMRG Daten beigetragen.

II: In dieser Arbeit überwiegt mein Beitrag leicht.

III und VII: In diesen beiden Kooperationen habe ich die theoretische Interpretation und die Rechnungen beigesteuert.

IV: Diese Arbeit habe ich initiiert und betreut.

V und VIII: Alleinautorenschaft

VI: Die Fragestellung wurde von Jean-Paul Boucher und mir aufgeworfen. Die Rechnung und Ausführung stammt von mir bis auf die DMRG Daten (F. Schönfeld).

IX: Themenstellung und Interpretation stammen ungefähr zu gleichen Teilen von Heinz Schulz und mir. Die Rechnungen habe ich durchgeführt.

## IV Lebenslauf

**Name** Götz Silvester UHRIG  
**Geburtsdatum** 1. September 1964  
**Geburtsort** Karlsruhe

### Schulausbildung

1970 - 1974 Grundschole in Darmstadt  
1974 - 1983 Gymnasium Georg-Büchner Schule in Darmstadt  
Jan. - April 1981 Trimester an der Heversham Grammar School, Großbritannien  
Mai 1983 Abitur  
Juli 1983 Goldmedaille bei der Internationalen Chemieolympiade, Rumänien

**Wehrpflicht** Juli 1983 bis September 1984

### Studium

1984 - 1986 Physik und Mathematik an der Technischen Hochschule Darmstadt  
Oktober 1986 Vordiplom in beiden Fächern  
1986 - 1987 Auslandsstudium an der Université Paris 7, Jussieu,  
Abschluß: Licence en Magistère de Physique  
1987 - 1990 Physik an der Ruprecht-Karls Universität Heidelberg  
April 1990 Diplom, Titel der Diplomarbeit:  
*Ohmsches Gesetz beim Quantenhalleffekt* bei Prof. Franz Wegner

### Wissenschaftlicher Werdegang

April 1994 Dissertation bei Prof. Dieter Vollhardt, RWTH Aachen  
*Symmetriebrechung und Leitfähigkeit für spinlose Fermionen in hohen Dimensionen*  
Feb. 1994 - Sept. 1995 Wissenschaftlicher Mitarbeiter bei Prof. Erwin Müller-Hartmann, Universität zu Köln  
Okt. 1995 - Dez. 1996 Postdok bei Prof. Heinz Schulz, Université Paris-Sud  
seit Feb. 1997 Wissenschaftlicher Assistent bei Prof. Erwin Müller-Hartmann, Universität zu Köln  
Feb. - April 1998 Forschungsaufenthalt am National High Magnetic Field Laboratory, Tallahassee, Florida

### Stipendien

1984 - 1990 Studienstiftung des Deutschen Volkes (Studium)  
1991 - 1993 Studienstiftung des Deutschen Volkes (Promotion)  
1995 - 1996 Human Capital and Mobility Programme der Europäischen Union  
April - Dez. 1996 Forschungsstipendium der Deutschen Forschungsgemeinschaft

## V Danksagung

Ich freue mich über die Gelegenheit, all denjenigen danken zu können, die mir durch Rat und durch Tat geholfen haben, die hier vorliegenden Arbeiten zu erstellen.

Mein besonderer Dank gilt Prof. E. Müller-Hartmann, der es mir ermöglicht hat, in Köln zu arbeiten und dessen Rat, Ermutigung und Hilfe sehr wichtig für mich waren und sind.

Desweiteren möchte ich Friedhelm Schönfeld, Alexander Bühler und Christian Knetter danken, die durch ihre Mitarbeit direkt zu der vorliegenden Arbeit beigetragen haben. Weiterhin gilt mein Dank Prof. W. Brenig und Prof. A. Kampf für hilfreiche Diskussionen zu den hier angeschnittenen Themen. Den anderen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe und des Instituts möchte ich für die angenehme und freundliche Arbeitsatmosphäre danken.

Besondere Unterstützung habe ich von Dr. B. Büchner, Dr. A. Klümper und Dr. Th. Lorenz sowie von Prof. Th. Nattermann erfahren. Innerhalb des Sonderforschungsbereichs 341 möchte ich die intensive Zusammenarbeit anerkennen, namentlich mit G. Els, Dr. P. Lemmens, Dr. P. van Loosdrecht und Prof. G. Güntherodt.

Mein Dank gilt auch Prof. J.P. Boucher, Dr. B. Normand und Prof. H.J. Schulz für die fruchtbaren Kooperationen, die in dieser Schrift ihren Niederschlag finden.

Für nützliche Diskussionen möchte ich mich auch bedanken bei Dr. M. Braden, Prof. Th. Giamarchi, Prof. B. Lüthi, Prof. L.P. Regnault, Dr. H. Rieger, Dr. A. Schadschneider, H. Schwenk und Dr. J. Voit.

Prof. D. Vollhardt und Dr. P. van Dongen gilt mein herzlicher Dank für ihre langwährende Unterstützung und Ermutigung in der wissenschaftlichen Arbeit.

Für die kritische Durchsicht des Manuskripts danke ich herzlich Dr. B. Büchner, Dr. A. Klümper, Prof. E. Müller-Hartmann und meiner Frau Nina Uhrig-Hammerstein.

# 1. Einleitung

Es soll hier aufgezeigt werden, in welchem Zusammenhang die vorgelegten Forschungsarbeiten zu sehen sind.

Motiviert wurden sie durch die Entdeckung der ersten *anorganischen* Spin-Peierls-Substanz,  $\text{CuGeO}_3$ , durch Hase et al. [1]. Diese Substanz ermöglicht als relativ einfache anorganische, gut kristallisierende Substanz die ganze Palette experimenteller Festkörperuntersuchungen. Weiterhin enthält sie als konstituierende Bestandteile dieselben Kupfer-Sauerstoff-Oktaeder wie die Hochtemperatursupraleiter [2], so daß die in den vergangenen zwölf Jahren angesammelte Erfahrung in solchen Systemen ebenfalls der Untersuchung des Spin-Peierls-Phänomens zugute kam. Mittlerweile ist eine Vielzahl von Ergebnissen bekannt (siehe für eine Übersicht Ref. [3]), die es erlauben, die existierenden und die neu entwickelten theoretischen Vorstellungen zu prüfen und zu verbessern.

Diese neue *Qualität* des Verständnisses eines interessanten Festkörperphänomens macht die Beschäftigung mit  $\text{CuGeO}_3$  so interessant. Außerdem lassen sich die entwickelten Methoden auch auf andere Systeme übertragen und zur fruchtbaren Anwendung bringen.

## 1.1 Allgemein

Die physikalischen Eigenschaften fester Körper werden durch die Valenzelektronen der sie aufbauenden Atome bestimmt. Handelt es sich bei dem festen Körper um einen Kristall, bilden die atomaren Orbitale Bänder, die von den Valenzelektronen ganz oder teilweise gefüllt werden. Handelt es sich um Isolatoren, so liegen in der Regel nur ganz gefüllte oder ganz leere Bänder vor, die bei niedrigen Energien keine sogenannten Ladungsanregungen mehr zulassen. Die Anregung eines Elektrons oder eines Lochs erfordert ein gewisses Energieminimum, d.h. es liegt eine Ladungsenergielücke vor. Für undotierte Metalloxide [4] ist dies der typische Fall. Das ist leicht zu verstehen, da die *stöchiometrische* Zusammensetzung gerade eine ganzzahlige Anzahl von Elektronen pro Formeleinheit garantiert, die ganz oder halb gefüllte Bänder impliziert. Halbfüllung ergibt sich durch die zweifache Spinartung bei ungerader Elektronenanzahl.

Allerdings sind auch Systeme mit halbgefüllten Bändern häufig Isolatoren auf Grund der Wechselwirkung der Elektronen untereinander. Die genügend große Wechselwirkung spaltet das halbgefüllte Band in ein unteres und ein oberes Hubbardband auf, von denen das untere gefüllt ist, das obere leer. Es liegt ein sogenannter Mott-Hubbard-Isolator vor. Ein solches System kann exemplarisch durch das Hubbardmodell bei halber Füllung

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle; \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i (n_{i,\uparrow} - 1/2)(n_{i,\downarrow} - 1/2) \quad (1)$$

beschrieben werden. Die elektronischen Erzeuger (Vernichter) am Platz  $i$  zum Spin  $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$  sind  $c_{i,\sigma}^\dagger$  ( $c_{i,\sigma}$ ) und die Teilchenzahloperatoren entsprechend  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ . Das Hüpfmatrixelement  $t$  charakterisiert die Übergangsamplitude von einem Atomorbital ins benachbarte unter Einfluß ihrer wechselseitigen Potentiale [5]. Die Wechselwirkung  $U$  steht für ein stark abgeschirmtes abstoßendes Coulombpotential, das die Anwesenheit zweier Elektronen am gleichen Atom energetisch ungünstig macht. Für eine genügend große Wechselwirkung  $U$  liegt ein Mott-Hubbard-Isolator vor [6], da es immer nur ein Elektron pro Platz geben kann und somit kein Ladungstransport möglich ist.

Die in einem solchen Isolator verbleibenden Freiheitsgrade, die bei niedrigen Energien noch relevant sind, sind die magnetischen des elektronischen Subsystems, d.h. der elektronische Spin, und die Gitterschwingungen. Es sind diese Freiheitsgrade, die in der vorliegenden Arbeit diskutiert werden.

Bei halber Bandfüllung und großer Wechselwirkung  $U$  relativ zum Hüpfmatrixelement  $t$  ist eine Entwicklung um den Limes verschwindenden Hüpfens sinnvoll. Man erhält in zweiter Ordnung bis auf Konstanten das spinisotrope antiferromagnetische Heisenbergmodell

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \quad (2)$$

mit  $J = 4t^2/U$  [7,8]. Hierin ist  $\mathbf{S}_i$  der Vektoroperator eines Spins  $1/2$  am Platz  $i$ . Damit ist in groben Zügen der allgemeine Weg vom Festkörper zu einem antiferromagnetischen Quantenspinsystem beschrieben. Es sei der Vollständigkeit halber erwähnt, daß der lokalisierte Spin bei komplizierteren lokalen Verhältnissen am jeweiligen Atom der Hundschen Regel folgend auch größer als  $S = 1/2$  sein kann.

## 1.2 Néel- oder RVB-Zustand

Die Eigenschaften solcher Quantenantiferromagnete hängen nun entscheidend von drei Parametern ab: der Dimension  $d$  des zugrundeliegenden Gitters<sup>1</sup>, der Spingröße  $S$  und der Frustration. Ein unfrustriertes Spinsystem ist eines, bei dem sich die Spins so in A-Spins und B-Spins aufteilen lassen, daß immer nur ein A-Spin mit einem B-Spin antiferromagnetisch wechselwirkt und umgekehrt. Eine eventuelle Wechselwirkung von A-Spins oder B-Spins untereinander sei ferromagnetisch. Jede Abweichung von einer solchen Situation bezeichnen wir als Frustration.

Einen guten ersten Eindruck eines physikalischen Systems liefert eine Molekularfeldnäherung. Vernachlässigt man die Quantenfluktuationen, so ist das gleichbedeutend damit, daß man die Vektoroperatoren  $\mathbf{S}_i$  als *klassische* Vektoren betrachtet. Dann ist es einfach, die optimale Spinausrichtung für unfrustrierte Systeme anzugeben. Sie besteht darin, daß alle A-Spins zu allen B-Spins antiparallel stehen. Konkret kann man sich vorstellen, daß die A-Spins nach oben und die B-Spins nach unten zeigen, siehe Abb. 1. Ein solcher Zustand heißt Néelzustand. Verallgemeinernd bezeichnet man alle Zustände, die eine endliche Untergittermagnetisierung  $\langle \mathbf{S}_A \rangle - \langle \mathbf{S}_B \rangle \neq 0$  haben, als Néelzustände. Die endliche Untergittermagnetisierung stellt eine langreichweitige Ordnung dar, die die Symmetrie der Spinrotation bricht. Da diese Symmetriebrechung aus dem System selber heraus erfolgt und nicht von außen aufgeprägt ist, spricht man von spontaner Symmetriebrechung.

---

<sup>1</sup>besser: der Koordinationszahl  $Z$ , z.B. für hyperkubische Gitter  $Z = 2d$



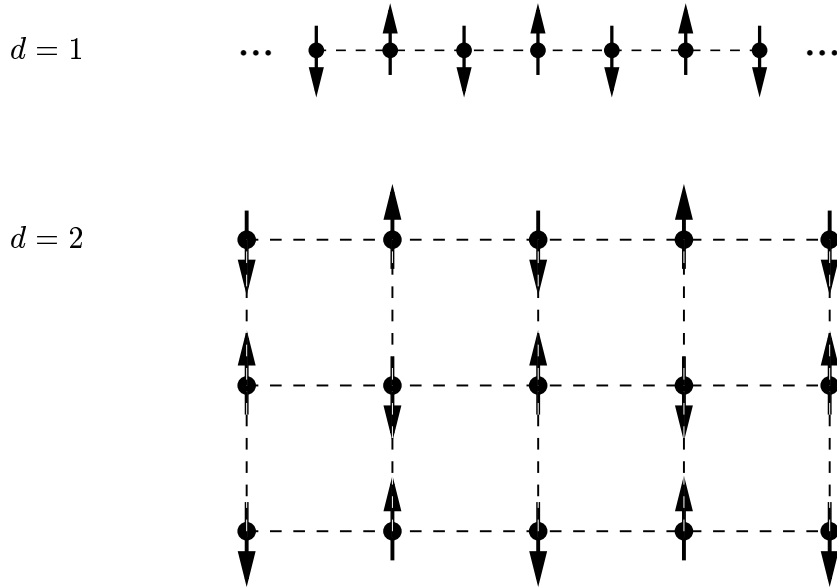


Abbildung 1. Néelzustand für die Kette ( $d = 1$ ) und das Quadratgitter ( $d = 2$ ).

Wenn wie im vorliegenden Fall eine kontinuierliche Symmetrie spontan gebrochen wird, gibt es energetisch beliebig tiefliegende Anregungen, die sogenannten “masselosen Goldstonebosonen”. Im hier diskutierten Fall kann man sie sich als sehr langwellige Verdrillungen vorstellen, wie in Abb. 2 skizziert. Da das System lokal fast wie im optimalen Zustand aussieht, ist der zusätzliche Energieaufwand beliebig gering. Diese Anregungen entsprechen einer Änderung der  $z$ -Komponente des Gesamtspins um  $\pm 1$ .



Abbildung 2. Langsame Verdrillung einer spontan gebrochenen Symmetrie führt zu niedrigliegenden Anregungen: Goldstonebosonen

Der Gegenentwurf zum vorstehenden Néelzustand ist der *Resonating Valence Bond (RVB)*-Zustand [9]. In ihm werden alle Spins paarweise zu Singulettts zusammengefaßt. Der tatsächliche Zustand ist eine Überlagerung solcher Singulettproduktzustände mit passenden Gewichten [10]. Beispiele für typische Singulettproduktzustände sind in Abb. 3 gezeigt.

Solche *RVB*-Zustände sind dadurch charakterisiert, daß sie keine langreichweitige Ordnung aufweisen und daher auch keine Spinrichtung auszeichnen. Es handelt sich um Spinflüssigkeiten. Ist die Reichweite der in den Überlagerungen auftretenden Singulettts endlich, so haben die Anregungen eine Energielücke, die von der Energie, die zum Aufbrechen eines Singulettts nötig ist, herrührt. Läßt man hingegen eine beliebig große Reichweite zu, so stellt man fest, daß man auch den Néelzustand als passende Überlagerung von Singulettproduktzuständen beschreiben kann [10]. Daraus folgt, daß langreichweitige *RVB*-Zustände wiederum verschwindende Energielücken aufweisen können. Die klare Trennung zwischen néelartigen und *RVB*-artigen Zuständen wird also in dem Moment, in dem die Energielücke verschwindet, unmöglich.

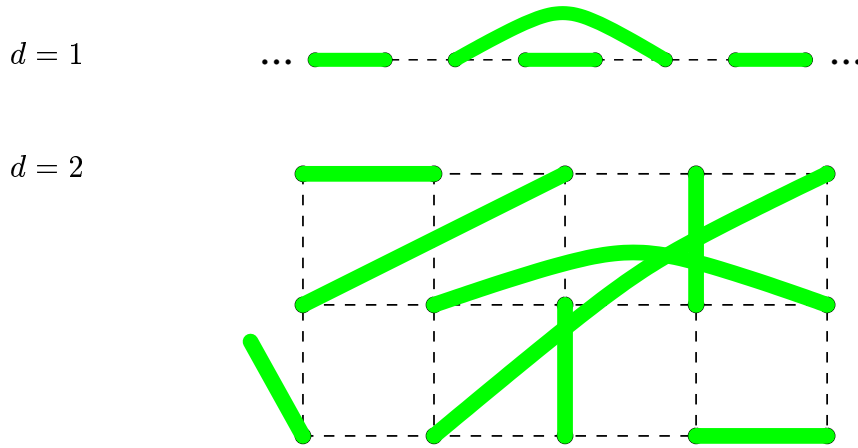


Abbildung 3. Mögliche Singulettproduktzustände, die zu einem *RVB*-Zustand beitragen, für die Kette ( $d = 1$ ) und das Quadratgitter ( $d = 2$ ).

Für die Abhängigkeit von den drei eingangs genannten Parametern Dimension (Koordinationszahl), Spingröße und Frustration gilt nun folgende Faustregel: je größer die Koordinationszahl beziehungsweise der Spin, desto eher ist das System in einem néelartigen Zustand. Frustration hingegen schwächt allgemein den néelartigen Zustand und begünstigt den alternativen *RVB*-Zustand. Im Vorgriff auf spätere Ausführungen sei bemerkt, daß auch räumlich veränderliche Kopplungen *RVB*-Zustände begünstigen.

Qualitativ läßt sich leicht verstehen, warum hohe Koordinationszahl und hoher Spin dem “klassischen” Néelzustand entgegenkommen. Die Energie des reinen Néelzustandes, wie er in Abb. 1 gezeigt ist, und die Energie einer *RVB*-Komponente aus Abb. 3 sind variationelle Abschätzungen der jeweiligen Grundzustandsenergien. Sie sind zwar recht grob, zeigen aber die grundsätzliche Abhängigkeit von  $Z$  und  $S$  auf. Für den Néelfall erhält man pro Spin  $E_{\text{Néel}} = -S^2 Z J / 2$  und für den *RVB*-Fall  $E_{\text{RVB}} = -S(S + 1) J / 2$ . Daraus erkennt man sofort, daß eine Erhöhung von  $Z$  den Néelzustand stark begünstigt. Eine Erhöhung von  $S$  läßt das Verhältnis zwischen  $S^2$  und  $S(S + 1)$  sich Eins annähern, so daß die Begünstigung des *RVB*-Zustandes wegfällt.

Tatsächlich läßt sich mit Entwicklungen um den Néelzustand sehr klar zeigen, daß die Korrekturen zu ihm wie  $1/S$  beziehungsweise wie  $1/Z$  gehen. Für die  $S$ -Abhängigkeit sieht man das im Rahmen der Spinwellentheorie [11,8]. Für die  $Z$ -Abhängigkeit kann man dieses Resultat durch explizite Entwicklung um den hochdimensionalen Limes erzielen [12]. Für den anderen Grenzfall einer Dimension kann man zeigen, daß die Spinkette keine Untergittermagnetisierung bei verschwindender Temperatur  $T = 0$  erlaubt [13]. Physikalisch noch einleuchtender ist das berühmte Argument von Hohenberg, Mermin und Wagner, das zeigt, daß in  $d = 1$  und  $d = 2$  bei endlichen Temperaturen die bosonischen Fluktuationen um den klassischen Grundzustand zu groß sind, um diesen unzerstört zu lassen [14,15]. Dieses Argument ist sehr allgemein anwendbar [16,17]; letztlich kommt es dabei auf die Zustandsdichte  $\rho(\omega)$  solcher Fluktuationen bei niedrigen Energien  $\omega$  an:  $\rho(\omega) \propto \omega^{(d-2)/2}$ .

Frustration schwächt néelartige Zustände. Der genaue Effekt läßt sich jedoch nicht allgemein angeben. Betrachten wir speziell Dreierschleifen als frustrierendes Grundelement, siehe Abb. 4a. Es ist offensichtlich, daß ein kollinearer Néelzustand mit antiparalleler Spinausrichtung nicht optimal ist.

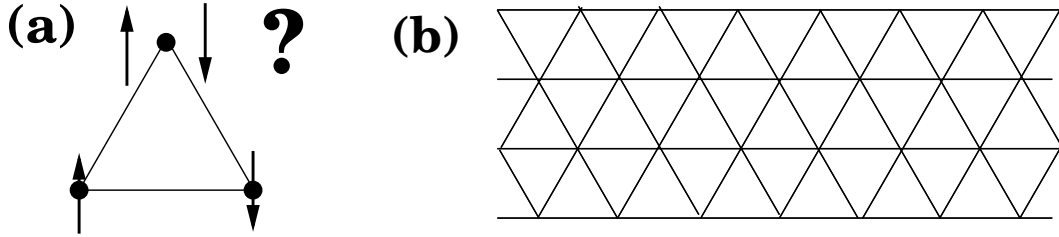


Abbildung 4. (a) Frustration in einer Dreierschleife. (b) Ausschnitt eines Dreiecksgitters.

Dennoch hat das Dreiecksgitter (Abb. 4b) nach allen bisherigen Erkenntnissen [18] keinen *RVB*-Zustand, sondern einen verallgemeinerten planaren Néelzustand (Abb. 5), in dem die Spins eines Dreiecks sternförmig angeordnet sind mit einem paarweisen Winkel von  $120^\circ$ . Hierbei spielt die relativ hohe Koordinationszahl  $Z = 6$  eine Rolle. Denn für das kagome-Gitter mit  $Z = 4$  (Abb. 6) gibt es Hinweise, daß *keine* planare oder andersartige Ordnung vorliegt [18]. Dieses Gitter ist zur Zeit einer der besten Kandidaten unter den Gittern mit nur einer Kopplungskonstante  $J$  für einen längerreichweitigen *RVB*-Grundzustand, der zwar eine nennenswerte Energielücke zum ersten angeregten Triplet hat, aber eine sehr große Anzahl von tiefliegenden Singulettzuständen besitzt [19].

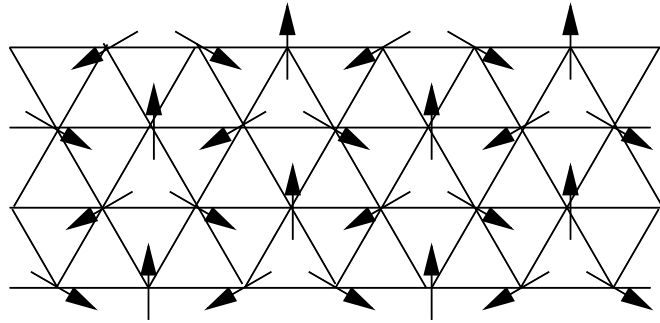


Abbildung 5. Planare Spinausrichtung (Untergittermagnetisierung) im Dreiecksgitter

Ein Paradebeispiel für einen durch Frustration induzierten kurzreichweitigen *RVB*-Grundzustand ist die frustrierte Spinkette

$$H_S = J \sum_i (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \alpha \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2}) . \quad (3)$$

Für Werte  $\alpha > \alpha_c \approx 0.241167(\pm 5)$  liegt spontane Symmetriebrechung der Translationssymmetrie vor [20–23]. Benachbarte Paare von Spins binden sich bevorzugt zu einem Singulett. Dies ist in Abb. 7 dargestellt, wobei die ungeraden Plätze im oberen Holm und die geraden im unteren Holm der Leiter sind. Die Nächstnachbar-Kopplung verläuft zickzackförmig, während die frustrierenden Kopplungen die Holme ausmachen.

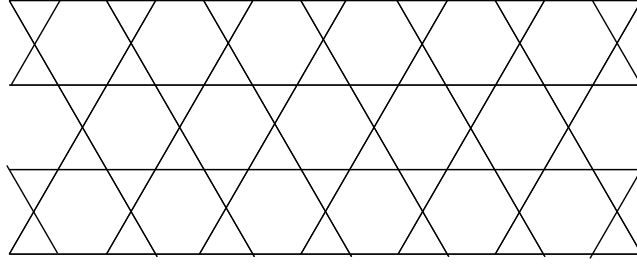


Abbildung 6. Ausschnitt eines *kagome*-Gitters.

Am sogenannten Majumdar-Ghosh-Punkt  $\alpha = 1/2$  liegt ein perfekter Singulettproduktzustand, wie in Abb. 7 gezeigt, vor [24–26].

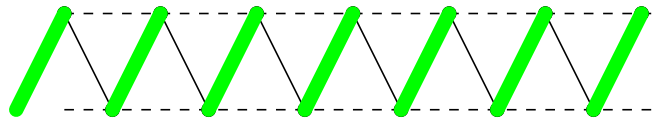


Abbildung 7. Einer der beiden Grundzustände der stark frustrierten Spinkette. Die grauen Balken stehen für erhöhten Singulettcharakter beziehungsweise für reine Singulettts am Majumdar-Ghosh-Punkt. Durchgezogene Verbindungen stehen für die Nächstnachbar-Kopplung  $J$ , gestrichelte Verbindungen für die frustrierende Übernächstnachbar-Kopplung  $\alpha J$ .

### 1.3 Homogene Spinkette

Bevor wir zu den Ketten mit modulierten Kopplungen kommen, soll die homogene Spinkette beschrieben werden, da über sie am meisten bekannt ist. Der Hamiltonoperator ist der aus Gl. (3). Speziell werden die beiden exemplarischen Grenzfälle  $\alpha = 0$  und  $\alpha = 0.5$  diskutiert.

Ohne Frustration ist (3) exakt lösbar basierend auf dem Ansatz von Bethe [27–30]. Sowohl der Grundzustand als auch angeregte Zustände [31,32] können exakt bestimmt werden. Mittels der Quantentransfermatrix läßt sich auch die Thermodynamik des Modells exakt ermitteln [33]. Bei der antiferromagnetischen  $S = 1/2$  Kette handelt es sich um ein lückenloses, kritisches System mit quasi-langreichweitigen, algebraisch abfallenden Korrelationen für  $|i - j| \rightarrow \infty$

$$\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle \propto (-1)^{|i-j|} / |i - j| \quad (4a)$$

$$\langle (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1}) \rangle \propto (-1)^{|i-j|} / |i - j|. \quad (4b)$$

Multiplikative logarithmische Korrekturen sind für das folgende nicht wesentlich und daher nicht angegeben. Die Resultate (4) werden durch Bosonisierung [34,35] oder durch konforme Feldtheorie [36] gestützt. Der Gesamtspin im Grundzustand ist Null. Die antiferromagnetische  $S = 1/2$  Kette steht zwischen einem *RVB*-System und einem Néelsystem. Dem *RVB*-System kommt sie nahe, da ihr eine ausgezeichnete Spinrichtung (Untergittermagnetisierung) fehlt und sie einen starken lokalen Singulettcharakter der Wellenfunktion hat. Dem Néelsystem kommt sie nahe, weil ihre Energielücke verschwindet und sie starke, fast langreichweitige antiferromagnetische Korrelationen (4a) hat.

Wesentlich ist die Natur der Anregungen. Ausgehend vom Verhalten höherdimensionaler Antiferromagneten, deren Grundzustand eine endliche Untergittermagnetisierung (o.B.d.A. parallel zur  $z$ -Richtung) aufweist und deren Anregungen Spinflips mit  $\Delta S^z = \pm 1$  entsprechen, würde man erwarten, daß der Spin einer elementaren Anregung aus dem  $S = 0$  Grundzustand heraus den Spin  $S = 1$  trägt. Das ist aber nicht der Fall. Der Spin einer elementaren Anregung, eines sogenannten Spinons, ist  $S = 1/2$  [32].

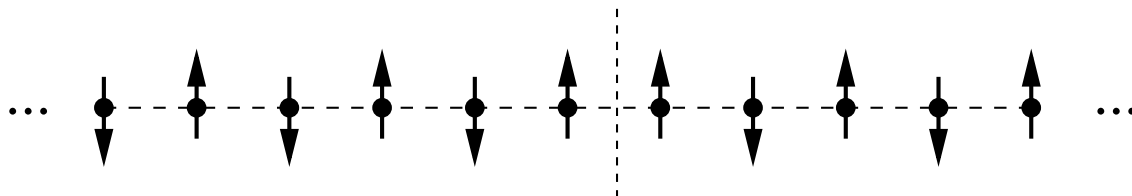


Abbildung 8. Darstellung eines  $S = 1/2$  Spinons als Domänenwand ausgehend von néelartiger Ordnung

Anschaulich kann man diese Anregungen als *Domänenwände* zwischen zwei Grundzustandsmustern auffassen. Ausgehend von einer néelartigen kurzreichweitigen Struktur ist das in Abb. 8 illustriert. Mittelt man die  $S^z$ -Komponente entlang der Kette, erkennt man, daß die Domänenwand diese tatsächlich um  $1/2$  erhöht. Eine andere Illustration eines Spinons erhält man ausgehend von einer *RVB*-artigen Struktur wie in Abb. 9 gezeigt. In diesem Bild ist der Gesamtspin der Anregung noch klarer als  $S = 1/2$  zu erkennen.

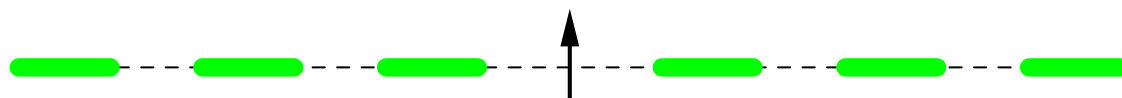


Abbildung 9. Darstellung eines  $S = 1/2$  Spinons als Domänenwand ausgehend von *RVB*-artiger Ordnung

Bei beiden stark vereinfachten Darstellungen sollte man jedoch bedenken, daß die wahren Grundzustände kompliziertere Überlagerungen sind. Der néelartige Zustand wird mit Zuständen mit unterschiedlicher Anzahl von Spinaustauschprozessen überlagert. Der *RVB*-artige Zustand wird überlagert mit Zuständen variierender Reichweiten der Singulettpaare. Beide Darstellungen als Domänenwände verdeutlichen, daß es diese Art von Anregungen nur in *einer* Dimension geben kann. In höheren Dimensionen  $d > 1$  ist eine Domänenwand ein Objekt der Dimension  $d - 1$ , das seinerseits eine Energie proportional zu  $L^{d-1}$  hat, wenn  $L$  die lineare Ausdehnung des Systems ist. Das heißt, daß domänenwandartige Anregungen nicht die tiefliegenden Anregungen sein können. Anders ausgedrückt: Spinonen sind für  $d > 1$  keine (asymptotisch) freien Anregungen mehr.

In Ketten ungerader Spinanzahl liegt immer ein Spinon vor und man kann mittels der Impulsabhängigkeit der Grundzustandsenergie auf die Dispersion  $\omega(k)$  eines einzelnen Spinons schließen. Man erhält das in Abb. 10 dargestellte Ergebnis [37], das mit früheren Ergebnissen [31,32] bis auf eine Verschiebung um  $\pi/2$  im Impulsraum (Faktor  $i^{r_j}$  im Ortsraum) übereinstimmt

$$\omega(k) = \frac{\pi}{2} |\cos(k)| . \quad (5)$$

Studiert man die Dynamik des Strukturfaktors  $S(q, \omega)$  [38], der den Imaginärteil der Fouriertransformierten in Raum und Zeit des zeitgeordneten Erwartungswertes  $\langle \mathcal{T}(\mathbf{S}_i(t)\mathbf{S}_0(0)) \rangle$  darstellt, so muß man bedenken, daß die elementaren Spinonen nur *paarweise* erzeugt werden können, da der Gesamtspin des Systems *entweder* ganzzahlig *oder* halbzahlig ist. Die niedrigsten Anregungen bestehen also aus einem Spinonpaar, das als Ganzes den Impuls  $q$  und die Energie  $\omega$  hat. Dadurch wird aber die Relativbewegung der beiden Spinonen nicht festgelegt. Mit anderen Worten, die Bedingung  $q = q_1 + q_2$  läßt immer noch einen Impuls frei. Somit gibt es für alle Energien  $\omega$ , für die es ein Impulspaar  $q_1, q_2$  mit  $q = q_1 + q_2$  und mit  $\omega(q_1) + \omega(q_2) = \omega$  gibt, einen Beitrag zu  $S(q, \omega)$ . Es entsteht ein Zweispinon-Kontinuum, dessen Träger in Abb. 11 dunkel dargestellt ist. In Abb. 12 ist der Strukturfaktor gezeigt.

Seine Form ist insofern bemerkenswert, als in höherdimensionalen Antiferromagneten die Energie der Magnonen im wesentlichen durch deren Impuls festgelegt ist. Dort erwartet man zu jedem festen  $q$  einen  $\delta$ -Pik in  $S(q, \omega)$  bei der Energie des Magnon-Quasiteilchens. An diesen Pik schließt sich energetisch oberhalb ein inkohärentes Zweimagnon-Kontinuum an, das von endlichen Matrixelementen zu Zweimagnon-Zuständen herrührt.

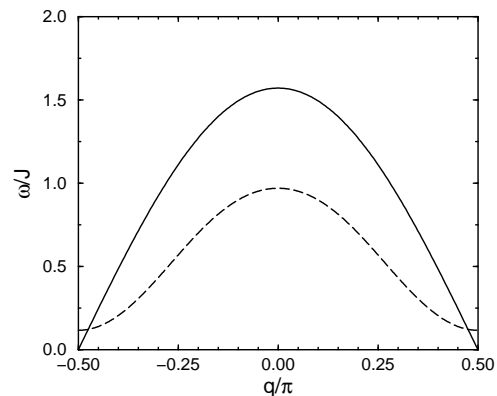


Abbildung 10. Spinondispersionen. Durchgezogene Linie:  $\alpha = 0$  (keine Frustration), exakt nach Gl. (5). Gestrichelte Linie:  $\alpha = 1/2$ , variationell 4. Ordnung nach Ref. [39]

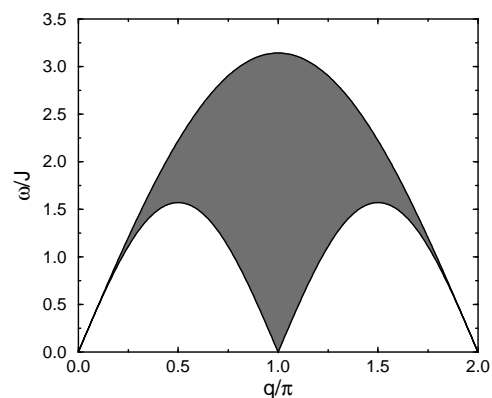


Abbildung 11. Träger (dunkel) des Zweispinon-Kontinuums aus der Dispersion (5)

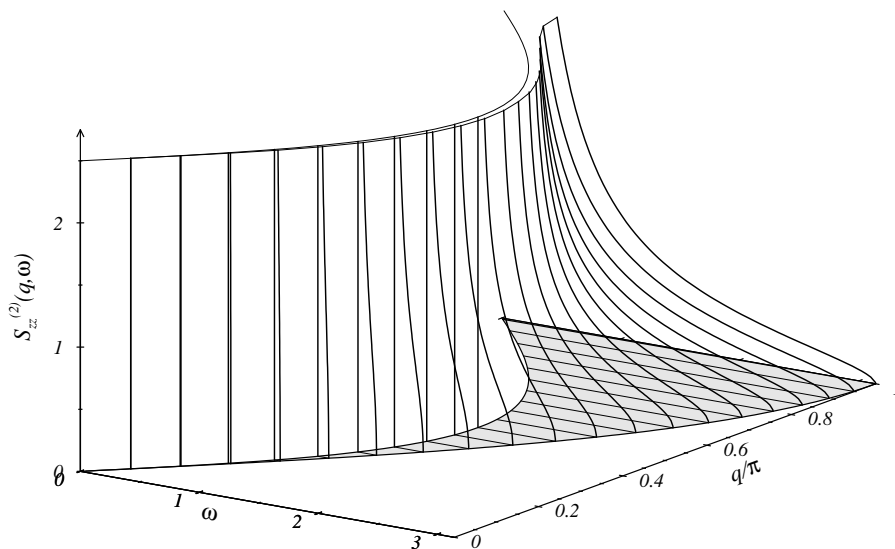


Abbildung 12. Zweispinon-Anteil  $S_{zz}^{(2)}(q, \omega) = \frac{1}{3}S^{(2)}(q, \omega)$  des Strukturfaktors  $S(q, \omega)$  für den isotropen  $S = 1/2$  Quantenantiferromagneten aus Ref. [40]

Am Majumdar-Ghosh-Punkt  $\alpha = 0.5$  liegt das System in einem kurzreichweitigen *RVB*-Zustand vor, der eine Energielücke aufweist. Die Anregungen sind immer noch  $S = 1/2$  Spinonen [41], die jetzt allerdings eine ‘‘Masse’’ haben, d.h. es liegt eine Energielücke vor und es ist eine Mindestenergie notwendig, um ein solches massives Spinon zu erzeugen. Da der Grundzustand exakt bekannt ist, siehe Abb. 7, kann man mittels eines variationellen Zugangs zuverlässig Informationen über die Anregungen erhalten [41–43,39]. Für diese massiven Spinonen ist der in Abb. 9 dargestellte Zustand eine sehr gute Näherung [41]. Das Ergebnis einer verbesserten Rechnung, die drei Lanczos-Schritte über den einfachen Ansatz von Shastry und Sutherland hinaus geht [39], ist in Abb. 10 als gestrichelte Linie dargestellt. Die Lücke beträgt in dieser Näherung 0.116953; extrapoliert man sie auf unendlich viele Lanczos-Schritte, so erhält man die Abschätzung  $0.11693 \pm 2 \cdot 10^{-5} J$ .

Vergleicht man in Abb. 10 das Resultat für  $\alpha = 0$  mit dem für  $\alpha = 1/2$ , so fällt neben der Existenz der Energielücke auf, daß die Bandbreite, die Differenz zwischen Bandminimum und Bandmaximum, im frustrierten Fall stark reduziert ist. Frustration mindert also die Bewegung der Spinonen (vergleiche dazu auch Glg. (15a) das störungstheoretische Resultat ausgehend vom Dimerlimites in [IX]).



Abbildung 13. Darstellung eines Spinonpaares am Majumdar-Ghosh-Punkt  $\alpha = 1/2$ .

Ferner ermöglicht einem der variationelle Zugang, sich einen Eindruck von den spektralen Dichten zu verschaffen. Bestimmt man die Dynamik im Unterraum, der von zwei Spinonen (siehe Abb. 13) aufgespannt wird, so kann man im Triplettkanal  $S_{\text{tot}} = 1$  und im Singulettkanal  $S_{\text{tot}} = 0$  die spektralen Dichten bestimmen [39], wie sie in Abb. 14 gezeigt werden. Die  $\delta$ -Piks teilweise vorhandener (anti)gebundener Zustände sind nicht dargestellt. Das Tripletresultat kann direkt mit dem Ergebnis für den dynamischen Strukturfaktor in Abb. 12 verglichen werden. Das Kontinuum reicht auf Grund der Energielücke selbst bei  $k = \pi$  nicht an  $\omega = 0$  heran. Die spektralen Dichten verschwinden im allgemeinen sowohl an ihrer oberen als auch an ihrer unteren Kante mit einer Wurzelsingularität<sup>2</sup>  $\rho \propto \sqrt{|\omega - \omega_{\text{Kante}}|}$ . Im kritischen System lag an der unteren Bandkante für alle von  $\pi$  verschiedenen Wellenvektoren eine *inverse* Wurzelsingularität vor. Im kritischen Fall (Abb. 12) fällt die spektrale Dichte zur oberen Bandkante hin monoton ab. Am Majumdar-Ghosh-Punkt gibt es jedoch einen Wiederanstieg, der zu einer trogartigen Form führt, wie sie auch in exakter Diagonalisierung frustrierter Ketten gesehen wurde [44].

Zusammenfassend sei festgestellt, daß in den homogenen  $S = 1/2$ -Ketten die elementaren Anregungen  $S = 1/2$  Spinonen sind, die sich asymptotisch frei bewegen. Sie können masselos oder massiv sein, je nach Reichweite der vorhandenen Kopplungen, z.B.  $\alpha \leq \alpha_c \Rightarrow \Delta = 0$  und  $\alpha > \alpha_c \Rightarrow \Delta > 0$ . Diese Anregungen haben den Charakter von Domänenwänden und sind spezifisch für die Physik in einer Dimension.

<sup>2</sup>In Abb. 14 sind auch einige Fälle für spezielle Wellenvektorwerte gezeigt, bei denen ein gebundener bzw. antigebundener Zustand mit der Bandkante zusammenfällt. Das verwandelt die Wurzelsingularität  $\rho \propto \sqrt{|\omega - \omega_{\text{Kante}}|}$  in eine inverse Wurzelsingularität  $\rho \propto 1/\sqrt{|\omega - \omega_{\text{Kante}}|}$  [39].

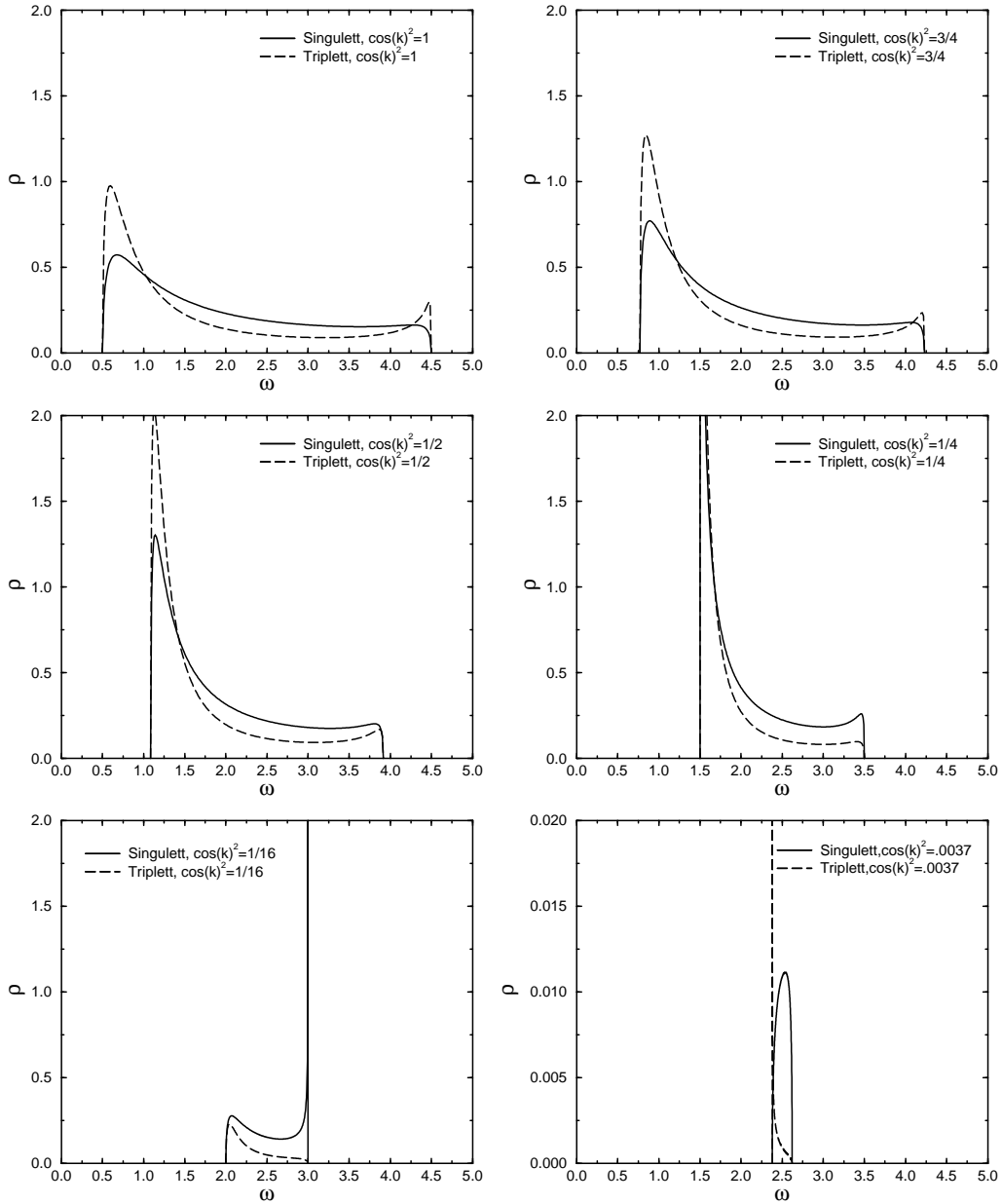


Abbildung 14. Darstellung der spektralen Dichten  $\rho(\omega)$  am Majumdar-Ghosh-Punkt für verschiedene Wellenvektoren  $k$ . Es werden nur die Kontinua gezeigt; auftretende gebundene Zustände sind nicht dargestellt. Die Energien  $\omega$  sind in Einheiten von  $J/2$  angegeben.

## 1.4 Spin-Phonon-Kopplung: Spin-Peierls-Systeme

Nach der Einführung in die grundlegenden Eigenschaften der isolierten Spinsysteme soll die Art der Ankopplung an die quantisierten Gitterschwingungen, die Phononen, besprochen werden. Die Phononen selber werden in harmonischer Näherung betrachtet, die für kleine Schwingungen, d.h. niedrige Energien, gut ist. Der Hamiltonoperator ist dann quadratisch in den Auslenkungen  $u_{\mathbf{r}_i}$  der Atome um ihre Gleichgewichtslagen und in deren zeitlichen Ableitungen  $\dot{u}_{\mathbf{r}_i}$ . Die Phononen sind in dieser Näherung nichtwechselwirkende Bosonen, die in zweiter Quantisierung durch

$$H_B = \sum_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (6)$$



beschrieben werden. Die Wechselwirkung zwischen den Phononen und dem Spinsystem rührt daher, daß eine Änderung der lokalen Gitteranordnung die elektronischen Übergangsmatrixelemente beeinflußt und somit auch die magnetischen Austauschkopplungen. Bei Annahme kleiner phononischer Auslenkungen benötigt man nur eine lineare Ankopplung der Auslenkungen an die Spinaustauschkopplungen

$$H_{\text{SB}} = \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}}(b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + b_{-\mathbf{q}}) \quad (7a)$$

$$\text{mit } A_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}} . \quad (7b)$$

Die Hermitizität des Hamiltonoperators erfordert  $A_{-\mathbf{q}}^{\dagger} = A_{\mathbf{q}}$  bzw.  $g^*(-\mathbf{q}, -\mathbf{k}) = g(\mathbf{q}, \mathbf{k})$ . Zusammen mit dem Spinanteil  $H_{\text{S}}$  aus (3) erhält man den kompletten Hamiltonoperator

$$H = H_{\text{S}} + H_{\text{SB}} + H_{\text{B}} . \quad (8)$$

Um sich ein Bild des Verhaltens von  $H$  aus (8) zu machen, benutzt man einen Molekularfeldzugang für die Phononen. Das bedeutet, daß man  $b_{\mathbf{q}}$  und  $b_{\mathbf{q}}^{\dagger}$  durch ihre Erwartungswerte ersetzt. Dabei ist es energetisch am günstigsten, wenn diese Erwartungswerte reell sind. Konkret haben wir dann  $b_{\mathbf{q}} \rightarrow u_{\mathbf{q}}/2$  und somit

$$H = H_{\text{S}} + \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} \frac{\omega(\mathbf{q})}{4} u_{\mathbf{q}}^2 . \quad (9)$$

Sei  $g$  nun ein Maß für die Kopplungsstärke zwischen phononischem und magnetischem Teilsystem, siehe (7b). Ist diese sehr klein, so kann man auf der Basis von (9) mittels der magnetischen Suszeptibilität erkennen, welche Verzerrung begünstigt ist. Man erinnere sich hierzu, daß eine Suszeptibilität die zweifache Ableitung der Energie nach dem Quellfeld ist, und daß sie somit angibt, in welchem Maße durch das Quellfeld die Energie des Systems abgesenkt werden kann. Gegenspieler ist die elastische Energie (dritter Term in (9)), so daß prinzipiell bei der Entscheidung, welche Verzerrung auftritt, zwischen magnetisch und elastisch bevorzugtem Wellenvektor  $\mathbf{q}$  abgewägt werden muß.

Tatsächlich erkennt man am langsamen alternierenden Abfall der Dimer-Dimer-Korrelation (4b), daß die Suszeptibilität des magnetischen Systems gegen eine Verzerrung mit  $q_c = \pi$  sogar divergent ist<sup>3</sup>. Da  $A_{\mathbf{q}}$  und  $\omega(\mathbf{q})$  keine ähnlich ausgeprägte Struktur haben, setzt sich die magnetische Divergenz durch. Es tritt eine Dimerisierung des Systems ein, wie sie in Abb. 15 dargestellt ist.

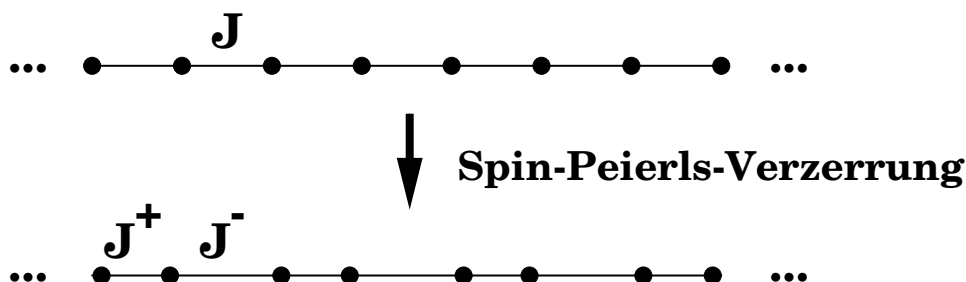


Abbildung 15. Dimerisierung eines Spin-Peierls-Systems

<sup>3</sup>Es wird hier die entscheidende Wellenvektorkomponente  $q_c$  (orientiert an den Verhältnissen in  $\text{CuGeO}_3$ ) entlang der Ketten notiert. Die Gitterkonstante ist gleich Eins gesetzt.

Die starke Neigung der Spinkette zur Dimerisierung wird auch dadurch unterstrichen, daß der Energiegewinn nicht nur proportional zu  $\delta^2$  ist, sondern wie  $\delta^{4/3}$  wächst für unterkritische Frustration  $\alpha \leq \alpha_c$  [45] und linear in  $\delta$  für überkritische Frustration  $\alpha > \alpha_c$ . Letzteres rührt daher, daß schon das Spinsystem allein *ohne* Kopplung an Gitterverzerrungen spontan die Translationssymmetrie bricht und einen dimerisierten Grundzustand aufweist, wie er in Abb. 7 schematisch gezeigt ist.

Nach den obigen Ausführungen kann man sich zur Beschreibung der Spin-Peierls-Verzerrung im dreidimensionalen Kristall bei schwacher Kopplung und in Molekularfeldnäherung auf die Umgebung von  $q_c \approx \pi$  beschränken. Wie das Verzerrungsmuster zwischen den Ketten sich ändert, d.h. welche Werte die anderen Komponenten von  $\mathbf{q}$  annehmen, wird nicht magnetisch bestimmt, sondern rein durch den elastischen Teil. Es ist nicht universell festgelegt. Wir bezeichnen mit  $\mathbf{q}^d$  den Vektor der Spin-Peierls-Verzerrung ohne Magnetfeld und wissen  $q_c^d = \pi$ . In der Annahme, daß sich die magneto-phononische Kopplung und die Phononenenergie bei Abweichungen von  $\mathbf{q}^d$  nicht stark ändern, vereinfacht man  $A_{\mathbf{q}} \rightarrow A_{\mathbf{q}^d}$  und  $\omega(\mathbf{q}) \rightarrow \omega(\mathbf{q}^d)$ . Nimmt man ferner an, daß die Abhängigkeit von  $\mathbf{k}$  in  $g(\mathbf{q}^d, \mathbf{k})$  nicht groß ist, so kommt man zu einem der beiden folgenden eindimensionalen statischen Kopplungsoperatoren

$$H = H_S + g \sum_i u_i (\mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_i - \mathbf{S}_{i-1} \mathbf{S}_i) + \frac{\omega(\mathbf{q}^d)}{4} \sum_i u_i^2 \quad (10a)$$

$$H = H_S + g \sum_i u_i \mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_i + \frac{\omega(\mathbf{q}^d)}{4} \sum_i u_i^2 . \quad (10b)$$

Das Attribut “statisch” bezieht sich hierbei auf die Molekularfeldbehandlung der Phononen, die deren Dynamik vernachlässigt. Der Unterschied zwischen der spinorientierten Ankopplung (10a) und der verbindungsorientierten Ankopplung (10b) liegt in deren Verhalten bei Spiegelungen an einer Normalenebene der Ketten. Die Kopplung (10a) geht in ihr Negatives über, während die Kopplung (10b) erhalten bleibt.

Üblicherweise definiert man die einheitenlosen Verzerrungen  $\delta_i := gu_i/J$  und die zugehörige Federkonstante  $K := J^2 \omega(\mathbf{q}^d)/(2g^2)$ , so daß (10) übergeht in

$$H = J \sum_i \left[ (1 + \delta_i - \delta_{i+1}) \mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_i + \alpha \mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_{i-1} + \frac{K_s}{2} \delta_i^2 \right] \quad (11a)$$

$$H = J \sum_i \left[ (1 + \delta_i) \mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_i + \alpha \mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_{i-1} + \frac{K_v}{2} \delta_i^2 \right] . \quad (11b)$$

Im Fall (11b) wird zusätzlich noch gefordert, daß die mittlere Verzerrung  $\sum_i \delta_i$  verschwindet. Bezüglich einer Dimerisierung  $\delta_i = (-1)^i \delta$  sind beide Kopplungen dann äquivalent, wenn  $K_s = 4K_v$  gewählt wird. Solange man es mit der dimerisierten Phase oder langwelligen Modulationen der Dimerisierung (siehe Kapitel 3) zu tun hat, sind beide Kopplungsvarianten (11a) und (11b) gleichwertig.

Zur besseren Orientierung im verbleibenden Teil der Schrift soll Abb. 16 dienen. Sie zeigt das experimentell bestimmte Phasendiagramm der Spin-Peierls-Substanz  $\text{CuGeO}_3$  in Abhängigkeit von Temperatur und Magnetfeld [46–49]. Bisher wurde erläutert, warum es zum Auftreten der dimerisierten (D) Phase kommt. Die Eigenschaften der D-Phase werden in Kapitel 2 besprochen.

Die D-Phase weist eine Spinlücke auf, die von der Mindestenergie herrührt, die notwendig ist, um ein Singulett aufzubrechen. Daher ist die D-Phase stabil gegen nicht zu

große Magnetfelder. Spätestens jedoch wenn die Zeemanenergie die Energielücke übersteigt,  $g\mu_B H \geq \Delta$ , wird die D-Phase instabil und es tritt eine neue Phase auf. Diese Phase ist durch inkommensurable Modulationen charakterisiert und wird von daher I-Phase genannt. Sie wird in Kapitel 3 näher untersucht.

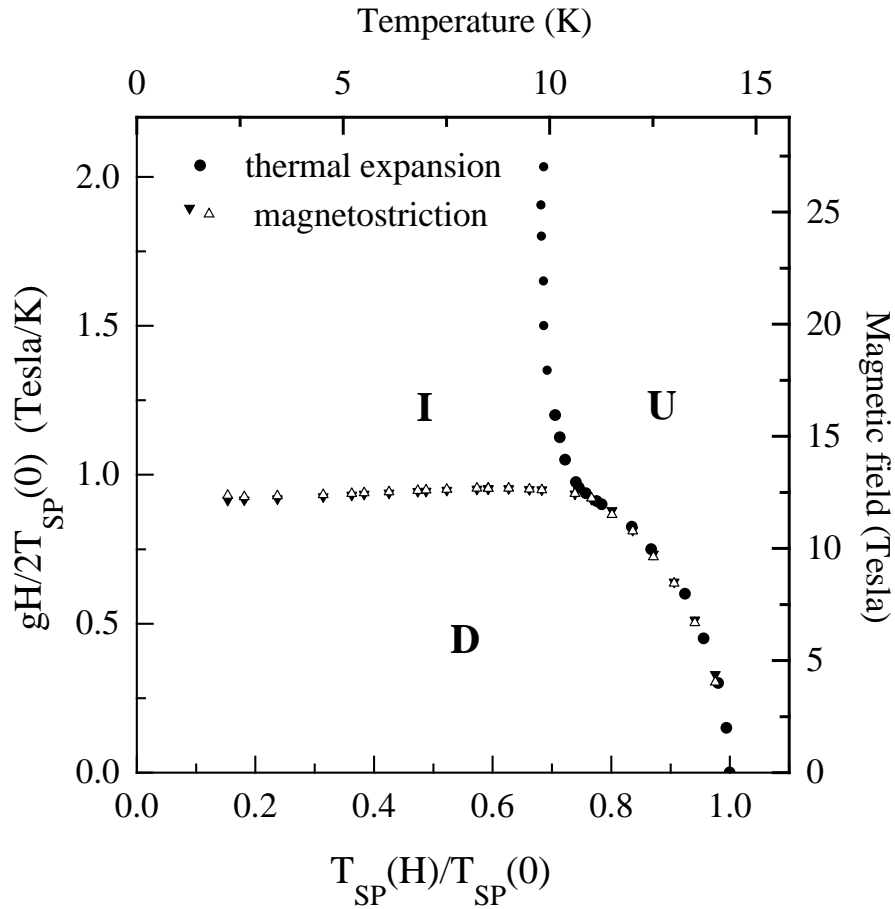


Abbildung 16. Experimentelles Phasendiagramm von CuGeO<sub>3</sub>. U: homogene (*uniform*) Phase, D: dimerisierte Phase, I: inkommensurabel modulierte Phase

Soweit wurde der Spin-Peierls-Übergang in Molekularfeldnäherung diskutiert. Die Gültigkeit dieser Näherung und die zu erwartenden Änderungen bei Verwendung von Methoden, bei denen die Phononen nicht als statisch betrachtet werden, sind das Thema des letzten Kapitels 4 dieser Schrift.

## 2. Anregungen modulierter Ketten und Ebenen

Ausgehend von den bekannten Tatsachen, die im ersten Kapitel zusammengefaßt worden sind, wird im vorliegenden Kapitel dargestellt, inwiefern sich die Anregungen ändern, wenn die homogene Kopplung räumlich moduliert wird. Es werden statische Spinsysteme betrachtet und, sofern das möglich ist, wird eine Beschreibung basierend auf  $S = 1/2$  Anregungen verglichen mit einer Beschreibung basierend auf  $S = 1$  Anregungen. Die Details hierzu finden sich in den vorgelegten Arbeiten [I-III] und [VII-IX].

Abschnitt 2.1, der sich im wesentlichen auf die Arbeiten [I], [VII] und [IX] stützt, befaßt sich mit dem Einfluß von Dimerisierung in einer Dimension. Abschnitt 2.2, der sich im wesentlichen auf die Arbeiten [II] und [VIII] stützt, befaßt sich mit der Frage, inwieweit auch zweidimensionale Systeme in die Beschreibung mit einbezogen werden können. Abschnitt 2.3 schließlich stützt sich auf die Arbeiten [I] und [III] und beschäftigt sich mit unmagnetischen Störstellen und Kettenenden.

### 2.1 Dimerisierte und frustrierte Spinketten

Hier beschränken wir uns auf eine Dimension, das heißt antiferromagnetische Spinketten, und betrachten als Modulation eine gegebene Dimerisierung<sup>4</sup>, das heißt eine Alternierung der Nächstnachbar-Kopplungen

$$H = J \sum_i \left[ (1 + (-1)^i \delta) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \alpha \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} \right] . \quad (12)$$

Da die Dimerisierung als gegeben betrachtet wird, ist die elastische Energie als unwesentliche Konstante weggelassen worden. Gleichzeitig kann eine Frustration  $\alpha \geq 0$  anwesend sein. Die Dimerisierung sei aus dem Intervall  $[-1, 1]$ , wobei man leicht erkennt, daß ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $\delta$  auf  $[0, 1]$  eingeschränkt werden kann, da die gleichzeitige Transformation  $i \rightarrow i + 1$  und  $\delta \rightarrow -\delta$  das System invariant läßt. Relevant ist der Hamiltonoperator (12) für räumlich stark anisotrope, quasi-eindimensionale Substanzen wie  $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$  [50,51] oder  $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$  [52–54],[II], die von ihrer chemischen Struktur her unterschiedliche Kopplungen aufweisen, und für Spin-Peierls-Substanzen wie  $\text{CuGeO}_3$  [1,55,56,22],[IX] oder  $\alpha'$ - $\text{NaV}_2\text{O}_5$  [57–61] in der dimerisierten Tieftemperaturphase (D-Phase) ohne Magnetfeld. Dabei ist nach dem derzeitigen Kenntnisstand und unter Vernachlässigung höherdimensionaler Kopplungen  $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$  eine sehr stark dimerisierte Kette mit geringer Frustration,  $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$  eine mittelstark dimerisierte Kette ohne Frustration,  $\text{CuGeO}_3$  in der D-Phase eine schwach dimerisierte Kette mit nennenswerter Frustration und  $\alpha'$ - $\text{NaV}_2\text{O}_5$  eine schwach dimerisierte Kette ohne Frustration.

Was passiert nun, wenn eine Dimerisierung eingeschaltet wird? Zu dieser Frage gibt es mehrere Betrachtungsweisen, die von der gewählten Beschreibung der nichtdimerisierten Kette abhängen.

---

<sup>4</sup>Um Mißverständnissen vorzubeugen, sei hier bemerkt, daß der Ausdruck “Dimerisierung” sowohl für die externe alternierende Modulation der Kopplungen verwendet wird, als auch für alternierende Erwartungswerte  $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle$  im Grundzustand mit oder ohne externe Symmetriebrechung.

### 2.1.1 Spinonbild

Betrachten wir zuerst die Beschreibung mittels  $S = 1/2$  Spinonen, wie sie in Abb. 9 oder 13 gezeigt sind. Speziell Abb. 13 erlaubt einen sofortigen Einblick in die Auswirkungen der Dimerisierung. *Ohne* Dimerisierung sind die beiden Spinonen asymptotisch frei. In großer Entfernung spüren sie nichts voneinander, da die Zustände links und rechts von einem Spinon energetisch gleichwertig sind. *Mit* Dimerisierung hingegen ist eines der Dimerisierungsmuster energetisch begünstigt und das andere liegt um einen extensiven Energiebetrag höher. Das begünstigte Dimerisierungsmuster liegt links des linken Spinons und rechts des rechten vor. Der Zustand zwischen den beiden Spinonen ist energetisch ungünstig. Daraus folgt, daß zwischen den beiden Spinonen ein anziehendes Potential wirkt, das monoton mit deren Abstand  $x$  wächst.

Für überkritische Frustration  $\alpha > \alpha_c$  wissen wir, daß schon ohne externe Dimerisierung der Grundzustand spontan die Translationssymmetrie bricht. Er ist zweifach entartet und der Erwartungswert  $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle - \langle \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle \rangle$  alterniert. Die doppelten Klammern stehen für den Mittelwert über die ganze Probe. Daraus folgt, daß das anziehende Potential *linear* mit dem Abstand wächst für große Abstände [I]. Für unterkritische Frustration  $\alpha \leq \alpha_c$  wird das Potential schwächer als linear ansteigen, da es keinen endlichen Ordnungsparameter  $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle - \langle \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle \rangle$  gibt.

Genauer stellen wir fest, daß man im wesentlichen davon ausgehen kann, daß das System sich zwischen den beiden Spinonen im Grundzustand einer endlichen Kette befindet [62,37], siehe auch Abb. 13. Für dieses Stück berechnen wir den Erwartungswert des Dimerisierungsoperators relativ zu den Bulkwerten

$$H'_D = \sum_{j=1}^{L-1} (-1)^j (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} - \langle \langle \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} \rangle \rangle) . \quad (13)$$

Das Produkt  $\delta \langle H'_D \rangle$  gibt dann das Potential  $V(L)$  für zwei Spinonen im Abstand  $L$  an. Von der anomalen Dimension  $1/2$  des Dimerisierungsoperators her [45] erwartet man, daß die führende Abstandsabhängigkeit  $\int^L dx / \sqrt{x} \propto \sqrt{L}$  ist. Dies ist tatsächlich der Fall, wie die numerische Untersuchung zeigt (Abb. 4 in [I]).

Mit den obigen Ergebnissen wissen wir, daß das Potential über alle Grenzen wächst und somit ein in jedem Fall bindendes Potential ist, das zu *confinement* führt. Wächst das Potential allerdings über die Mindestenergie hinaus, die nötig ist, ein neues Spinonpaar zu erzeugen, stößt das quantenmechanische Bild mit fester Spinonanzahl an seine Grenze. Ein neues Spinonpaar entsteht<sup>5</sup> *zwischen* den bisherigen Wechselwirkungspartnern und vermindert so die potentielle Energie. Gebundene Zustände zweier Spinonen sind im allgemeinen also nur unterhalb des Vierspinon-Kontinuums stabil (vgl. Diskussion von Abb. 18). Das *confinement* von Quark-Antiquark-Paaren ist ganz analog. Quark und Antiquark können nicht getrennt werden, da vorher neue Quark-Antiquark-Paare entstehen.

Dimerisierung bindet also Spinonen paarweise aneinander. Der Gesamtspin kann dabei  $S = 0$  (Singulett) oder  $S = 1$  (Triplet) sein. Die gebundenen Tripletzustände, die symmetrisch sind, liegen energetisch tiefer. Ihre (positive) Grundzustandsenergie als gebundene

---

<sup>5</sup>Ist die Spinonanzahl eine Erhaltungsgröße, so verschwinden allerdings die für eine Spinonpaarerzeugung notwendigen Matrixelemente. Dieser Fall ist im Haldane-Shastry-Modell realisiert.

Zustände liefert die (für  $\alpha > \alpha_c$  zusätzliche) Energielücke  $\Delta_{\text{trip}}$ . In Anwesenheit von Dimerisierung sind die Spinonen auf Grund ihrer paarweisen Bindung im strikten Sinn nicht mehr die elementaren Anregungen. Die tiefstliegenden gebundenen Zustände sind nun die elementaren Anregungen, wie im Unterabschnitt über Magnonen noch ausführlicher diskutiert wird.

Das Bild gebundener Spinonen kann man auch noch ein Stück weiter treiben. Man weiß aus analytischer Beschreibung [45], [IX] und aus numerischen Rechnungen [63–66], Abb. 3 in [I], daß der aus der Dimerisierung  $\delta$  resultierende Anteil der Energielücke wie  $\delta^{2/3}$  wächst. In [I] ist am Beispiel der Bindung eines einzelnen Spinons an ein Kettenende im Detail dargelegt, daß man im überkritischen Bereich das  $\delta^{2/3}$ -Verhalten findet, da die kinetische Energie der Spinonen ein quadratisches Minimum im Impulsraum hat. Im unterkritischen Bereich findet man das  $\delta^{2/3}$ -Verhalten ebenso trotz veränderten Potentials, da hier die kinetische Energie linear im Impuls ist. Dasselbe gilt auch für die Bindung zweier Spinonen aneinander, wobei aber durch die zwei beteiligten Teilchen die doppelte kinetische Energie auftritt  $v_s \rightarrow 2v_s$  bzw.  $m \rightarrow m/2$ . Ansonsten übertragen sich die Formeln für Bindungsenergien und Bindungslängen aus [I].

Das Kontinuum zweier Spinonen, das den Imaginärteil des dynamischen Strukturfaktors  $S(q, \omega)$  bei Abwesenheit von Dimerisierung dominiert, siehe Abb. 12 und Abb. 14, wird durch die Bindung diskretisiert. Es gibt aber auch ein Vier-, Sechs-, Acht- usw. Spinon-Kontinuum, so daß der Strukturfaktor bei Dimerisierung nicht nur aus einzelnen scharfen Linien besteht. Tatsächlich beobachtet man in schwach oder unfrustrierten Ketten nur eine oder zwei scharfe Linien pro Spinkanal unterhalb des Vierspinon-Kontinuums [67], [IX]. Schematisch ist das in Abb. 17 skizziert.

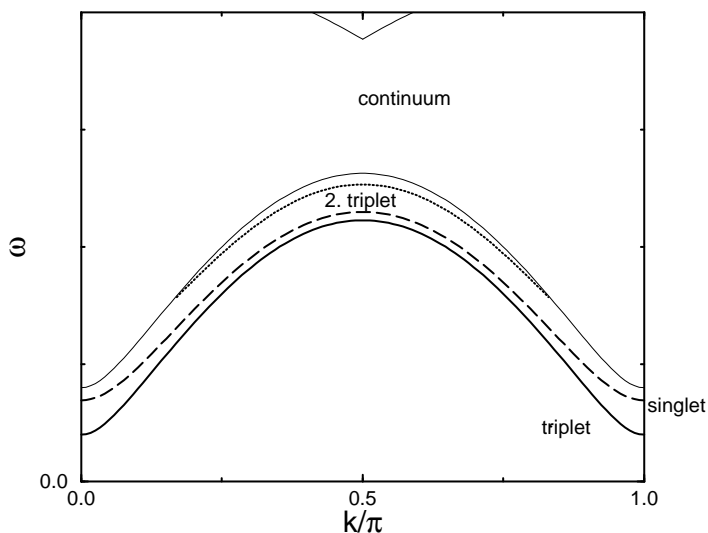


Abbildung 17. Schema des Spektrums einer dimerisierten und frustrierten Kette. Neben dem tiefliegenden Triplett gibt es ein tieflegendes Singulett und für nicht zu kleine Dimerisierung auch ein zweites Triplett um  $k = \pi/2$ . Frustration bei konstanter Energielücke senkt die Energien ab, so daß das zweite Triplett für alle Wellenvektoren unterhalb des Kontinuums liegt.

Bei stark frustrierten Systemen ist die Situation insofern verändert, als die Spinonen massiv sind. Das bedeutet, daß die Mehrspinon-Kontinua energetisch angehoben sind.

Daher findet man unterhalb des Vierspinon-Kontinuums bei Dimerisierung ein diskretes Punktspektrum. Je größer jedoch die Dimerisierung wird, desto weniger wichtig wird der durch die Frustration bedingte Energielückenanteil. Bei größerer Dimerisierung gibt es daher nur noch wenige scharfe Zustände unterhalb des Vierspinon-Kontinuums [68]. Illustriert wird dieser Sachverhalt durch Abb. 18, die auf der variationellen Beschreibung der Spinonen am Majumdar-Ghosh-Punkt beruht [39].

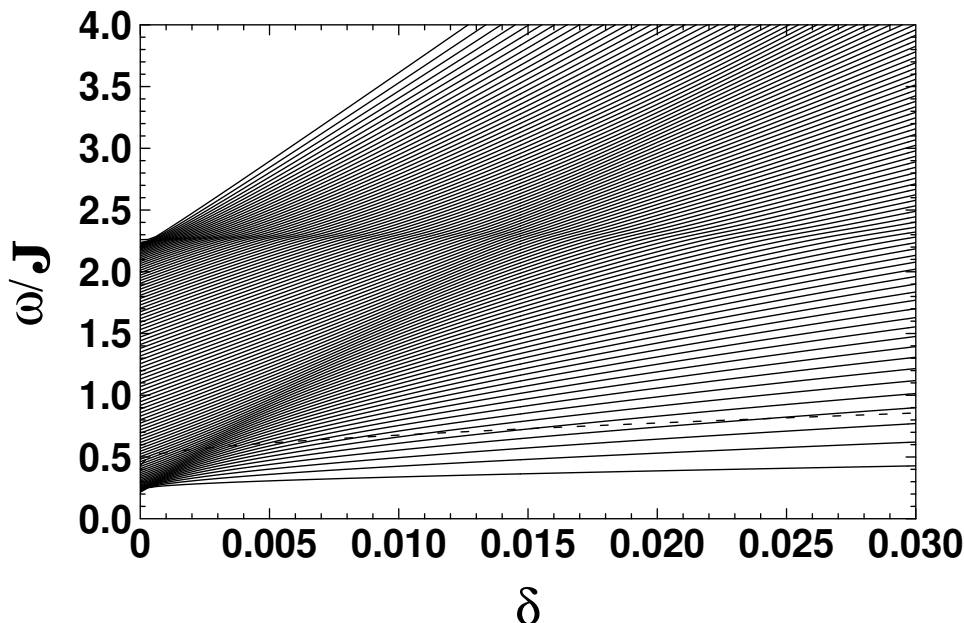


Abbildung 18. Tiefliegende  $S = 1$  Zustände bei  $k = 0$  einer dimerisierten Majumdar-Ghosh-Kette der Länge 100 in variationeller Beschreibung basierend auf Zuständen des Typs aus Abb. 13 [39]. Die gestrichelte Linie gibt an, wo das Vierspinon-Kontinuum beginnt, so daß nur die Zustände unterhalb dieser Linie als scharfe Zustände relevant sind. Die Zustände oberhalb dürften zu einem Kontinuum verbreitert sein und bestenfalls noch als Resonanzen zu sehen sein.

Gezeigt sind Zustände bei  $k = 0$  bzw.  $k = \pi$ , d.h. beim Energieminimum. Die gestrichelte Linie kennzeichnet das Doppelte der untersten durchgezogenen Linie und markiert somit die Kante des Vierspinon-Kontinuums. Man erkennt deutlich, daß es für  $\delta \rightarrow 0$  beliebig viele scharfe Zustände gibt, die genau bei  $\delta = 0$  zum Zweispinon-Kontinuum verschmelzen. Für größer werdendes  $\delta$  nimmt die Anzahl scharfer Zustände schnell ab. Bei kleinerer Frustrationslücke verschiebt sich alles entsprechend zu kleineren Energien und kleineren Dimerisierungen.

### 2.1.2 Magnonbild

Im vorherigen Unterabschnitt wurde ausgehend von  $S = 1/2$  Spinonen gezeigt, wie Dimerisierung diese bindet und somit neue elementare Anregungen schafft, die  $S = 1$  Charakter haben. Der Übergang von einer günstigen Beschreibung mittels Spinonen zu einer günstigen Beschreibung mittels Magnonen erfolgt insofern recht rasch, als die Energielücke schneller als linear mit der Dimerisierung  $\delta$  wächst  $\Delta_{\text{trip}} \propto \delta^{2/3}$ .

Es liegt nahe, auch mit diesen neuen  $S = 1$  Anregungen die Physik dimerisierter und frustrierter Ketten zu beschreiben. Im folgenden werden diese Anregungen zur Unterscheidung von den Spinonen als Magnonen bezeichnet, obwohl es sich nicht um masselose Goldstone-

bosonen einer Phase handelt, die die Spinsymmetrie bricht. Mit masselosen Goldstonebosonen haben die  $S = 1$  Anregungen gemeinsam, daß sie ganzzahlige  $S^z$  Werte aufweisen und daß sie im Imaginärteil des dynamischen Strukturfaktors als  $\delta$ -Piks erscheinen, wie man es von elementaren Anregungen erwartet. Wesentlicher Unterschied ist, daß das Mehrteilchen-Kontinuum für masselose Anregungen direkt an die  $\delta$ -Piks anschließt, während für massive Teilchen die scharfe Mode vom Kontinuum nochmals durch eine Lücke getrennt ist.

Einen systematischen Zugang zu den  $S = 1$  Magnonen gewinnt man durch Entwicklung um den Limes isolierter Dimere [69], [VIII]. Dazu schreibt man den Hamiltonoperator aus (12) um

$$H = J_0 \sum_i [\mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2i+1} + \lambda\mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2i-1} + \lambda\bar{\alpha}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+2}] \quad (14)$$

mit  $J_0 = J(1 + \delta)$ ,  $\lambda = (1 - \delta)/(1 + \delta)$  und  $\bar{\alpha} = \alpha/(1 - \delta)$ . Es definiert  $\lambda = 0$  einen lokalen Hamiltonoperator, der ein einfaches, äquidistantes von unten beschränktes Spektrum hat und sich somit gut für eine Störungsentwicklung eignet. Der in Kauf zu nehmende Nachteil liegt darin, daß man keinen so günstigen Startpunkt hat für die Beschreibung der recht häufig schwach dimerisierten Systeme.

Für das qualitative Verständnis genügt jedoch schon erste Ordnung Störungstheorie [IX, VIII]. In nullter Ordnung sind die Anregungen lokale Triplets auf den Dimeren; die Dispersion und die Wechselwirkung ist Null. In erster Ordnung beginnen die Triplets zu dispergieren, indem sie von Dimer zu Dimer hüpfen mit Hüpfamplitude  $t_1$ . Gleichzeitig gibt es eine Wechselwirkung  $w_{S_{\text{tot}}}$  benachbarter Triplets, die davon abhängt, zu welchem Gesamtspin  $S_{\text{tot}}$  die beiden  $S = 1$  koppeln. Die zugehörigen Matrixelemente betragen

$$t_1 = -(\lambda/4)(1 - 2\bar{\alpha}) \quad (15a)$$

$$w_0 = -(\lambda/2)(1 + 2\bar{\alpha}) \quad (15b)$$

$$w_1 = -(\lambda/4)(1 + 2\bar{\alpha}) \quad (15c)$$

$$w_2 = (\lambda/4)(1 + 2\bar{\alpha}) . \quad (15d)$$

Der antiferromagnetische Charakter des Systems zeigt sich darin, daß die Spins in paralleler Ausrichtung im Quintuplett  $S_{\text{tot}} = 2$  sich abstoßen, während sie sich in antiparalleler Ausrichtung im Singulett  $S_{\text{tot}} = 0$  stark anziehen. Der Fall der Triplettkopplung liegt mit einer schwächeren Anziehung dazwischen.

Wesentlich für dimerisierte Spinsysteme ist die Beobachtung in (15), daß die Bewegung, also das Hüpfen, durch Frustration vermindert wird. Hingegen wird die Wechselwirkung durch die Frustration erhöht [IX, VIII, I]. Mit einer einfachen Rechnung basierend auf der Kettenbruchentwicklung der Resolventen [IX] gewinnt man nun Aussagen über die Bindung zweier Magnonen. Man findet einen gebundenen Singulettzustand in der ganzen Brillouinzone und einen gebundenen Triplettzustand, der um  $k = \pi/2$  herum existiert und sich für genügend große Frustration über die ganze Brillouinzone erstreckt [67], [IX]. Weiterhin gibt es einen antigegebenen Quintuplettzustand ebenfalls in der ganzen Brillouinzone, der aber vermutlich nur von akademischem Interesse ist, da er energetisch innerhalb der Mehrmagnon-Kontinua liegt und daher kein scharfer Eigenzustand mehr ist, sondern bestenfalls noch eine Resonanz.

Diese Ergebnisse untermauern das Dispersionsschema in Abb. 17 für große Dimerisierungswerte. Es ist nützlich, sich noch einmal zu vergegenwärtigen, daß ein Magnon im Spinonenbild einem gebundenen Zustand zweier Spinonen entspricht. Es läßt sich jedoch keine



eindeutige Zuordnung zwischen Magnonanzahl und Spinonanzahl<sup>6</sup> treffen, wie wir noch in den folgenden Unterabschnitten sehen werden. Das gilt insbesondere im unterkritischen Bereich  $\alpha < \alpha_c$  im Limes  $\delta \rightarrow 0$ . Man erkennt das z.B. daran, daß die vielen gebundenen Zustände in Abb. 18 alle im Zweispinon-Raum gefunden wurden, es aber mindestens zweier Magnonen bedarf, um im Magnonbild weitere scharfe Zustände zu bekommen. Man sollte sich daher merken, daß für  $\delta \rightarrow 0$  der  $n$ -Magnon-Raum nicht identisch ist mit dem  $2n$ -Spinon-Raum. Im Limes  $\delta \rightarrow 0$  verschmelzen die  $n$ -Magnon-Kontinua (Unterkante  $n\Delta$ ,  $\Delta \rightarrow 0$ ) und bilden das Spinonkontinuum [IX]. Für verschwindende oder kleine Dimerisierung ist die Beschreibung der Anregungen mittels Spinonen, für größere Dimerisierungen die Beschreibung mittels Magnonen sinnvoller.

Eine Anwendung des Magnonbildes findet man in der Arbeit [VII], in der das Auftreten einer Schulter, die ungefähr bei der Energielücke  $\Delta_{\text{trip}}$  beginnt, in der Intensität inelastischer Lichtstreuung erklärt wurde. Da Lichtstreuung an magnetischen Systemen den Spin unverändert läßt, ist die Erzeugung eines *einzelnen* Magnons aus dem Grundzustand heraus *nicht* möglich.

Die Schulter verschwindet für  $T \rightarrow 0$ , so daß man auf einen Streuprozeß aus einem angeregten Zustand heraus schließen kann. Lichtstreuung an magnetischen Systemen läßt den Spin unverändert, da der Ramanoperator [70] in Abwesenheit von Spin-Bahn-Kopplung spinrotationsinvariant ist. Als Ausgangszustand kommt daher der Grundzustand mit  $S = 0$  nicht in Frage. Die Temperaturabhängigkeit ist konsistent mit der plausiblen Annahme, daß von einem  $S = 1$  Magnon aus ein weiteres, zusätzliches Magnon erzeugt wird. Es handelt sich also um einen  $1 \rightarrow 2$  Magnonprozeß, der daher als Dreimagnon-Streuprozeß in [VII] beschrieben worden ist. Die Spins der beiden Magnonen *nach* der Streuung sind wieder zu  $S = 1$  gekoppelt, so daß Spinerhaltung gewährleistet ist. Die Lage der Schulter bei  $\Delta_{\text{trip}}$ , die die Bandkante eines Kontinuums beschreibt, ist konsistent mit dieser theoretischen Interpretation.

### 2.1.3 Fermionische Feldtheorie

Mittels der Jordan-Wigner-Abbildung [71] ist es möglich, eindimensionale  $S = 1/2$  Probleme exakt auf wechselwirkende spinlose Fermionen abzubilden. Die Abbildung ist definiert durch

$$S_i^z = n_i - 1/2 \quad (16a)$$

$$S_i^+ = c_i^\dagger \prod_{j=-\infty}^i (2n_j - 1) \quad (16b)$$

$$S_i^- = \prod_{j=-\infty}^i (2n_j - 1) c_i \quad (16c)$$

und liefert auf den Hamiltonoperator (12) angewendet

---

<sup>6</sup>Generell ist Vorsicht geboten, die Größen ‘‘Magnonanzahl’’ und ‘‘Spinonanzahl’’ nicht zu überinterpretieren. Sie sind im allgemeinen keine Erhaltungsgrößen und daher nur bedingt, z.B. bei niedrigen Energien, zur Klassifikation von Energieeigenzuständen geeignet.

$$H = J \sum_i \left[ -\frac{1 + (-1)^i \delta}{2} (c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1}) + (1 + (-1)^i \delta) (n_{i+1} - \frac{1}{2})(n_i - \frac{1}{2}) - \frac{\alpha}{2} (2n_{i+1} - 1) (c_{i+2}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+2}) + \alpha (n_{i+2} - \frac{1}{2})(n_i - \frac{1}{2}) \right]. \quad (17)$$

Die Wichtigkeit einer Dimension erkennt man am Phasenfaktor  $\prod_{j=-\infty}^i (2n_j - 1)$ . Er ermöglicht es, aus vertauschenden lokalen Operatoren, den Spinoperatoren an verschiedenen Orten, antivertauschende lokale Operatoren, die fermionischen Erzeuger und Vernichter an verschiedenen Orten, zu machen. Dieser Phasenfaktor hebt sich in einer Dimension für Produkte räumlich benachbarter Aufsteiger und Absteiger fast vollständig weg. In höheren Dimensionen entstehen unweigerlich langreichweitige Wechselwirkungen. Man erkennt an der Äquivalenz von (12) und (17), daß es in einer Dimension nicht möglich ist, eindeutig zu entscheiden, welcher Statistik, fermionisch oder bosonisch, ein Modell gehorcht.

Bevor wir zur Feldtheorie übergehen, soll mit einem einfachen Symmetrieargument gezeigt werden, daß man in der dimerisierten Phase eine scharfe Magnonlinie bei  $\Delta_{\text{trip}}$  und eine Kontinuumskante bei  $2\Delta_{\text{trip}}$  erwarten muß. Auf Grund der Spinsymmetrie kann man den Strukturfaktor einerseits als Greenfunktion von  $S^+$  und  $S^-$  betrachten oder andererseits als Greenfunktion von  $S^z$  und  $S^z$ . In der ersten Beschreibung entspricht er einem Einteilchen-Propagator modulo gewisser Phasenfaktoren nach (16), die eine Verschiebung im Impulsraum um  $\pi/2$  generieren. In der zweiten Beschreibung entspricht der Strukturfaktor einem Dichte-Dichte-Response, der eine Zweiteilchen-Größe darstellt.

Der Unterraum mit einem Elektron mehr (weniger) entspricht  $S^z = +1$  ( $-1$ ). Der Unterraum, der mit Zweiteilchen-Operatoren erreicht wird, entspricht  $S^z = 0$ . Hat man im Einteilchen-Propagator eine scharfe Linie bei  $\Delta_{\text{trip}}$ , so wird das Kontinuum der Zweiteilchen-Größe bei  $2\Delta_{\text{trip}}$  beginnen. Aus der Gleichheit beider Größen folgt nun, daß auch die Einteilchen-Größe ein Kontinuum ab  $2\Delta_{\text{trip}}$  aufweist und daß auch die Zweiteilchen-Größe bei  $\Delta_{\text{trip}}$  eine scharfe Linie hat. Der letzte Punkt erfordert wiederum, daß ein Bindungsphänomen auftritt: es gibt ein Exziton, einen gebundenen Zustand zwischen einem Teilchen und einem Loch, der genau die Bindungsenergie  $\Delta_{\text{trip}}$  hat. Die Symmetrie hilft uns, diese Bindungsenergie genau zu bestimmen, was sonst im allgemeinen nicht möglich ist.

Betrachten wir nun nur die tiefliegenden Anregungen und eine sehr kleine, letztlich infinitesimale Dimerisierung. Dann ist eine Kontinuumsbeschreibung von (17) gerechtfertigt, die die Dispersion und die Wechselwirkung bei den Fermipunkten  $k_F = \pm\pi/2$  beschreibt und sonst keine  $k$ -Abhängigkeiten enthält. Im Ortsraum erhält man dann ein effektives lokales Modell [IX], das massive Thirringmodell

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ -iv_s \left( \psi_1^\dagger \frac{d}{dx} \psi_1 - \psi_2^\dagger \frac{d}{dx} \psi_2 \right) + m_0 (\psi_1^\dagger \psi_2 + \psi_2^\dagger \psi_1) + 2g_0 \psi_1^\dagger \psi_1 \psi_2^\dagger \psi_2 \right] dx. \quad (18)$$

Hierin ist  $v_s$  die Fermigeschwindigkeit, von der wir für das unfrustrierte Modell aus der exakten Lösung wissen, daß sie  $(\pi/2)$  beträgt [28]. Für das unterkritisch frustrierte Modell gilt eine entsprechend renormierte Geschwindigkeit, die numerisch bestimmt werden kann [72]. Die nackte Fermionenmasse (Energilücke) beträgt  $m_0$  und ist proportional zur Dimerisierung  $\delta$ . Der Wert der nackten Wechselwirkung  $g_0$  ist a priori nicht bekannt. Tatsächlich kann die Wechselwirkung wiederum aus dem elementaren Symmetrieargument, das wir oben dargelegt haben, bestimmt werden. Die Dispersion für  $g_0 = 0$  von (18) ist in Abb. 19 illustriert. Man erkennt, daß es sich um eine relativistische Dispersion  $\omega^2 = (v_s k)^2 + \Delta^2$

handelt, wie sie sich aus tight-binding-Modellen durch Linearisieren an den Fermipunkten ergibt. Die Fermipunkte sind im Modell (18) so verschoben, daß sie beide bei  $k = 0$  liegen.

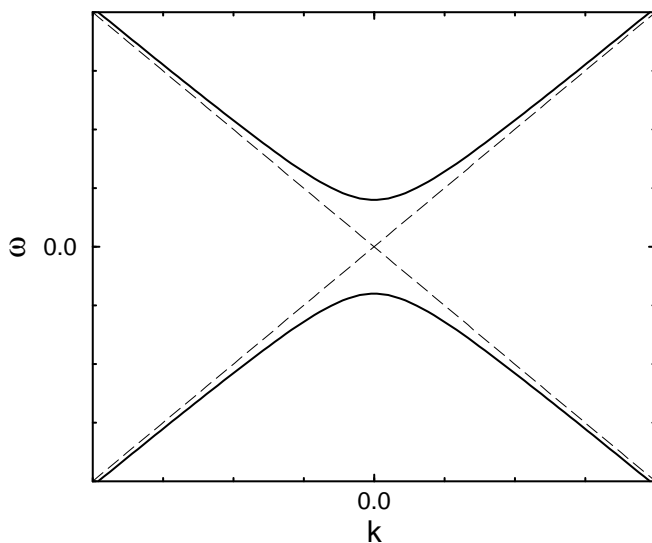


Abbildung 19. Dispersion im massiven Thirringmodell

Die hier wesentlichen Ergebnisse der exakten Lösung des massiven Thirringmodells, die durch Betheansatz gewonnen wurden [73], sind einmal die Renormierung der Masse<sup>7</sup>

$$m = m_0 \frac{\tan(\pi\gamma)}{\pi(\gamma - 1) \exp(\Lambda(1 - \gamma))} \quad (19a)$$

$$\text{mit } \gamma = \frac{\pi}{2\mu} \quad \text{und} \quad \cot \mu = -\frac{g_0}{2}, \quad (19b)$$

wobei  $\Lambda$  der Ultraviolett-Abschneideparameter der Rapiditäten ist, und die Energien gebundener Zustände unterhalb des Kontinuums mit gleicher Teilchenzahl wie der Grundzustand

$$E = 2m \sin(n\alpha) \cosh(\gamma\alpha_s) \quad (20a)$$

$$P = 2m \sin(n\alpha) \sinh(\gamma\alpha_s) \quad (20b)$$

$$\text{mit } \alpha = \frac{\pi}{2} \left( \frac{\pi}{\mu} - 1 \right); \quad n \in \{1, 2, 3, \dots, [\pi/(2\alpha)]\}. \quad (20c)$$

Nun lautet das Argument wiederum, daß es einen Zustand mit  $E = m$  geben muß bei  $P = 0$ , um das  $S = 1$ -Multiplett für  $S^z = 0$  zu vervollständigen. Daraus folgt  $\sin \alpha = 1/2$ , also  $\alpha = \pi/6$ , also  $\mu = 3\pi/4$ , also  $\gamma = 2/3$ . Damit folgt auch  $g_0 = 2$ . Die Renormierung

---

<sup>7</sup>Der Klarheit halber sei daran erinnert, daß die Masse hier synonym für die Energielücke verwendet wird. Der unterschiedliche Sprachgebrauch hat nur historische Gründe: Feldtheorie der Hochenergiephysik einerseits (Masse) und Theorie der Kondensierten Materie andererseits (Energielücke).

der tatsächlichen Lücke kann aus (19a) und dem Wert für  $\gamma = 2/3$  abgeleitet werden. Weiterhin sind die Modendichte  $\rho(\beta)$  und die Energiedichte  $E(\beta)$  bekannt

$$\rho(\beta) = m_0 \frac{\gamma - 1}{2 \sin(2\mu)} \cosh(\gamma\beta) \exp(\Lambda(1 - \gamma)) \quad (21a)$$

$$E(\beta) = -m_0 \cosh(\beta)\rho(\beta) . \quad (21b)$$

Damit die Teilchenzahl nicht von der Dimerisierung (der nackten Masse  $m_0$ ) abhängt, muß im Limes  $m_0 \rightarrow 0$  gelten

$$\exp(-\Lambda) \propto m_0 , \quad (22)$$

was aus der Integration der Modendichte folgt. Damit ergibt sich unmittelbar  $m \propto m_0^{2/3}$  bzw.  $\Delta \propto \delta^{2/3}$  und über die Energiedichte die Energieänderung  $\Delta E \propto -\delta^{4/3}$ . Dies ist der fundamentale Zusammenhang, der zuerst von Cross und Fisher mittels Bosonisierung gefunden worden ist [45], siehe auch folgenden Unterabschnitt.

Zusätzlich folgt aus  $\alpha = \pi/6$  die Existenz eines weiteren gebundenen Zustandes mit  $S^z = 0$  bei  $E = 2m \sin(2\alpha) = \sqrt{3}m$ . Da es zu diesem Zustand keine entarteten Zustände mit  $S^z \neq 0$  gibt, schließt man, daß es sich um ein Singulett handelt [IX]. Auf das Problem schwach dimerisierter Spinketten übertragen heißt das, daß es einen gebundenen Singulettzustand bei  $\sqrt{3}\Delta_{\text{trip}}$  für  $k = 0, \pi$  gibt. Er hat die Bindungsenergie  $(2 - \sqrt{3})\Delta_{\text{trip}}$ , was qualitativ mit dem Ergebnis aus der Störungstheorie um den Dimerlimes (siehe Abb. 18) übereinstimmt.

Das Anregungsspektrum, wie es in Abb. 18 dargestellt ist, ist auch numerisch bestätigt worden [67]. Eine offene Frage ist noch, ob das Verhältnis Singulett- zu Triplettlücke von  $\sqrt{3}$  universell für den unterkritischen Bereich  $\alpha < \alpha_c$  ist. Es gibt Ergebnisse [74], die den Faktor  $\sqrt{3}$  nur beim kritischen Wert  $\alpha_c$  sehen. Für kleinere Frustrationen ergibt sich ein größerer Wert, für größere Frustrationen ein kleinerer. Die endgültige Klärung steht noch aus, da die numerischen Ergebnisse nicht alle übereinstimmen [75] und für den überkritischen Bereich die Numerik noch nicht reproduzieren konnte, daß die Singulettlücke mit der Triplettlücke bei  $\delta = 0$  übereinstimmt. Letzteres ist aber eine direkte Konsequenz der massiven, asymptotisch freien Spinonen. Für den unterkritischen Bereich stellt sich aber die interessante Frage, ob nicht die Kopplungen (Umklappstreuung), die für den nicht-dimerisierten Grundzustand marginal irrelevant sind, das Lückenverhältnis beeinflussen können.

#### 2.1.4 Bosonische Feldtheorie

Man kann zu den Ergebnissen des vorigen Unterabschnitts auch gelangen, wenn man eine bosonische Feldtheorie wählt. Es handelt sich um eine äquivalente Darstellung zu (18) [76], die jedoch den Vorteil hat, daß man schon mit semiklassischen Methoden die exakten gebundenen Zustände erhält. Außerdem erlaubt die semiklassische Behandlung auch die Erweiterung auf inkommensurabel modulierte Dimerisierungen, wie in Kapitel 3 beschrieben. Daher soll auch diese Darstellung hier eingeschlossen werden.

Ist die fermionische Dispersion vollkommen linear, so haben Teilchen-Loch-Anregungen eine wohldefinierte Energie-Impuls-Beziehung. Es gibt kein Kontinuum, sondern nur eine scharfe Linie. Daher kann man auch diese Teilchen-Loch-Paare als elementare Anregungen ansehen, die dann bosonischen Charakter haben. Dieser Schritt wird in der Literatur kurz als "Bosonisierung" bezeichnet. Verzichtet man auf Umklappstreuungsprozesse in der

Wechselwirkung, lassen sich somit wechselwirkende eindimensionale Fermionensysteme auf *freie* Bosonen zurückführen. Diese Beobachtung ist die Basis für das Tomonaga-Luttinger-Modell, das das eindimensionale paradigmatische Gegenmodell zu der höherdimensionalen Fermiflüssigkeit ist, die letztlich auf dem freien Fermionengas beruht [77–81,35] (für einen Überblick: [82–84]).

Möchte man nun die Bosonisierung auf dimerisierte und frustrierte Spinketten anwenden, so ist der erste Schritt wiederum die Jordan-Wigner-Transformation (16), die zum Hamiltonoperator (17) führt. Dann geht man zu einem Kontinuumsmodell über. Das heißt, man konzentriert sich auf die Verhältnisse an den Fermipunkten. Man unterscheidet Fermionen  $\psi_+$  in der Nähe des rechten Fermipunktes und Fermionen  $\psi_-$  in der Nähe des linken Fermipunktes, linearisiert ihre Dispersionen und dehnt die linearisierte Dispersion über alle Impulswerte aus. Dadurch, daß es also keine Begrenzung auf eine Brillouinzone mehr gibt, wird das Modell im Ortsraum kontinuierlich. An dieser Stelle sollte man sich jedoch merken, daß es für die Gittermodelle einen natürlichen Abschneideprozeß gibt. Die allgemeine Wechselwirkung  $V(k_1, k_2; k_3, k_4)$  mit Impulserhaltung  $k_1 + k_2 = k_3 + k_4$  wird auf die Werte bei  $k_i = \pm k_F = \pm \frac{\pi}{2}$  beschränkt.

Das so definierte fermionische Problem ist lokal in der nun kontinuierlichen Ortsvariablen  $x$  und kann bosonisiert werden. Dazu dient für spinlose Fermionen die Operatoridentität [81,35]

$$\psi_{\pm}^{\dagger}(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} U_{\pm} \exp[\pm i k_F x \mp i \phi(x) + i \theta(x)] , \quad (23)$$

worin das Vorzeichen die Fermionensorte angibt (rechts/links). Der Abschneideparameter  $a$  wird im Prinzip am Ende der Rechnungen gleich Null gesetzt. Bisweilen ist es auch sinnvoll, ihn in der Größenordnung der Gitterkonstante zu wählen [79]. Der Operator  $U_{\pm}$  erhöht die Anzahl  $N_{\pm}$  der rechten (+) bzw. der linken (–) Fermionen um Eins und zwar homogen auf der ganzen Länge  $L$  der Probe. Die Felder  $\phi$  und  $\theta$  sind bosonisch und “verteilen” die Fermionen räumlich. Explizit gilt

$$\phi(x) = \frac{-i\pi}{L} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{p} [\rho_+(p) + \rho_-(p)] \exp(-a|p|/2 - ipx) - N \frac{\pi x}{L} \quad (24a)$$

$$\Pi(x) = \frac{1}{L} \sum_{p \neq 0} [\rho_+(p) - \rho_-(p)] \exp(-a|p|/2 - ipx) + \frac{J}{L} , \quad (24b)$$

wobei die  $\rho_{\pm}(p)$  die Fourierkomponenten der Teilchendichteoperatoren für rechte bzw. linke Fermionen sind und  $N = N_+ + N_-$  und  $J = N_+ - N_-$ . Mit Hilfe der Vertauschungsrelationen

$$[\rho_+(-q), \rho_+(q')] = \frac{qL}{2\pi} \delta(q - q') \quad (25a)$$

$$[\rho_-(q), \rho_-(-q')] = \frac{qL}{2\pi} \delta(q - q') \quad (25b)$$

$$[\rho_+(q), \rho_-(-q')] = 0 \quad (25c)$$

sieht man, daß die Felder  $\phi$  und  $\Pi$  zueinander kanonisch konjugiert definiert sind

$$[\phi(x), \Pi(y)] = i\delta(x - y) , \quad (26)$$

so daß  $\Pi(x)$  ganz anschaulich als Impuls einer Auslenkung  $\phi(x)$  aufgefaßt werden kann. Die Phase  $\phi$  beschreibt die Fermionendichte relativ zu der des Grundzustands. Eine Stufe um  $\pi$  bei  $x$  entspricht dem Hinzufügen eines Teilchens bei  $x$ , was aus der Eigenschaft

$$\frac{\partial\phi}{\partial x} = -\pi(\rho(x) - \rho_0) \quad (27)$$

folgt, wobei  $\rho(x) = \rho_+(x) + \rho_-(x)$  der Operator der Gesamteilchendichte ist. Da Impulsoperatoren die infinitesimalen Generatoren von Verschiebungen sind, leistet der  $\theta$ -Anteil in (23) genau die Erhöhung von  $\phi$  im Intervall  $[-L/2, x]$

$$\theta(x) = \pi \int_{-L/2}^x \Pi(x') dx' . \quad (28)$$

Der  $\phi$ -Anteil stellt die Antivertauschungseigenschaften von  $\psi_{\pm}^{\dagger}(x)$  sicher.

Mit Hilfe von (23) gelangt man bei Vernachlässigung von Rückstreuung und Umklappstreuung im Wechselwirkungsterm zu

$$H = \frac{v_S}{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} \left( K(\pi\Pi)^2 + \frac{1}{K}(\partial_x\phi)^2 \right) dx , \quad (29)$$

was freien Bosonen mit linearer Dispersion entspricht, deren Geschwindigkeit durch  $v_S$  gegeben ist. Es besteht vollkommene Analogie zu den Schwingungen einer gespannten Saite, d.h. nach der Quantisierung zu ihren transversalen Phononen.

Für unsere isotrope  $S = 1/2$  Nächstnachbar-Spinkette sind die Parameter  $v_S = \pi/2$  und  $K = 1/2$ . Dabei muß gesagt werden, daß man diese Parameter leider nicht direkt durch Anwenden der oben beschriebenen Schritte erhält, da noch zusätzliche Terme generiert werden (siehe unten). Allerdings stellt (29) mit  $K = 1/2$  und allgemeiner Geschwindigkeit  $v_S$  das effektive Niederenergiemodell dar, das in einer Renormierungsbehandlung isotroper Spinketten mit und ohne Frustration als Fixpunkt angestrebt wird. Der Wert von  $K = 1/2$  ist, ähnlich wie wir es in der fermionischen Feldtheorie gesehen haben, durch die Spinsymmetrie bestimmt.

Der Term, der durch die Umklappstreuung  $(\pm k_F, \pm k_F) \rightarrow (\mp k_F, \mp k_F)$  noch erzeugt wird, lautet

$$H_U = D \int_{-L/2}^{L/2} dx \cos(4\phi) dx . \quad (30)$$

Über den genauen Wert des unrenormierten  $D$  herrscht noch keine Einigkeit in der Literatur [85–87]. Man erwartet  $D \propto (1 - c\alpha)$  mit  $c = 6$  [86] oder  $c = 3$  [88,89]. Für  $K = 1/2$  handelt es sich bei  $H_U$  um einen marginalen Operator [90], der für das Modell  $H + H_U$  als solches *keine* Lücke generiert. Tatsächlich werden jedoch im Laufe des Renormierungsflusses, der nicht bei  $K = 1/2$  startet, logarithmische Korrekturen aufgesammelt. Diese Korrekturen hängen mit dem Vorzeichen von  $D$  zusammen. Ausgehend von dem numerischen Ergebnis, daß sich oberhalb von  $\alpha_c = 0.241167(\pm 5)$  [20–23] eine exponentiell kleine Lücke öffnet, nimmt man  $D \propto (\alpha - \alpha_c)$  an [65,91,92,74] und schließt, daß die Umklappstreuung für  $\alpha > \alpha_c$  marginal relevant, für  $\alpha < \alpha_c$  jedoch marginal irrelevant ist. Verzichtet man auf die logarithmischen Korrekturen, so wird  $H_U$  mit dem Hinweis auf seine Marginalität auch häufig weggelassen.

Nun soll besprochen werden, daß Dimerisierung ebenfalls einen Kosinusterm induziert und bei Vernachlässigung der Umklappstreuung zu einem Sinus-Gordon-Modell führt. Es

handelt sich wiederum um Streuung bei  $k = \pi$ , die einen nichttrivialen Term erzeugt. Die Analyse des Dimerisierungsoperators [45,93,85] liefert, daß ein Term

$$H_D = -\delta B \int_{-L/2}^{L/2} \cos(2\phi) dx \quad (31)$$

erzeugt wird, wobei  $B$  eine Energie pro Länge ist, deren genauer Wert von der Renormierungsprozedur abhängt. Diese Störung ist relevant und führt selbst für infinitesimales  $\delta$  zum Auftreten einer Lücke.

Man erkennt das leicht in semiklassischer Behandlung, in der das Operatorfeld<sup>8</sup>  $\hat{\phi}$  durch die klassische Sattelpunktlösung und die gaußschen Fluktuationen um sie herum  $\phi_{\text{klass}} + \hat{\phi}_{\text{flukt}}$  ersetzt wird. Dabei wird der Kosinusterm aus (31) vereinfacht zu

$$\cos(2\hat{\phi}) \rightarrow \exp(-2\sigma) \cos(2\phi_{\text{klass}}) \left(1 - 2\hat{\phi}_{\text{flukt}}^2\right) \quad (32a)$$

$$\sigma(x) := \langle \hat{\phi}_{\text{flukt}}^2(x) \rangle . \quad (32b)$$

Vom Grundzustand mit  $\phi_{\text{klass}} = 0$  ausgehend erhält man  $\sigma = -(K/2) \ln \Delta$  und somit für die Energielücke

$$\Delta^2 \propto \delta \exp(-2\sigma) \quad (33a)$$

$$\Rightarrow \Delta \propto \delta^{1/(2-K)} . \quad (33b)$$

Analog findet man für die Energieabsenkung

$$\Delta E \propto -\delta^{(5-2K)/(4-2K)} . \quad (34)$$

Der Wert von  $K$  bestimmt sich am einfachsten aus dem Symmetrieargument für die dreifach entartete Tripletanregung auf der Basis der gebundenen Zustände, siehe unten. Man findet  $K = 1/2$ , woraus  $\Delta \propto \delta^{2/3}$  [45] und  $\Delta E \propto -\delta^{4/3}$  folgen. Weiterhin erkennt man, daß die anomale Dimension des Dimerisierungsoperators  $H_D$  gleich  $1/2$  ist. Wir finden also die Ergebnisse wieder, die schon im vorigen Unterabschnitt auftraten.

Um die vollständige Äquivalenz aufzuzeigen, seien die Ergebnisse für gebundene Zustände nach Dashen, Hasslacher und Neveu [94–97] angegeben

$$\Delta_n = 2\Delta \sin(n\pi\beta/2) \quad (35a)$$

$$\text{mit } n \in \{1, 2, 3, \dots < 1/\beta\} , \quad (35b)$$

wobei ein Sinus-Gordon-Modell mit Kosinusterm  $\cos(\nu\phi)$  mit

$$\beta = \frac{K\nu^2}{8 - K\nu^2} \quad (36)$$

betrachtet wurde. Direkten Bezug für Dimerisierung hat der Fall  $\nu = 2$ , der ein Singulett bei  $\sqrt{3}\Delta_{\text{trip}}$  impliziert. Der Fall interner Umklappstreuung  $\nu = 4$  ist ausgezeichnet, da dort (36) singular wird. Wir erkennen hierin eine Signatur der Marginalität. Die Moden (35)

---

<sup>8</sup>Hier tragen Operatoren zur Unterscheidung von Zahlen ein Dach, da ihr Unterschied gerade die semiklassische Näherung ausmacht.

wurden nicht exakt, sondern mit semiklassischen Pfadintegralmethoden gewonnen. Dabei werden um die klassischen Lösungen periodischer Bahnen herum die Fluktuationen als gaußisch betrachtet und integriert. Der Vergleich mit den Ergebnissen der fermionischen Feldtheorie aus dem vorigen Abschnitt nach Bergknoff und Thacker zeigt [73,76], daß sie exakt sind. Diese Tatsache gilt noch als unverstanden. Sie ist analog zur Exaktheit der Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingungen im einfachen Wasserstoffatom. Es ist daher zu vermuten, daß die Ursache darin liegt, daß die klassischen Lösungen alle periodisch sind.

In der bosonischen Darstellung haben wir es mit dem Problem eines quantisierten Sinus-Gordon-Modells zu tun. Darüber ist sehr vieles bekannt, was uns hilft, die Physik schwach dimerisierter Systeme zu verstehen. Noch besser wäre es aber, das Doppelsinus-Gordon-Modell behandeln zu können, so daß man die zusätzlichen Terme (30) und (31) gleichzeitig betrachten könnte. Dazu ist jedoch noch wenig bekannt. In der Tat ist es aber so, daß für kleine Dimerisierung  $\delta$  auch (30) einen Beitrag derselben  $\delta$  Potenz wie (31) liefert [93,85], obwohl (30) *ohne* Dimerisierung marginal irrelevant ist für  $\alpha < \alpha_c$ .

## 2.2 Gekoppelte Ketten, Leitern und Ebenen

Will man sich nun von der strikten Eindimensionalität lösen, so liegt es nahe, zu Leitern oder zu Ebenen gekoppelte Ketten zu betrachten. Man sollte erwarten, daß man bei solchen quasi-eindimensionalen Systemen mit ähnlichen Methoden und Bildern wie bei strikt eindimensionalen Systemen arbeiten kann. Tatsächlich sind Ansätze, die die Zwischenkettenkopplung in Molekularfeldnäherung für statische Größen beziehungsweise in *RPA* für dynamische Größen betrachten, sehr erfolgreich [98,99]. Dabei wird allerdings letztlich ein eindimensionales Problem in einem äußeren Feld, das den Effekt der Nachbarketten simuliert, gelöst.

In Molekularfeldnäherung wird bei antiferromagnetischer Zwischenkettenkopplung wiederum eine Bindung zwischen Spinonen auftreten. Die Nachbarkette erzeugt in der antiferromagnetisch geordneten Phase ein alternierendes magnetisches Feld, das in einer feldtheoretischen Beschreibung analog zu einem Dimerisierungsoperator wirkt [98,99]. Um die Bindung zweier Spinonen intuitiv zu verstehen, greift man auf das Bild eines Spinons ausgehend von néelartiger Ordnung (Abb. 8) zurück. Man erkennt, daß das Spinon eine Domänenwand zwischen den beiden möglichen Néelzuständen ist. In einem äußeren alternierenden Feld würde somit der Abschnitt zwischen zwei Spinonen wiederum energetisch ungünstig sein und ein attraktives Potential erzeugen. Man lernt aus dieser Betrachtung, daß die Spinonen als solche nicht die elementaren Anregungen eines zweidimensionalen Systems sind, da sie nicht asymptotisch frei sind. Domänenwände sind für höherdimensionale Systeme keine guten Kandidaten für elementare Anregungen. Dies bestätigt die Überlegungen aus der Einleitung.

Es ist hingegen einfach, das Magnonbild auf höherdimensionale Systeme zu übertragen. Dies ist Gegenstand der Arbeiten [II] und [VIII]. Betrachtet werden schwach gekoppelte dimerisierte Spinketten. Man geht vom Dimerlimes aus, in dem die Anregungen lokale Tripletts sind. Alle Zwischendimerkopplungen werden störungstheoretisch behandelt. Sie führen zu einem effektiven Hüpfen der Tripletts von Dimer zu Dimer. Die maximale Reichweite hängt von der Ordnung ab, in der Störungstheorie betrieben wird. In der Arbeit [VIII] wurde mit Ergebnissen dritter Ordnung die Symmetrie der Magnondispersion für  $\text{CuGeO}_3$  geklärt. Dabei konnte eine Fehlinterpretation von ESR-Daten in Ref. [3] aufgedeckt werden. Die quantitative Auswertung erzielt derzeit noch keine Übereinstimmung



mit den Analysen der Suszeptibilität [56,22,100]. Das ist einerseits auf den Abbruch der Störungsreihe nach dritter Ordnung, andererseits auf die Rechnung mit konstanten, temperaturunabhängigen Kopplungen zurückzuführen, siehe Arbeit [V]. Zu beiden Punkten laufen weiterführende Untersuchungen.

In der Arbeit [II] wurde für Vanadylpyrophosphat  $(VO)_2P_2O_7$  die Dispersion in fünfter Ordnung berechnet, was auf Grund der in dieser Substanz höheren Dimerisierung schon quantitative Ergebnisse liefert. Methodisch wird das durch eine kontinuierliche unitäre Transformation auf Flußgleichungsbasis [101,102] bewerkstelligt, die den Ausgangshamiltonoperator auf einen effektiven Hamiltonoperator abbildet, der mit der Triplettanzahl kommutiert [103].

Weiterhin wurde in vierter Ordnung die Bindung zweier Magnonen im  $S = 1$  Sektor berechnet. Tatsächlich wurde ein zweiter gebundener  $S = 1$  Zustand gefunden, wie er experimentell gesehen wird. Die Übereinstimmung mit dem Experiment ist noch nicht vollkommen befriedigend, da theoretisch der gebundene Zustand nicht in der ganzen Brillouinzone gefunden wird [II]. Zwar lassen sich Parametersätze finden, die in der ganzen Brillouinzone einen gebundenen Triplettzustand erlauben [54], doch ist die dafür anzunehmende Dimerisierung zu groß [II]. Weitere experimentelle und theoretische Arbeit sollte es ermöglichen, ein in allen Größen konsistentes Modell zu finden.

Als letztes soll erwähnt werden, daß es auch räumlich isotrope zweidimensionale Modelle gibt [104], die einen dimerisierten Grundzustand besitzen. Der entscheidende Mechanismus, der den dimerisierten Grundzustand stabilisiert, ist einmal mehr Frustration. Die  $S = 1$  Anregungen haben eine nennenswerte Energielücke und eine geringe Dispersion [105]. Tatsächlich ist ein solches Gitter mit  $SrCu_2(BO_3)_2$  auch experimentell realisiert [105]. Auf Grund der allgemeinen Regel, daß Frustration das Hüpfen vermindert, Wechselwirkung jedoch verstärkt, siehe (15), ist zu erwarten, daß es gebundene Zustände gibt, obwohl das Modell zweidimensional ist.

## 2.3 Störstellen

Der Effekt von Dotierung beziehungsweise von Kettenenden ist Inhalt der Arbeiten [I,III]. Dotiertes  $CuGeO_3$  ist experimentell ausführlich untersucht worden für verschiedene Dopanden Zn [106–109], Mg [110], Si [111–113], Ni [107,109,108] und Mn [108]. Der Einfluß der verschiedenen Substanzen ist ähnlich [114]. Augenfällig ist das Auftreten von Antiferromagnetismus in Koexistenz mit der Dimerisierung.

Dotiert man Spinsysteme, die sich in einem *RVB*-artigen Grundzustand befinden, so entstehen ungepaarte  $S = 1/2$  Objekte [115–117]. Für die Erklärung nehmen wir zunächst an, daß eine unmagnetische Störstelle an Stelle eines Spins eingeführt wird. Waren vor der Dotierung alle Spins zu Singulett gepaart, so fehlt nun einem Spin der Partner, so daß ein  $S = 1/2$  Spinon übrigbleibt. Wird eine  $S = 1$  Störstelle eingeführt, so ist die Situation ähnlich. Sie koppelt mit den zwei benachbarten  $S = 1/2$  zu  $S = 0$ , wobei aber wieder ein  $S = 1/2$  Spinon ungepaart bleibt [118,119].

Der Einfachheit halber werden wir im folgenden Kettenenden betrachten, die man sich durch unmagnetische oder magnetische Störstellen verursacht denken kann [I]. Ohne Dimerisierung ist das ungepaarte Spinon<sup>9</sup> nicht lokalisiert und entlang der ganzen Kette zu

---

<sup>9</sup>Der Begriff ‘Spinon’ wird hier verwendet, um anzudeuten, daß nicht ein nackter Spin gemeint

finden [120,121]. Mit Dimerisierung kommt es auf die Beschaffenheit der Kopplung zwischen letztem und vorletztem Spin an. Ist diese überdurchschnittlich, so gibt es in diesem Kettenstück *kein*  $S = 1/2$ , da alle Spins einen natürlichen Partnerspin zur Singulettbildung haben, siehe Abb. 1(b) in [I]. Ist die letzte Kopplung hingegen unterdurchschnittlich, so entsteht ein Spinon, da der letzte Spin keinen natürlichen Partnerspin zur Singulettbildung hat, siehe Abb. 1(a) in [I]. Bewegt sich nun dieses Spinon, so kostet das potentielle Energie, wie in Abb. 1(c) in [I] skizziert. Auf dem Kettenstück zwischen dem Kettenende und dem Spinon sind die starken Kopplungen und die Singuletts falsch ausgerichtet. Dies begründet ein anziehendes Potential, das letztlich zu *confinement* führt.

Für Spin-Peierls-Systeme mag man an dieser Stelle einwenden, daß sich die Verzerrung der Verteilung der Singuletts anpassen kann. Dazu sind zwei Punkte zu bemerken. Der erste betrifft die Geschwindigkeiten der Prozesse. Die Verzerrung wird sich nur dann der magnetischen Situation anpassen, wenn die Phononen schneller sind als die Spinonen. Grob gesprochen muß  $J < \omega$  gelten. Darauf wird in Kapitel 4 noch ausführlich eingegangen. Der zweite, hier wesentliche Punkt ist die Beeinflussung einer Kette durch ihre Nachbarketten über die elastische Wechselwirkung. Damit ist gemeint, daß die Verzerrung auf einer Kette eine Verzerrung auf den Nachbarketten begünstigt (siehe Gl. (38)). Das rührt einerseits von der Dispersion der Phononen senkrecht zu den Ketten her. Andererseits sind die relevanten Phononen in den betrachteten Gittern mit Basis ausgedehnte Objekte [122–124]. Da sich nun die einzelne Störstelle, wie wir sie bei geringer Störstellenkonzentration betrachten können, und mit ihr das Spinon nur auf einer Kette befindet, bleiben die Nachbarketten unverändert dimerisiert. Sie prägen der gestörten Kette über die elastische Wechselwirkung eine statische Dimerisierung auf. Dies ist das adiabatische Bild, das wir hier verwenden.

Das Skalierungsverhalten des bindenden Potentials hängt wiederum vom Wert der Frustration ab. Ist diese unterkritisch, so hat man ein Ansteigen mit Wurzelverhalten  $V(x) \propto \sqrt{|x|}$  [I]; im überkritischen Bereich ein lineares Ansteigen  $V(x) \propto |x|$  [II,III]. Auf jeden Fall ist das Spinon in der Nähe des Kettenendes gebunden, was man in numerischen Rechnungen an Hand der lokalen magnetischen Momente auch sehr gut sieht [I]. Weiterhin gibt es auch noch angeregte gebundene Zustände, die unterhalb des Kontinuums liegen [I]. Tatsächlich wurden in ESR-Experimenten [125] und in elastischer Lichtstreuung [III], [126,127] Linien beobachtet, die gut mit dem Bild gebundener Zustände zusammenpassen. Allerdings stimmen die Energien dieser Linien nicht mit den Ergebnissen strikt eindimensionaler Rechnungen überein.

Um die Situation in höheren Dimensionen zu beschreiben, ist es günstig, in das Magnonbild zu wechseln. Für das qualitative Verständnis soll uns nullte und erste Ordnung Störungsrechnung genügen. Der durch die Dotierung freigesetzte Spin ist dann absolut lokal neben der Störstelle, wie in Abb. 20 in der ersten Zeile gezeigt. Wendet man nun den spinerhaltenden Ramanoperator  $R$  [70,128] an, so kann man ein einzelnes Triplet anregen, obwohl es Spin  $S = 1$  hat. Es handelt sich um eine spinonassistierte Tripletterzeugung, bei der der  $S = 1/2$  Spin und der  $S = 1$  Spin nach dem Streuprozeß zu  $S_{\text{tot}} = 1/2$  gekoppelt sind [III]. Aus der undotierten Substanz heraus mit  $S = 0$  Grundzustand ist ein solcher Streuprozeß, bei dem nur ein Triplet erzeugt wird, nicht möglich.

---

ist, sondern ein komplizierteres, ausgedehntes Objekt.

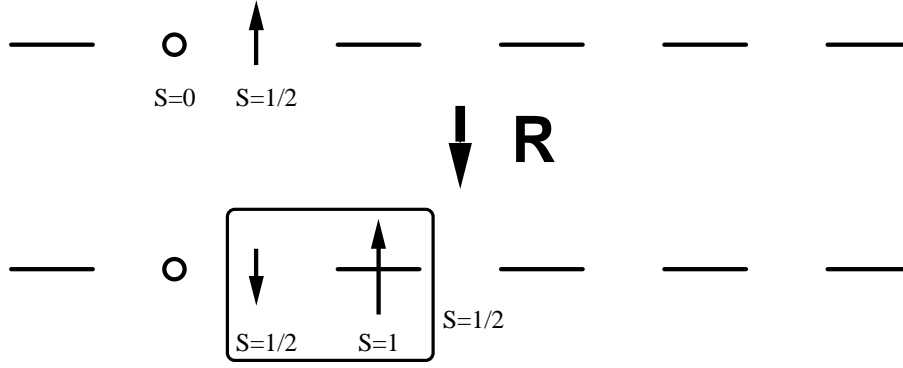


Abbildung 20. Wirkung des Ramanoperators auf ein stark dimerisiertes System mit Störstelle. Ein Triplet wird erzeugt bei Erhaltung des Spins.

Das Triplet kann sich nun auf Grund der schwächeren Kopplungen vom Ort seiner Erzeugung entfernen. Davon würde man allerdings nur ein relativ breites (Breite  $\approx J$ ) Kontinuum im Spektrum erwarten, das bei der Triplettlücke  $\Delta_{\text{trip}}$  beginnt. Tatsächlich wird aber ein relativ scharfer Pik beobachtet, der dem aus zwei Magnonen aufgebauten Singulettzustand bei ca.  $1.9\Delta_{\text{trip}}$  ähnlich ist [III]. Diese Ähnlichkeit bezieht sich sowohl auf die Pikform als auch auf alle Auswahlregeln. Die Kante des spinonassistierten Piks liegt auch knapp unterhalb von  $\Delta_{\text{trip}}$ .

Zusätzlich zu dem Hüpfmatrixelement aus (15) findet man

$$w_{1/2} = -(\lambda/2)(1 + 2\bar{\alpha}) \quad (37)$$

für die Wechselwirkungsenergie, wenn das Triplet neben dem freien Spin sitzt. Daraus resultiert ein gebundener Zustand, der im Spektrum einen Pik unterhalb des Kontinuums verursacht. Die resultierenden Bindungsenergien sind allerdings zu groß im Vergleich zu den experimentellen Daten.

Generell ist es so, daß Bindungseffekte in höheren Dimensionen schwächer sind. Ursache ist der verminderte zur Verfügung stehende Phasenraum bei niedrigen Energien. Die Zustandsdichte an der unteren Bandkante divergiert in  $d = 1$  wie  $1/\sqrt{\omega}$ , ist in  $d = 2$  konstant  $\omega^0$  und verschwindet in  $d = 3$  wie  $\sqrt{\omega}$ . Daher ist zu erwarten, daß die Berücksichtigung von Zwischenkettenkopplungen die Bindungsenergien vermindert und die Piks gebundener Zustände näher an die Kontinua rückt, wie es der experimentellen Situation entspricht [III]. Die fehlende quantitative Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment falsifiziert das grundsätzliche Bild also nicht.

Für Spin-Peierls-Systeme, deren elastische Zwischenkettenkopplung nicht sehr groß ist, kann die Betrachtung einer Störstelle in einer fest dimerisierten Kette noch verbessert werden, indem eine adaptive Modulation zugelassen wird. Dazu wird die Verzerrung selbstkonsistent berechnet aus der Minimierung des folgenden Hamiltonoperators (siehe auch (11b) und Abschnitt 3.2)

$$H = J \sum_i \left[ (1 + \delta_i) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \alpha \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} + \frac{K}{2} \delta_i^2 + f \delta_i (-1)^i \delta_{\text{bulk}} \right], \quad (38)$$

wobei  $K = K_0 + f$  sei und  $K_0$  die Federkonstante ist, die man im rein eindimensionalen System nähme, um dieselbe Verzerrung  $\delta_{\text{bulk}}$  in der homogen dimerisierten Phase zu erhalten. Der Term  $f \delta_i (-1)^i \delta_{\text{bulk}}$  beinhaltet den Einfluß, den die fest dimerisierten Nachbarketten

auf die gestörte Kette ausüben. Sie prägen der gestörten Kette eine Vorzugsdimerisierung auf.<sup>10</sup>

Die Ergebnisse aus der Minimierung von (38) sind in Abb. 21 dargestellt [129]. Der Grundzustand des Spinsystems wurde dabei mit Dichtematrixrenormierung bestimmt [IV,I]. Entsprechende Daten wurden mit Quanten-Monte-Carlo auch von Poilblanc und Mitarbeitern gefunden [118,119].

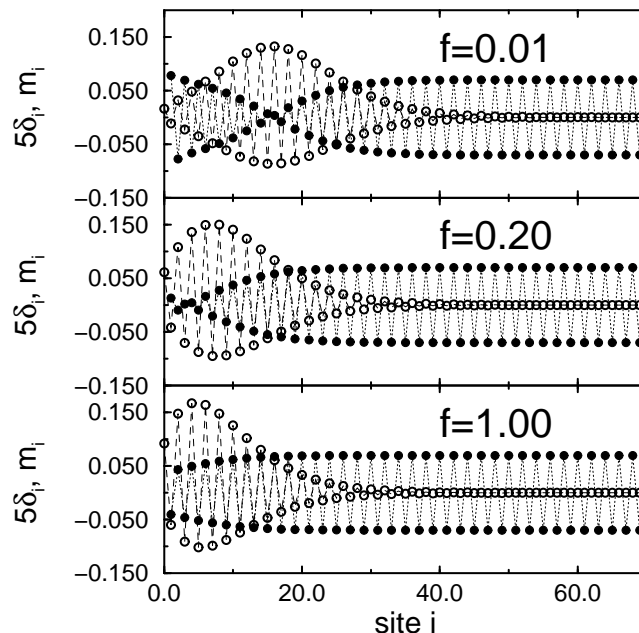


Abbildung 21. Lokale Verzerrungen (fünffach vergrößert) und Magnetisierungen in der Nähe eines Kettenendes, das heißt einer Störstelle am Platz 0. Die Parameter sind  $K = 18.064$ ,  $\alpha = 0.35$  und  $f$  wie angezeigt.

Man erkennt in Abb. 21, daß das Spinon, dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit proportional zu  $m_i$  ist [I], nicht direkt an der Störstelle lokalisiert ist, sondern an der sich ausbildenden Nullstelle der Verzerrung  $\delta_i$ . Diese Nullstelle entsteht, da das System am Kettenende eine starke Bindung bevorzugt, um den letzten Spin zu paaren. Das gibt ein Dimerisierungsmuster vor, das aber nicht dem durch die Nachbarketten begünstigten Muster entspricht. Daher wandelt sich das Dimerisierungsmuster je nach dem Wert von  $f$  in unterschiedlich großem Abstand wieder zum Bulkstruktur um (siehe Abb. 21), so daß eine Nullstelle entsteht. Die Bindung des Spinons an diese Nullstelle kann ähnlich wie die Bindungen bei konstanter Dimerisierung verstanden werden, wie in [I] dargelegt ist.

Berechnet man die Energielücke  $\Delta$  bei festgehaltenen Verzerrungen wie in Abb. 21 gezeigt, so findet man, daß sie signifikant kleiner ist als die Bulktriplettlücke  $\Delta_{\text{trip}}$ . Sie ändert sich wenig mit  $f$  und beträgt 52% für  $f = 0.01$  und 64% für  $f = 1$  von  $\Delta_{\text{trip}}$ . Dies ist ein Hinweis dafür, daß zumindest in der hier vorgestellten adiabatischen Rechnung Selbstlokalisierung (“self-trapping”) auftritt. Das Spinon ist in erster Linie an die Nullstelle

---

<sup>10</sup>Vernachlässigt sind in Gl. (38) die Rückwirkungen der gestörten Kette auf die Nachbarketten. Man überlegt sich jedoch schnell, daß diese Effekte wie  $1/z$  unterdrückt sind, wobei  $z$  die Anzahl der Nachbarketten ist.

gebunden, so daß die Anregungsenergien nicht wesentlich vom Abstand zum Kettenende abhängen. Das kombinierte Objekt Spinon-Nullstelle, also ein Soliton, wird von der Zwischenkettenkopplung an die Störstelle gedrückt (siehe auch [130]).

Die adaptive Rechnung als solche ergibt jedoch keine Verbesserung der Übereinstimmung der Energiewerte mit dem Experiment gegenüber den Betrachtungen in fest dimerisierten Ketten. Die Werte sind vergleichbar niedrig (vgl. [I,III]). Auch bei adaptiver Modulation ist der Einfluß der magnetischen Zwischenkettenkopplung entscheidend und führt zur Verminderung der Bindungsenergie.

Um das experimentelle Bild abzurunden, sei auf das Auftreten einer antiferromagnetischen Phase bei Dotierung hingewiesen. Bisher haben wir jeweils nur eine isolierte Störstelle betrachtet und in drei verschiedenen Zugängen lokalisierte  $S = 1/2$  Momente festgestellt. Erhöht man nun die Konzentration dieser lokalisierten Spinonen, beginnen diese, über den Austausch von Magnonen antiferromagnetisch wechselzuwirken. Diese Kopplungen bestehen entlang der Ketten und zwischen den Ketten, so daß ein dreidimensionaler verdünnter Antiferromagnet mit variierenden Kopplungen entsteht, der einen Néelgrundzustand hat. Allerdings besteht noch kein Konsens, in welcher Art sich die relevante Energieskala  $T_{\text{Néel}}$  ergibt [131–133].

### 3. Inkommensurabel modulierte Phasen

Legt man an ein Spin-Peierls-System in der D-Phase bei tiefen Temperaturen ein Magnetfeld an, so bleibt diese Phase stabil bis zum Erreichen eines kritischen Magnetfeldes  $H_c$  (Abb. 16). Die Stabilität rührt von der Singulett-Triplett-Lücke  $\Delta_{\text{trip}}$  her. Eine Abschätzung für  $H_c$  ist daher auch  $g\mu_B H_c = \Delta_{\text{trip}}$ . Tatsächlich ist  $H_c$  etwas kleiner und seine Zeemanenergie liegt bei ca. 80% der Energielücke. Oberhalb des kritischen Feldes verändert sich nämlich auch die Modulation. Das System bildet eine inkommensurabel verzerrte Phase (I-Phase) aus. Die Eigenschaften dieser I-Phase sind Gegenstand der Arbeiten [IV] und [VI] mit Bezügen zu [I].

Im ersten Unterkapitel wird eine im wesentlichen sinusoidale Modulation diskutiert. Im zweiten wird die Modulation selbstkonsistent berechnet. Beide Modelle behandeln die Verzerrung adiabatisch. Im letzten Unterkapitel schließlich wird aufgezeigt, daß der nichtadiabatische Charakter einen wichtigen Einfluß auf die beobachteten Amplituden der alternierenden Größen hat.

#### 3.1 Sinusoidale Modulation

In einer Reihe von Arbeiten wurde mit elastischer Röntgenstreuung gezeigt [134–136], daß die Verzerrungen in der I-Phase tatsächlich inkommensurabel sind, wobei die Abweichung von der Dimerisierung  $|q - \pi|$  mit dem Magnetfeld ansteigt. Das ist leicht zu verstehen, wenn man sich die Situation zunächst in einem XY-Modell veranschaulicht, das nach (17) ohne Frustration ( $\alpha = 0$ ) freien Fermionen entspricht. Betrachtet man die Suszeptibilität bezüglich einer Verzerrung, so ist diese für  $q = 2k_F$  maximal, da für diesen Wellenvektor Teilchen-Loch-Paare verschwindender Energie erzeugt werden können. Es bildet sich also eine Verzerrung bei  $q = 2k_F = 2\pi n = 2\pi m + \pi$  aus, wobei  $n$  die Teilchendichte im fermionischen Modell ist und  $m$  die Magnetisierung im Spinmodell (16a). Weil durch diese Verzerrung die entarteten Zustände bei  $-k_F$  mit denen bei  $k_F$  gekoppelt werden, entsteht bei  $k = \pm k_F$  eine Lücke. Schaltet man nun stetig die Wechselwirkungen bei festgehaltener Teilchenzahl an, so können keine Zustände über diese Lücke springen, so daß das Bild einer Verzerrung bei  $2k_F$  auch mit Wechselwirkung gültig bleibt [VI], [38]. Man erhält die Beziehung

$$|q - \pi| = 2\pi m . \quad (39)$$

Numerisch läßt sich diese Relation explizit bestätigen [IV].

Da sich nun experimentell herausgestellt hat, daß die höheren Harmonischen der Verzerrung deutlich unterdrückt sind [135], liegt es nahe, als erstes folgendes Modell zu betrachten

$$H = J \sum_i [1 - \delta_1 \cos(qr_i)] \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \quad (40)$$

mit einem (39) entsprechenden  $q$ . Diese Betrachtung wurde in [VI] durchgeführt. Es wurde auch noch die dritte Harmonische bei  $3q$  berücksichtigt, deren Amplitude jedoch nur ca. 7% der ersten Harmonischen bei  $q$  beträgt. Die resultierenden kleinen Korrekturen liegen jedoch nur im Prozentbereich.

Unser Augenmerk gilt den lokalen Magnetisierungen  $m_i = \langle S_i^z \rangle$ , deren Verteilung in NMR-Experimenten [137–140] bestimmt werden kann. Die experimentellen Daten wurden mit einigem Erfolg mit einer Kontinuumstheorie [141] verglichen. Diese beruhte jedoch auf

einer Hartree-Fock-Behandlung, in der die Hartree- und Fockterme als räumlich *konstant* angenommen wurden. Es wird in [VI] gezeigt, daß dies eine zu grobe Näherung ist. Die Physik reduziert sich auf die einer *XY*-Kette. Die antiferromagnetischen Korrelationen sind erheblich kleiner als in einer isotropen *XYZ*-Spinkette. Dieser Schluß wird auch von anderen Ergebnissen gestützt [142,143], [IV]. Damit stellt sich allerdings die Frage, warum im Experiment die relativ kleinen Amplituden einer *XY*-Kette gesehen werden. Die gute Spinisotropie in Kupraten kann nicht in Zweifel gezogen werden. Die in [VI] vorgeschlagene Lösung besteht darin, daß man experimentell eine effektive Magnetisierung  $m_i^{\text{eff}}$  sieht, die einem Mittelwert benachbarter Magnetisierungen  $m_i$  entspricht

$$m_i^{\text{eff}} = (1 - 2\gamma)m_i + \gamma(m_{i-1} + m_{i+1}) . \quad (41)$$

Tatsächlich stimmen die Ergebnisse nach einer Mittelung mit  $\gamma = 0.2$  gut mit dem Experiment überein [VI]. Die mikroskopische Begründung für die Mittelung wird in Abschnitt 3.3 skizziert.

Der Grund, warum man überhaupt an den Nullstellen der Modulation starke lokale Magnetisierungen sieht, liegt in der Lokalisierung eines Spinons. Jede Nullstelle bindet genau ein Spinon [I], was man auch durch Summation der  $m_i$  um ein Maximum herum feststellen kann. Es ergibt sich genau  $1/2$ .

In [IV] wurde für die sinusoidale Modulation (40) das Verhalten der Grundzustandsenergie als Funktion der Magnetisierung untersucht. Die Kenntnis von  $E(m)$  erlaubt, auf die Ordnung des Phasenübergangs zu schließen. Mittels einer Legendretransformation  $\tilde{E}(h) = E(m) - hm$  erhält man auch Kenntnis von  $\tilde{E}(h)$ , der Abhängigkeit der Grundzustandsenergie vom Magnetfeld  $h = g\mu_B H$ . Aus einer Unstetigkeit von  $E(m)$  für  $m \rightarrow 0$  folgt, daß der Übergang von der D- in die I-Phase bei sinusoidaler Modulation erster Ordnung ist. Die Hauptursache für die Unstetigkeit liegt darin, daß der Mittelwert des Quadrats der sinusoidalen Verzerrung  $\cos(qr_i)$  auf Grund der diskreten  $r_i$  unstetig von 1 auf  $1/2$  springt, wenn  $q$  infinitesimal von  $\pi$  verschieden ist [IV].

Zwar ist experimentell der Übergang von der D- in die I-Phase tatsächlich von erster Ordnung [144,135,137,47,46]. Doch ist die beobachtete Unstetigkeit nur gering. Eine Beschreibung mit rein sinusoidaler Modulation ist nicht hinreichend.

## 3.2 Adaptive Modulation

Im vorigen Unterkapitel wurde abschließend festgestellt, daß eine sinusoidale Modulation zu einem Phasenübergang erster Ordnung führt. Daher wenden wir uns wieder dem Minimierungsproblem (11) zu und bestimmen die Verzerrungen selbstkonsistent. Ableitung nach  $\delta_i$  liefert im Grundzustand je nach Kopplungsmuster

$$0 = \langle \mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_i \rangle - \langle \mathbf{S}_{i-1} \mathbf{S}_i \rangle + K_s \delta_i \quad (42a)$$

$$0 = \langle \mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_i \rangle - \langle \langle \mathbf{S}_{j+1} \mathbf{S}_j \rangle \rangle + K_v \delta_i , \quad (42b)$$

wobei in der zweiten Gleichung (42b) noch die Nebenbedingung, daß die Verzerrungen im Mittel Null sein sollen, berücksichtigt wurde. Dies führt zu dem Auftreten des Mittelwertes aller Nächstnachbar-Skalarprodukte  $\langle \langle \mathbf{S}_{j+1} \mathbf{S}_j \rangle \rangle$ .

In Abb. 22 ist ein typisches Ergebnis gezeigt, das mittels DMRG gewonnen wurde [145].

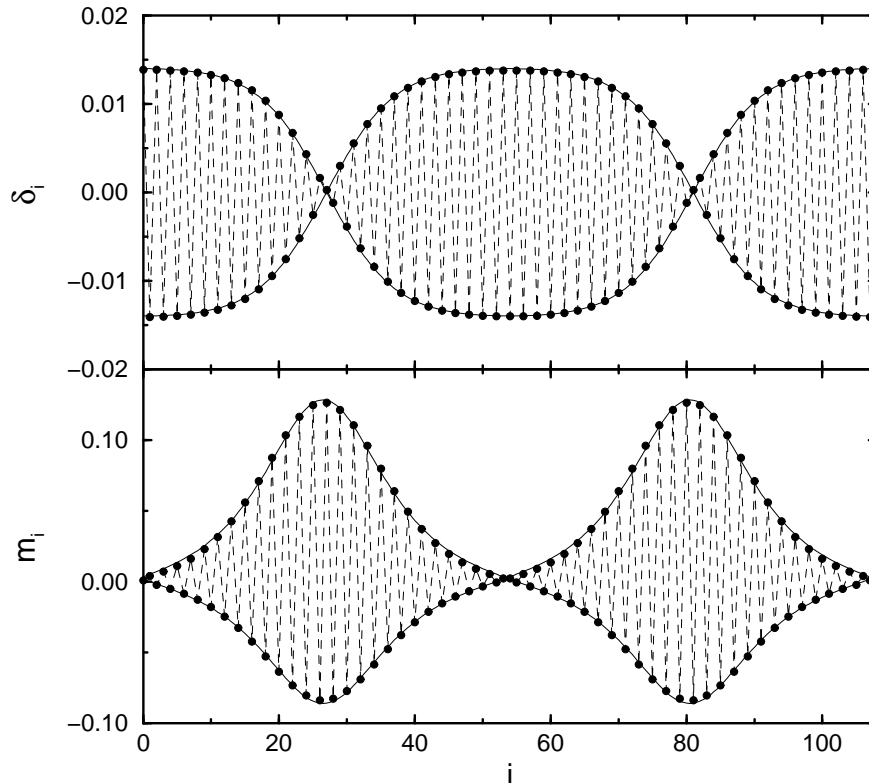


Abbildung 22. Verzerrungen  $\delta_i$  und lokale Magnetisierungen  $m_i = \langle S_i^z \rangle$  für ein Solitongitter mit zwei Solitonen in einer periodischen Probe von 108 Plätzen. Die Parameter sind  $K_v = 18$  und  $\alpha = 0.35$ . Die durchgezogenen Linien sind Fits gemäß der Gleichungen (43) mit  $\delta = 0.014$ ,  $k_d = 0.965$ ,  $\xi_d = 10.1$  und  $W = 0.21$ ,  $R = 5.0$ ,  $k_m = 0.992$ ,  $\xi_m = 7.8$ .

Auf der magnetischen Seite ist kein wesentlicher Unterschied zu den Ergebnissen bei sinusoidaler Verzerrung in [VI] zu finden. Das ist nicht verwunderlich, weil die Lokalisierung im wesentlichen vom Nulldurchgang der Verzerrung bestimmt ist [I]. Für die Verzerrungen ergibt sich, daß auch die Abweichung von konstant alternierender Dimerisierung lokalisiert ist, was aus Bedingung (42) folgt.

Im folgenden verwenden wir den Begriff ‘Soliton’ für die aufeinander abgestimmte Kombination einer Nullstelle der Verzerrung und eines dort lokalisierten Spinons. Die Verzerrung eines isolierten Solitons ist stufenartig (*kink*). Darin offenbart sich der wesentliche Vorteil zu einer sinusoidalen Verzerrung. Während bei der sinusoidalen Verzerrung das mittlere Verzerrungsquadrat sofort auf die Hälfte des Werts im homogen dimerisierten Zustand abfällt, ist der Abfall bei einer periodischen Anordnung von Solitonen, d.h. bei einem Solitongitter, proportional zur Solitonenanzahl und zu ihrer Breite  $\xi$ . Eine geringe Solitonenkonzentration bedeutet daher auch nur eine geringe Änderung der Energie, so daß  $E(m)$  Lipschitz-stetig ist [IV].

Wir haben  $E(m)$  für das Modell (11b) untersucht und gefunden, daß es zu einem stetigen Phasenübergang führt, wenn auch die Magnetisierung sehr schnell wie  $m \propto -1/\ln(H - H_c)$  ansteigt [IV]. Die Ergebnisse gängiger Kontinuumstheorien beinhalten ebenfalls Phasenübergänge zweiter Ordnung [146–151,141]. Lediglich Horovitz erwähnt in einer frühen Arbeit [152] die Möglichkeit von Solitonenanziehung, die zur einem Übergang erster Ordnung führen würde. Buzdin und Mitarbeiter erwarten bei endlichen Temperaturen einen Phasenübergang erster Ordnung [153].

Tatsächlich kommt es auf die Details der elastischen Energie an. Wie schon Cross [154] qualitativ argumentierte, führt eine elastische Energie *mit* Dispersion  $K(q)$ , die Verzer-



rungen mit  $q = \pi$  bevorzugt, wieder zu Phasenübergängen erster Ordnung [IV]. Die positive Krümmung der wellenvektorabhängigen Federkonstanten  $K(q)$  im Bereich  $q \approx \pi$  unterdrückt höhere Harmonische in der optimalen Verzerrung und begünstigt daher sinusoidale Modulation. Gleichzeitig wird ein konkaves Verhalten<sup>11</sup> von  $E(m)$  bei kleiner Magnetisierung erzeugt, das über eine Maxwellkonstruktion zu Phasenseparation führt. Also ist der Phasenübergang erster Ordnung [IV]. Der Sprung in der Magnetisierung kann jedoch beliebig schwach sein in Abhängigkeit von der genauen Dispersion  $K(q)$ , was ein interessantes Szenarium für den Übergang erster Ordnung in  $\text{CuGeO}_3$  liefert. Diese Ergebnisse stimmen mit der Schlußfolgerung aus einer phänomenologischen Ginzburg-Landau-Beschreibung [155] überein, daß ein Phasenübergang erster Ordnung D→I das typische Szenarium ist.

Direkt am Phasenübergang sind die Solitonen relativ weit voneinander entfernt und der Unterschied zwischen sinusoidaler und adaptiver Modulation fällt ins Gewicht. Bei höheren Solitonkonzentrationen ergibt sich in jedem Fall eine sinusoidale Modulation, deren Amplitude vom Modell abhängt. Das mittlere Verzerrungsquadrat konnte aus den Gitterkonstanten bestimmt werden und deckt sich gut mit den Vorhersagen aus dem Modell (11b), siehe [49].

Es gibt eine Reihe von Kontinuumstheorien für Solitongitter. Die meisten behandeln im wesentlichen die freien Fermionen des Peierls-Übergangs bzw. der reinen XY-Kette [146–153,141]. Es gibt jedoch auch Ableitungen für die isotrope Heisenbergkette [93,85,87]. Das Resultat läßt sich in

$$m_i = \frac{W}{2} \left\{ \frac{1}{R} \text{dn} \left( \frac{r_i}{k_m \xi_m}, k_m \right) + (-1)^i \text{cn} \left( \frac{r_i}{k_m \xi_m}, k_m \right) \right\} \quad (43a)$$

$$\delta_i = \delta \text{sn} \left( \frac{r_i}{k_d \xi_d}, k_d \right) \quad (43b)$$

zusammenfassen (sn, cn, dn sind die elliptischen Jacobifunktionen [156]). Dabei gelten zwischen den Parametern  $W$ ,  $R$ ,  $k_m$ ,  $\xi_m$ , und  $k_d$ ,  $\xi_d$  gemäß der Kontinuumstheorien noch folgende Zusammenhänge

$$\xi := \xi_m = \xi_d \quad \Leftrightarrow \quad k := k_m = k_d \quad (44a)$$

$$1 = 4m k_{m/d} K(k_{m/d}) \xi_{m/d} \quad (44b)$$

$$1 = \pi k_m \xi_m \frac{W}{R} . \quad (44c)$$

Die erste Beziehung (44a) rührt daher, daß eine feste Proportionalität zwischen der lokalen Verzerrung und dem Kosinus der klassischen Phase  $2\phi$  der bosonisierten Theorie  $\cos(2\phi)$  angenommen wird (siehe unten). Die zweite Beziehung rührt daher, daß durch die Magnetisierung auch die Periodizität festgelegt ist nach (39) und [156]. Die dritte Beziehung folgt ebenfalls aus der mittleren Magnetisierung  $m$ , die nach (43a) durch

$$m = \frac{W}{2R} \text{dn} \left( \frac{r}{k_m \xi_m}, k_m \right) = \frac{W}{2R} \frac{\pi}{2K}$$

---

<sup>11</sup>Das konkave Verhalten tritt auf, wenn in der Rechnung eine äquidistante Solitonverteilung erzwungen wird. Ließe man eine allgemeine Solitonverteilung zu, fände man die Phasenseparation direkt. Letzteres ist rechnerisch aber viel schwieriger.

gegeben ist, woraus (44c) durch Einsetzen von (44b) folgt. Die überstrichenen Größen sind über eine Periode gemittelt.

Die Fits in Abb. 22 basieren auf den Ansätzen (43). Dabei wurde (44a) *nicht* beachtet, da sonst keine Übereinstimmung erzielt würde. Die Relation (44b) wurde verwendet. Die Relation (44c) kann überprüft werden. Sie ist mit Fehlern im Prozentbereich erfüllt<sup>12</sup>.

Hervorhebenswert ist der Unterschied zwischen der elastischen  $\xi_d$  und der magnetischen Solitonbreite  $\xi_m$ . Er beträgt ungefähr 30%, hängt aber noch von der Frustration ab [145]. Die Tatsache, daß  $\xi_d/\xi_m$  deutlich über Eins liegt, stimmt mit den experimentellen Befunden überein. Mit elastischer Röntgenstreuung [135] wird ein Wert von  $\xi_d = 13.6 \pm 0.3$  gefunden. Die NMR-Untersuchungen liefern in der Nähe des Übergangs den Wert  $\xi_m \approx 10$  [140], so daß das Verhältnis gut mit dem numerischen Resultat übereinstimmt.

Die Ursache für die Abweichung vom Resultat (44a) findet sich in der Behandlung der Fluktuationen und der durch sie induzierten Renormierung. Die semiklassische Behandlung, die im Unterabschnitt 2.1.4 über bosonische Feldtheorie skizziert ist, liefert mittels Variation nach der Verzerrung  $\delta(x)$  die Beziehung  $\delta(x) \propto e^{-2\sigma} \cos(2\phi_{\text{klass}})$ . Wir interessieren uns für Lösungen, bei denen  $\phi_{\text{klass}}$  um  $\pi$  ansteigt, was einem Soliton entspricht. Wird  $\sigma(x)$  nun *konstant* gleich dem Wert im Grundzustand gesetzt [93,85], so erhält man

$$\delta(x)/\delta = \cos(2\phi_{\text{klass}}) = \tanh(x/\xi) , \quad (45)$$

wobei  $\xi$  durch das Verhältnis Spinwellengeschwindigkeit zu Energielücke  $v_s/\Delta$  gegeben ist. Da die alternierende Komponente der Magnetisierung proportional ist zu  $\sin(2\phi_{\text{klass}})$ , erhält man direkt  $\sqrt{1 - \tanh^2(x/\xi)} = 1/\cosh(x/\xi)$  für ihre Ortsabhängigkeit.

Berücksichtigt man jedoch, daß die Renormierung in Anwesenheit eines Solitons von der im Grundzustand um  $\Delta\sigma$  abweicht, so erhält man für die alternierende Komponente der Magnetisierung  $\sqrt{1 - \exp(4\Delta\sigma) \tanh^2(x/\xi)}$ , was wegen  $\Delta\sigma > 0$  schmaler ist als die ursprüngliche Abhängigkeit [157]. Eine quantitative Auswertung steht noch aus. Es ist jedoch nach dem eben gesagten schon einsichtig, daß das von Eins abweichende Verhältnis  $\xi_d/\xi_m$  auf die Ortsabhängigkeit der Renormierung  $\sigma(x)$  zurückzuführen ist.

### 3.3 Phasonen

In [VI] wurde aufgezeigt, daß die Amplitude der alternierenden Magnetisierung deutlich um einen Faktor 4 bis 6 zu groß ist im Vergleich zum Experiment. Auch umfangreichere Rechnungen für adaptive Modulation ändern nichts an dieser Diskrepanz [145]. Daher haben wir vorgeschlagen, daß im Experiment nicht die lokale Magnetisierung  $m_i$  an einem Kupferion gemessen wird, sondern ein gewisser Mittelwert  $m_i^{\text{eff}}$

$$m_i^{\text{eff}} = (1 - 2\gamma)m_i + \gamma(m_{i+1} + m_{i-1}) . \quad (46)$$

Mit  $\gamma = 0.2$  ließ sich eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielen.

---

<sup>12</sup>Man beachte, daß (44c) im diskreten System nur insoweit erfüllt sein muß, als man das Integral über die Jacobifunktionen durch eine Summe über Stützstellen mit Abstand  $1/(k_m \xi_m)$  beschreiben kann.

Es bleibt die Frage nach der mikroskopischen Ursache für die Mittelung. Tatsächlich sind nichtadiabatische Effekte dafür verantwortlich. Das Solitongitter schwingt um seine Ruhelage. Den Charakter dieser Schwingungen versteht man besser, wenn man eine Kontinuumsbeschreibung wählt, die zulässig ist, wenn  $\xi$  deutlich größer als die Gitterkonstante ist. In einer solchen Kontinuumsbeschreibung kann die Modulation  $\delta(x)$  eines Solitongitters ohne Energieaufwand längs der Ketten verschoben werden. Das System ist translationsinvariant. Das Solitongitter bricht diese Symmetrie spontan. Daher sind seine Anregungen Goldstonemoden, deren Energie für  $\mathbf{k} \rightarrow 0$  gegen Null strebt. Diese Phasonen verhalten sich absolut analog zu Phononen eines Kristallgitters bis auf die Tatsache, daß es zu jedem Wellenvektor nur eine Mode gibt, da nur in eine Richtung, nämlich entlang der Ketten, verschoben werden kann. Obwohl das ideale Spin-Peierls-System magnetisch eindimensional ist, sind die Verzerrungen auf verschiedenen Ketten elastisch gekoppelt. Daher sind die Phasonen Objekte mit dreidimensionaler, wenn auch anisotroper Dispersion. Die Parameter der Dispersion sind über die Anisotropie von Korrelationslängen und eine Ginzburg-Landau-Theorie bestimmt worden [155]. Der zugehörige  $T^3$  Term in der spezifischen Wärme ist tatsächlich gemessen worden [158] und Theorie und Experiment stimmen gut überein.

Die oben erwähnte Mittelung der alternierenden Magnetisierung kann nun als Effekt der Nullpunktsschwingungen und der angeregten Schwingungen der Phasonen verstanden werden. Sei das adiabatische Ergebnis von der Form  $m_i = a(r_i) \cos(\pi r_i) + u(r_i)$ , wobei  $r_i$  die Komponente entlang der Ketten ist und  $a(r_i)$  den alternierenden Anteil sowie  $u(r_i)$  den homogenen Anteil der Magnetisierung darstellt. Der Einfluß einer Verschiebung durch Phasonen kann berücksichtigt werden, indem  $\pi r_i \rightarrow \pi r_i + \hat{\Theta}(\mathbf{r}_i)$  ersetzt wird. Gemessen wird auf den relativ langen Zeitskalen einer NMR-Messung der Erwartungswert

$$m_i^{\text{exp}} = \langle m_i \rangle \quad (47a)$$

$$= a(r_i) \langle \cos(\pi r_i + \hat{\Theta}(\mathbf{r}_i)) \rangle + u(r_i) \quad (47b)$$

$$= a(r_i) \gamma' \cos(\pi r_i) + u(r_i) \quad (47c)$$

$$\text{mit } \gamma' := \exp\left(-\frac{1}{2N} \sum_i \langle \hat{\Theta}^2(\mathbf{r}_i) \rangle\right) < 1. \quad (47d)$$

Man erkennt, daß es in der Tat eine Reduktion gibt, die durch die örtlichen Fluktuationen gegeben ist. Der Faktor  $\gamma'$  ist dem Debye-Waller-Faktor vergleichbar, der aus den Nullpunktsschwingungen und aus den Anregungen von Phononen resultiert [5].

Bestimmt man die zwei führenden Ordnungen in  $T$ , so erhält man mit den Werten aus [155]

$$\gamma' = 0.16 \exp(-(T/T^*)^2/2) \quad (48)$$

mit  $T^* \approx 16.9\text{K}$ . Um auf die Formel (46) zu kommen, bestimmen wir die Funktionen  $a(r)$  und  $u(r)$  aus den diskreten  $m_i$  approximativ mit

$$a(r_i) = m_i/2 - (m_{i-1} + m_{i+1})/4 \quad (49a)$$

$$u(r_i) = m_i/2 + (m_{i-1} + m_{i+1})/4. \quad (49b)$$

Setzt man diese Gleichungen wieder in (47c) ein, so erhält man bei verschwindender Temperatur  $\gamma = (1 - \gamma')/4$ . Der so bestimmte Wert für  $\gamma$  (0.21) stimmt gut mit dem Experiment überein [159,145].

Die obenstehenden Ausführungen zeigen, daß die Dynamik des Gitters auf keinen Fall vernachlässigt werden darf. Die adiabatische Behandlung allein reicht nicht aus. Das eben vorgestellte Konzept mag noch unbefriedigend erscheinen, da auf eine adiabatische Rechnung am Ende eine nichtadiabatische Korrektur aufgesetzt wird. Daher soll im nächsten Kapitel ein Zugang besprochen werden, der nichtadiabatische Effekte systematisch behandelt.

## 4. Nichtadiabatische Phononenbehandlung

Dieses Kapitel basiert auf Arbeit [V]. In Abschnitt 3.3 wurde bereits ein experimenteller Befund, die Reduktion der alternierenden Amplitude, besprochen, der eindeutig auf die Bedeutung der Phonodynamik hinweist. Hier wird nun ein alternativer systematischer Zugang behandelt, der es erlaubt, ein Modell *mit* Spin-Phonon-Kopplung unitär abzubilden auf ein effektives Modell *ohne* Spin-Phonon-Kopplung. Zuvor werden verschiedene andere Zugänge beleuchtet.

### 4.1 Molekularfeldnäherung und *Random Phase Approximation*

In Unterkapitel 1.4 wurde bereits das Spin-Peierls-Problem (8) in Molekularfeldnäherung der phononischen Freiheitsgrade besprochen. Der Terminus *Random Phase Approximation (RPA)* bezieht sich darauf, daß die Wechselwirkung zwischen Spins und Phononen in den Phononenpropagatoren durch eine einfache Phononselbstenergie ausgedrückt wird. Der volle Phononpropagator<sup>13</sup>  $D(\omega, q)$  ergibt sich dann aus dem freien (d.h. ohne Spin-Phonon-Wechselwirkung) Propagator  $D_0(\omega, q)$  über die Dysongleichung [160,161]

$$D(\omega, q) = \frac{2\omega_0(q)}{\omega^2 - \omega_0^2(q) - 2\omega_0(q)P(\omega, q)} . \quad (50)$$

Die Dispersion der nichtwechselwirkenden Phononen ist  $\omega_0(q)$ . Die Selbstenergie  $P(\omega, q)$  ist das Produkt aus dem Quadrat der Kopplungskonstante  $g_q$  und der freien Suszeptibilität  $\chi_0(\omega, q)$  des Spinsystems bezüglich einer Modulation der Kopplungen. Es handelt sich um eine Dimer-Dimer-Suszeptibilität [45,161], die von Cross und Fisher mittels Bosonisierung berechnet worden ist.

Die in (50) formulierte Näherung stellt die Verallgemeinerung der statischen Molekularfeldtheorie auf dynamische Größen dar. Man kann (50) ableiten, indem man für das Phononsystem den Wechselwirkungsterm in (7a) ersetzt gemäß

$$A_{\mathbf{q}}(b_{\mathbf{q}}^+ + b_{-\mathbf{q}}) \rightarrow \langle A_{\mathbf{q}} \rangle(\omega) \exp(i\omega t)(b_{\mathbf{q}}^+ + b_{-\mathbf{q}}) . \quad (51)$$

Den benötigten Ausdruck für  $\langle A_{\mathbf{q}} \rangle(\omega) \exp(i\omega t)$  erhält man mit zeitabhängiger linearer Antworttheorie für die Störung des Spinsystems durch

$$A_{\mathbf{q}}(b_{\mathbf{q}}^+ + b_{-\mathbf{q}}) \rightarrow A_{\mathbf{q}} \exp(-i\omega t)u_{\mathbf{q}} . \quad (52)$$

Man erkennt, daß genauso faktorisiert wird wie für die statische Molekularfeldnäherung, außer daß noch eine periodische Zeitoszillation mitgenommen wird. Diese Verwandtschaft erklärt aber auch, warum die Ergebnisse der statischen Molekularfeldtheorie (z.B. Verschwinden des Ordnungsparameters bei  $T = T_c$  [162]) zu den Ergebnissen der *RPA* passen (Divergenz des vollen Phononpropagators bei  $\omega = 0$  bei  $T = T_c$ ). Diese Art der Entsprechung von Näherungen für verschiedene Größen ist im Kontext wechselwirkender fermionischer Systeme gut bekannt [163,164]. Es kommt dort darauf an, daß Einteilchen-Näherungen den Summenregeln für die genäherten Zweiteilchen-Größen entsprechen.

---

<sup>13</sup>Der Wellenvektor  $q$  gibt die Komponente entlang der Ketten an.

Die Beziehung (50) läßt sich auch leicht diagrammatisch als Summation der geometrischen Reihe von Blasketten ableiten [45], wobei der Charakter einer Schwachkoppelungsnäherung sichtbar wird. Der *RPA*-Zugang ist also gut für kleine Kopplungen  $g$ . Cross und Fisher argumentieren, daß der *RPA*-Zugang als Molekularfeldzugang auch gut ist, wenn die Fluktuationen klein sind. Das ist der Fall, wenn die Phononen von Anfang an recht niederenergetisch sind, so daß immer sehr viele Phononen (Anzahl  $p$ ) an einer Modulation beteiligt sind und die relativen Fluktuationen gemäß  $1/\sqrt{p}$  klein sind.

Vergleicht man nun eine typische organische Spin-Peierls-Substanz, für die Cross und Fisher ihren Zugang entwickelt haben, und  $\text{CuGeO}_3$  in Tabelle 1 [45,165,123,124], so erkennt man, daß die Voraussetzungen bei der anorganischen Substanz ganz andere sind.

<b>Experiment und Substanzen</b>	
$(\text{TTF})\text{CuS}_4\text{C}_4(\text{CF}_3)_4$ $T_{\text{SP}} = 12 \text{ K}$ $J = 68 \text{ K}$ $\Delta \approx 20 \text{ K}$ $\omega_0 \approx 10 \text{ K}$ weichwerdendes Phonon vermutet	$\text{CuGeO}_3$ $T_{\text{SP}} = 14 \text{ K}$ $J \approx 150 \text{ K}$ $\Delta \approx 23 \text{ K}$ $\omega_0^{(1)} = 150 \text{ K}; \omega_0^{(2)} = 313 \text{ K}; \omega_0^{(3)} = 533 \text{ K}; \omega_0^{(4)} = 1180 \text{ K}$ <b>kein</b> weichwerdendes Phonon beobachtet
<b>Theorie</b>	
langsame Phononen $\omega_0 < \Delta$ Spins passen sich Phononen an Phononen adiabatisch zu behandeln effektives Phononmodell Niederenergie: phononisch	schnelle Phononen $\omega_0 > \Delta$ Phononen passen sich Spins an Phononen nicht adiabatisch zu behandeln effektives Spinmodell Niederenergie: magnetisch

Tabelle 1: Vergleich der Kenngrößen einer organischen Spin-Peierls-Substanz und der anorganischen Spin-Peierls-Substanz  $\text{CuGeO}_3$  und die Konsequenzen für ihre theoretische Behandlung

Die Energien in der organischen Substanz sind nur sehr grob geschätzt. Es zeigt sich jedoch klar, daß für  $(\text{TTF})\text{CuS}_4\text{C}_4(\text{CF}_3)_4$  eine adiabatische Beschreibung gut begründet werden kann, da die Energie des Phonons *kleiner* ist als die entstehende Energielücke  $\omega_0 < \Delta$ . In numerischen Arbeiten war die Bedingung  $\omega_0 < \Delta$  notwendig, damit ein “renormiert-klassisches” Bild zutrifft [166]. In diesem Fall ist eine Molekularfeldbeschreibung sinnvoll.

Die Theorierubrik der Tabelle 1 basiert auf der Tatsache, daß generell das Verhalten eines physikalischen Systems von den niederenergetischen Freiheitsgraden bestimmt ist, die gegebenenfalls durch die Wechselwirkung mit höherenergetischen Freiheitsgraden renormiert werden. Beim Vorhandensein weicher Phononen ist es also sinnvoll, ein effektives Phononmodell zu betrachten, in dem die magnetischen Freiheitsgrade die Phononen renormieren. Liegen die energetischen Verhältnisse jedoch umgekehrt, so ist ein effektives Spinmodell die natürliche Beschreibung. Genau ein solches effektives Spinmodell ist in [V] vorgestellt worden.

An dieser Stelle sei erwähnt, daß auch die *RPA*-Behandlung im nichtadiabatischen Parameterbereich  $\omega_0 > \Delta$  kein weichwerdendes Phonon liefert, sondern einen zentralen

Pik [161]. Man mag von daher zu dem Schluß kommen, daß eine Erweiterung der *RPA*-Beschreibung unnötig ist. Jedoch bleibt die Tatsache bestehen, daß die Energieverhältnisse (siehe Tabelle 1) nicht für eine *RPA*-Behandlung sprechen. Weiterhin ergibt sich, daß die Kopplungskonstanten recht groß sind [124], so daß es keine Rechtfertigung der *RPA*-Behandlung als Schwachkopplungszugang gibt. Der wesentliche Schwachpunkt bleibt, daß es im Rahmen der *RPA* keinen Unterschied macht, ob es im System nur eine endliche oder eine makroskopische Anzahl von relevanten Schwingungen gibt. Es werden keine kritischen Fluktuationen berücksichtigt.

## 4.2 Nichtadiabatische Zugänge

Es gibt eine Reihe von nichtadiabatischen Zugängen, die aber miteinander gemein haben, daß sie nur die führende Ordnung einer Entwicklung in  $J/\omega_0$  systematisch als hermitesche Hamiltonkorrektur liefern. Der (vermutlich) älteste Zugang im Zusammenhang mit Spin-Peierlsartigen Problemen stammt von Pytte für ein Isingmodell, das an Gitterfreiheitsgrade gekoppelt ist [167]. Er studierte eine Kopplung der Art

$$H_{\text{SB}} = g \sum_i (b_i^\dagger + b_i) A_i \quad (53a)$$

$$\text{z.B. } A_i = (S_i^z S_{i+1}^z - S_i^z S_{i-1}^z). \quad (53b)$$

Da die  $z$ -Komponenten aller Spins vertauschen, ist es in diesem Fall einfach, die Kopplung wegzutransformieren. Nehmen wir der Einfachheit halber an, daß die Phononen alle dieselbe Energie  $\omega_0$  haben (Einsteinphononen), dann bringt die Verschiebung

$$b_i \rightarrow \tilde{b}_i = b_i - \frac{g}{\omega_0} A_i \quad (54)$$

die lineare Kopplung (53a) zum Verschwinden. Dafür entsteht ein zusätzlicher Term

$$\Delta H = -\frac{g^2}{\omega_0} A_i^2. \quad (55)$$

Dieses Vorgehen ist exakt, da die Operatoren  $\tilde{b}_i$  bosonische Vernichter sind, die mit ihren hermitesch konjugierten Erzeugern  $\tilde{b}_i^\dagger$  die kanonischen Vertauschungsrelationen erfüllen. Diese Tatsache stützt sich jedoch entscheidend auf die Vertauschbarkeit aller  $z$ -Komponenten und gilt nicht für den isotropen Heisenbergfall.

Im Peierlsfall, d.h. Kopplung an fermionische Freiheitsgrade, ist eine zu (54) analoge Transformation bei Kopplung an fermionische Dichten ebenfalls vorgeschlagen worden [168]. Damit diese Transformation exakt ist, ist es allerdings notwendig, daß die Fermionen *keine* Dispersion haben.

Die letzte Bemerkung ist ein Hinweis darauf, inwieweit man eine Transformation wie (54) für allgemeine Kopplungen retten kann. Im antiadiabatischen Grenzfall  $J/\omega_0 \rightarrow 0$  kann man die Phononen ausintegrieren [99,169] und erhält genau den Term (55). Eine Verallgemeinerung auf kompliziertere Dispersionen ist direkt [99].

Die Frage stellt sich nach der systematischen Erweiterung. Mit Methoden der Ausintegration ist es durchaus möglich weiterzugehen. Die Retardierung der durch die Phononen vermittelten zusätzlichen Spin-Spin-Wechselwirkung führt jedoch zum Auftreten nichthermitescher Terme im resultierenden effektiven Hamiltonoperator [169]. Diese Terme ergeben

endliche Lebensdauern und entsprechen dem physikalischen Verhalten. Allerdings erschweren sie eine weitere Auswertung des resultierenden effektiven Hamiltonoperators mit den üblichen Methoden. Daher studieren wir im folgenden unitäre Transformationen, die ebenfalls die Spin-Phonon-Kopplung eliminieren. Jedoch erhalten sie auf Grund ihrer Unitarität die Hermitizität des Hamiltonoperators.

### 4.3 Flußgleichungszugang

Die Grundidee ist dieselbe wie beim Zugang von Fröhlich [170] für Elektron-Phonon-Kopplung. Es wird eine unitäre Transformation durchgeführt, die die unerwünschten Terme im Hamiltonoperator eliminiert.

Sei also der Hamiltonoperator aufgespalten  $H = H_{\text{Diag}} + H_{\text{Rest}}$  in den Anteil  $H_{\text{Diag}}$ , den man aus physikalischen oder rechentechnischen Gründen behalten möchte, und den Anteil  $H_{\text{Rest}}$ , den man wegtransformieren möchte. Dann entspricht es dem Zugang von Fröhlich, die unitäre Transformation in einem Schritt durchzuführen gemäß

$$H_{\text{eff}} = \exp(-S)H \exp(S) , \quad (56)$$

wobei  $S$  ein antihermitescher Operator ist. Entwicklung bis zu linearer Ordnung in  $S$  bzw. in  $H_{\text{Rest}}$  liefert die Bedingung

$$0 = H_{\text{Rest}} + [H_{\text{Diag}}, S] \quad (57)$$

und die Hamiltonkorrektur

$$\Delta H = \frac{1}{2}[H_{\text{Rest}}, S] . \quad (58)$$

Aus (57) folgt für den Fall  $H_{\text{Diag}} = H_{\text{S}} + H_{\text{B}}$ , daß  $H_{\text{B}}$  freie Einsteinphononen  $b_i$  der Energie  $\omega_0$  beschreibt,

$$S = \sum_i (R_i b_i^\dagger - R_i^\dagger b_i) \quad (59a)$$

$$\text{mit } R_i = \frac{-g}{\mathcal{L} + \omega_0} A_i \quad (59b)$$

$$\mathcal{L}X = [H_{\text{S}}, X] , \quad (59c)$$

wobei  $\mathcal{L}$  ein Liouvilleoperator ist und zwar hier die Vertauschung mit  $H_{\text{S}}$ . Der resultierende Ausdruck (58) liefert die führende Ordnung in  $g^2$ . Der wesentliche Punkt, der an Hand der obenstehenden Formeln illustriert werden soll, ist das Auftreten von Energienennern wie in (59b). Man erkennt, daß die Terme divergieren, wenn  $\omega_0$  einer Energie aus  $H_{\text{S}}$  entspricht. Damit bricht das Schema als Entwicklung im eigentlichen Sinne zusammen.

Am Beispiel des Ein-Störstellen-Andersonmodells wurde dieses Phänomen ausführlich diskutiert [171]. Das Auftreten von Resonanz steht damit im Zusammenhang, daß man durch die Erfüllung von (57) Matrixelemente in  $H_{\text{Rest}}$ , die Eigenzustände von  $H_{\text{Diag}}$  mit ähnlichen Energien verbinden, im selben Schritt wegtransformiert wie Matrixelemente, die sehr unterschiedliche Energien verbinden. Damit verletzt die einstufige unitäre Transformation aus (56) die Grundüberlegung der Renormierung, daß zuerst größere Anregungsenergien und dann nach und nach kleinere Anregungsenergien behandelt werden müssen, um zu einem physikalischen Niederenergiemodell zu gelangen.



Hält man an der Idee einer unitären Transformation fest und möchte die Renormierungseigenschaft hinzugewinnen, so ist das möglich, wenn man eine Folge infinitesimaler unitärer Transformationen benutzt [101,172,173]. In der Formulierung von Wegner führt man eine Laufvariable  $\ell \in [0, \infty]$  ein, die die Schar transformierter Hamiltonoperatoren  $H(\ell)$  parametrisiert. Dabei ist  $H(0)$  der Ausgangsoperator und  $H(\infty) = H_{\text{eff}}$  der gesuchte effektive Operator. Die infinitesimale Transformation, der Fluß, wird durch den antihermiteschen Generator  $\eta(\ell)$  erzeugt

$$\frac{dH}{d\ell} = [\eta(\ell), H(\ell)] , \quad (60)$$

weshalb diese Methode als Flußgleichungszugang bezeichnet wird. Eine kanonische Wahl für  $\eta(\ell)$  [101] ist

$$\eta(\ell) = [H_{\text{Diag}}(\ell), H(\ell)] . \quad (61)$$

Mit dieser Wahl und für eine  $\ell$ -unabhängige diagonale Matrix  $H_{\text{Diag}}$  mit den Energien  $\varepsilon_k$  ergibt sich eine exponentielle Unterdrückung der Nichtdiagonalelemente  $h_{k,k'}$  gemäß  $h_{k,k'} = h_{k,k'}^{(0)} \exp(-(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})^2 \ell)$  [101]. Man erkennt an diesem Ausdruck die Renormierungseigenschaft. Die Nichtdiagonalelemente zwischen sehr unterschiedlichen Energien werden stark unterdrückt, die zwischen ähnlichen Energien nur schwach.

In der praktischen Anwendung führt die Renormierungseigenschaft des Flußgleichungszugangs dazu, daß die generierten Kopplungen weniger singular sind als die, die man mit einer einstufigen Transformation erhält [171]. Als Illustration mag das Problem der Elektron-Phonon-Kopplung dienen, für die Lenz und Wegner zeigten [174], daß die resultierende Cooperpaar-Wechselwirkung  $V_{k,-k,q}$  im ganzen Energiebereich anziehend ist

$$V_{k,-k,q}^{\text{LW}} = -|M_q|^2 \frac{\omega_q}{(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)^2 + \omega_q^2} \quad (62a)$$

$$V_{k,-k,q}^{\text{F}} = |M_q|^2 \frac{\omega_q}{(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)^2 - \omega_q^2} . \quad (62b)$$

Die Fermiondispersion ist  $\varepsilon_k$ , die Phononenergie  $\omega_q$  und die Kopplung  $M_q$ . Das obere Ergebnis ist das Flußgleichungsergebnis, das untere das der einstufigen Transformation. An den Energienennern liest man ab, daß die einstufige Transformation Resonanz bei  $\omega_q = |\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k|$  zeigt (verbunden mit Vorzeichenumkehr), während das in (62a) nicht der Fall ist.

Die Anwendung des Flußgleichungszugangs auf das Spin-Peierls-Problem ist in [V] durchgeführt. Neben einer Entwicklung in der relativen Kopplung  $g/\omega_0$  wird im Verhältnis  $J/\omega_0$  entwickelt und es werden die beiden führenden Ordnungen berechnet. Es zeigt sich, daß diese beiden Ordnungen noch mit denen einer einstufigen Transformation übereinstimmen. Auf Grund der recht großen Kopplung  $g$  [124] ist eine Weiterführung der Rechnung sicherlich notwendig. Die Arbeit [V] stellt erst einen Anfangspunkt dar. Qualitativ läßt sich jedoch schon einiges aus den in [V] gewonnenen Ergebnissen lernen.

Man erhält für das effektive Spinmodell allgemein die Korrekturterme

$$\Delta H_X = \frac{-g^2}{\omega_0} \sum_i A_i^+ A_i \quad (63a)$$

$$\Delta H_Y = \frac{g^2}{2\omega_0^2} \coth\left(\frac{\omega_0}{2T}\right) \sum_i [A_i^+, \mathcal{L}A_i] . \quad (63b)$$

Setzt man nun einen generischen Operator für die Kopplung ein, z.B.<sup>14</sup>

$$A_i = (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i-1}) , \quad (64)$$

so erhält man konkret für eine einzelne Kette

$$\Delta H_X = \frac{g^2}{\omega_0} \sum_i (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{2} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} - \frac{3}{8}) \quad (65a)$$

$$\Delta H_Y = \frac{J g^2}{4 \omega_0^2} \coth \left( \frac{\omega_0}{2T} \right) \sum_i (-(3 - 3\alpha) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + (3 - 5\alpha) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} + 2\alpha \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+3}) . \quad (65b)$$

Damit hat man zumindest für  $g/\omega_0 \ll 1$  und  $J/\omega_0 \ll 1$  ein effektives rein magnetisches Modell abgeleitet, wie es nach den Überlegungen zu den Energieskalen sinnvoll ist. Weiterhin kann man auf diese Art systematisch zeigen, daß die magneto-elastischen Solitonen analytisch auf rein magnetische Spinonen abgebildet werden können. Die physikalischen Eigenschaften beider Objekte sind daher gleich, wie schon früher vermutet wurde [68].

Im wesentlichen liest man vom Ergebnis (65) ab, daß die Kopplung an Phononen zusätzliche langreichweitige Spinkopplungen erzeugt, im besonderen Übernächstnachbar-Frustration. Nun wissen wir andererseits, daß Frustration ein marginaler Operator ist, der erst ab einer gewissen Stärke zum spontanen Symmetriebruch der Translationssymmetrie und dem Auftreten einer Lücke führt. Wir erwarten also, daß auch die Kopplung an Phononen für die einzelne Kette eine marginale Störung ist, die erst ab einer gewissen Mindeststärke  $g_c$  zur Symmetriebrechung führt. Dies ist auch numerisch gefunden worden [176]. Die numerische Untersuchung ist jedoch nicht einfach, da man nach dem eben gesagten ein exponentiell schwaches Wachsen der Lücke bzw. des Ordnungsparameters  $\Delta \propto \exp(-C/(g - g_c))$  erwartet ( $C$ : Konstante der Größenordnung 1) [91]. Weiterhin wissen wir aus dem Verständnis der massiven Spinonen im Majumdar-Ghosh-Modell [41], daß das Zweispinon-Kontinuum direkt oberhalb der Energielücke beginnt. Von daher ist die experimentelle Evidenz einer "doppelten" Lücke [177] ein direkter Hinweis auf die (elastische) Kopplung zwischen den Ketten (siehe unten).

Bemerkenswert ist das Auftreten temperaturabhängiger Kopplungen in (65), siehe auch [175]. Es stellt die Anwendbarkeit rein statischer Spinmodelle in Frage [56,22,100], obwohl diese bei der Beschreibung der magnetischen Suszeptibilität sehr erfolgreich sind. Ein erster experimenteller Hinweis auf eine Temperaturabhängigkeit von  $J(T)$  findet sich beim Vergleich der Neutronenstreudaten [178] mit den Rechnungen bei endlichen Temperaturen [44]. Fabricius und Löw finden bei  $T = 50\text{K}$  einen Wert  $J = 158\text{K}$  und bei  $T = 300\text{K}$  einen Wert  $J = 136\text{K}$ . Die direkte Abhängigkeit von  $J$  über die Änderung der Struktur [179] ist jedoch eine Größenordnung zu klein, um diesen Effekt zu erklären [122,124]. Eine grobe Abschätzung der nach (65) möglichen Temperaturabhängigkeit ergibt  $T_{\text{SP}} = 14\text{K} \approx g^2/\omega_0 \approx Jg^2/\omega_0^2$ . Von dieser Größenordnung kann also eine temperaturinduzierte Änderung der Kopplungskonstanten sein. Ein Fit an die Suszeptibilität lieferte

---

<sup>14</sup>Dieser Term hat gegenüber dem Term  $A_i = \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}$  den Vorteil, daß er in der unverzerrten Phase keinen Beitrag liefert, siehe [V], [175]. Letztlich muß man sich aber an den mikroskopischen Eigenschaften der Phononen orientieren [124].

Kopplungsänderungen [V], die auch quantitativ gut mit der Analyse von Fabricius und Löw übereinstimmen. Weitere Untersuchungen in diese Richtung laufen.

Soweit wurde eine einzelne Kette betrachtet. Der Spin-Peierls-Übergang bei endlicher Temperatur kann jedoch nur in einem Ensemble von elastisch gekoppelten Ketten auftreten [130,180]. Dieses Ensemble kann man beschreiben, indem man berücksichtigt, daß die Phononen nicht nur an einer Kette eine Kopplung verändern. Die Phononen sind nicht vollkommen lokal, sondern beeinflussen auch jeweils die Nachbarketten. Das kann in das Modell eingebaut werden durch die Betrachtung des Kopplungsoperators

$$A_{i,j} = \mathbf{S}_{i,j}\mathbf{S}_{i+1,j} - \mathbf{S}_{i,j}\mathbf{S}_{i-1,j} + w \sum_{\langle j,j' \rangle} (\mathbf{S}_{i,j'}\mathbf{S}_{i+1,j'} - \mathbf{S}_{i,j'}\mathbf{S}_{i-1,j'}) , \quad (66)$$

worin  $i$  wie gehabt der Platzindex in einer Kette ist und  $j$  der Index, der die Kette bezeichnet. Die Summe  $\langle j, j' \rangle$  erstreckt sich über benachbarte Ketten. Der Faktor  $w$  gibt an, inwieweit die Nachbarketten der Kette  $j$  von den bei  $j$  lokalisierten Phononen beeinflusst werden. Für  $w = 0$  erhält man wieder den Fall isolierter Ketten (64). Für  $w \neq 0$  entstehen in  $\Delta H_X$  aus (63a) zusätzliche Terme, die zu denen in (65a) hinzukommen

$$-\frac{2g^2w}{\omega_0} \sum_{i,\langle j,j' \rangle} (\mathbf{S}_{i,j}\mathbf{S}_{i+1,j} - \mathbf{S}_{i,j}\mathbf{S}_{i-1,j})(\mathbf{S}_{i,j'}\mathbf{S}_{i-1,j'} - \mathbf{S}_{i,j'}\mathbf{S}_{i-1,j'}) . \quad (67)$$

Die Korrektur  $\Delta H_Y$  ändert sich nicht. Da die Terme innerhalb einer Kette nur eine marginale Störung bedeuten (siehe oben), sind es letztlich die Terme in (67), die den Spin-Peierls-Übergang treiben. Sie stellen überhaupt erst einen Bezug zwischen der Dimerisierung auf einer Kette mit der auf einer anderen Kette her. Die Kohärenz der Dimerisierung in verschiedenen Gebieten wird also durch die Terme in (67) erzeugt, weshalb wir den Ausdruck Kohärenzterme für sie vorschlagen.

Der Spin-Peierls-Übergang präsentiert sich als ein isingartiger Übergang, der eine lokale Variable  $\mathbf{S}_{i,j}\mathbf{S}_{i+1,j} - \mathbf{S}_{i,j}\mathbf{S}_{i-1,j}$  hat, die stetig zwischen  $-\sqrt{3}/2$  und  $\sqrt{3}/2$  variiert. Es handelt sich um einen Ordnungs-Unordnungs-Übergang (siehe auch [130,68,180]). Ein weichwerdendes Phonon taucht in dieser Beschreibung nicht auf. Es gibt keine *ausgedehnte* Mode, deren Energie am Übergang verschwindet. Gleichwohl gibt es natürlich energetisch tiefliegende Anregungen am Übergang (kritische Fluktuationen), die der Verschiebung der Domänenwände zwischen den Domänen unterschiedlicher Dimerisierung entsprechen. Auch kommt es zu alternierenden Verzerrungen. Die Spinfreiheitsgrade *nach* der unitären Transformation sind nämlich zusammengesetzt aus den ursprünglichen Spin- und Verzerrungsfreiheitsgraden, so daß eine Dimerisierung, die *nach* der Transformation nur im effektiven magnetischen Modell auftritt, im untransformierten Modell aus magnetischer und elastischer Dimerisierung zusammengesetzt ist.

Wir halten fest, daß zumindest im Grenzfall schneller Phononen ( $g/\omega_0 \ll 1, J/\omega_0 \ll 1$ ) *kein* weichwerdendes Phonon auftritt. Dieses Fazit deckt sich mit dem, das man aus einer *RPA*-Behandlung eines einzelnen Phonons gewinnt [161]. Ein weichwerdendes Phonon scheint damit eher die Ausnahme zu sein als die Regel. Weitere Arbeit an der ausführlichen Beschreibung des Übergangs ist aber notwendig, um die bis jetzt qualitativen Feststellungen zu quantifizieren.

## 5. Zusammenfassung

Die vorliegende Schrift beschäftigt sich mit drei Schwerpunkten: dimerisierten und frustrierten Spinketten und deren Kopplung, inkommensurabler Modulation von Spinketten und nichtadiabatischer Beschreibung von Spin-Phonon-Kopplungen.

Zum ersten Schwerpunkt gehört die Beschreibung der Anregungen einer Spinkette im  $S = 1/2$  Spinonbild. Die Dimerisierung wirkt als attraktives Potential, das im unterkritischen Bereich der Frustration  $\alpha \leq \alpha_c$  wie die Wurzel des Abstands ansteigt und im überkritischen Bereich  $\alpha > \alpha_c$  linear mit dem Abstand wächst. Hieraus und mit den entsprechenden kinetischen Energien, linear beziehungsweise quadratisch im Impuls, ergibt sich der anomale Exponent für die Energielückenabhängigkeit von der Dimerisierung.

Für etwas größere Dimerisierungen kann das Magnonbild verwendet werden, in dem man  $S = 1$  Triplets als die elementaren Anregungen betrachtet. Die schon im Spinonbild auftauchende Möglichkeit gebundener Zustände findet sich auch in der Magnonbeschreibung wieder. Hervorzuheben ist ein zusätzlicher Singulettast und ein weiterer Triplettast in den Dispersionen. Die Bindung eines Spinons an eine Störstelle (fehlender Spin) kann in beiden Bildern verstanden werden. Für die Erweiterung auf höhere Dimensionen eignet sich das Magnonbild besser als das Spinonbild, da letzteres Domänenwände erfordert, die sich in keiner offensichtlichen Art und Weise auf  $d > 1$  verallgemeinern.

Speziell für das niederenergetische Verhalten in einer Dimension gibt es im Kontinuumsbereich elegante feldtheoretische Beschreibungen. Die fermionische Feldtheorie führt auf ein massives Thirringmodell, das exakt lösbar ist, so daß Energieabsenkung durch Dimerisierung, Energielücken und gebundene Zustände genau bekannt sind. Äquivalent kann eine bosonisierte Formulierung verwendet werden, die zum Sinus-Gordon-Modell führt. Diese Beschreibung hat den Vorzug größerer Anschaulichkeit. Mittels semiklassischer Methoden lassen sich wiederum Energieabsenkung, Energielücken und gebundene Zustände berechnen sowie kompliziertere Modulationen.

Somit sind wir beim zweiten Schwerpunkt, der sich mit der inkommensurablen Phase von Spin-Peierls-Systemen befaßt. Es wurde zwischen einer sinusoidalen und einer adaptiven Modulation unterschieden. Die Ordnung des Phasenübergangs von der dimerisierten Phase in die inkommensurable Phase hängt von der Art der Modulation ab. Eine adaptive Modulation ermöglicht einen stetigen Übergang zweiter Ordnung, wenn die elastische Energie dispersionsfrei ist. Sonst ergibt sich jedoch ein Phasenübergang, der (schwach) erster Ordnung ist.

In Übereinstimmung mit dem Experiment induziert die Modulation der Dimerisierung auch von Null verschiedene lokale Magnetisierungen, die am Ort des Nulldurchgangs der Dimerisierung lokalisiert sind. Dies ist die Signatur des lokalisierten Spinons. Die Nullstelle der Modulation und das dort lokalisierte Spinon bilden ein magneto-elastisches Soliton, das bei geringem Magnetfeld die elementare Anregung darstellt. Die inkommensurable Hochfeldphase läßt sich als Solitongitter auffassen. Die Schwingungen dieses Solitongitters sind Phasonen, die in einer Kontinuumsbeschreibung Goldstonebosonen, also masselos, sind. Sie besitzen eine lineare Dispersion für kleine Wellenvektoren und führen zu einem nennenswerten zusätzlichen  $T^3$  Term in der spezifischen Wärme in der inkommensurablen Phase. Die alternierende Komponente der lokalen Magnetisierungen wird durch die Phasonen nennenswert (Faktor 4-6 in  $\text{CuGeO}_3$ ) unterdrückt, was ein wichtiger Hinweis auf nichtadiabatisches Verhalten ist.

Die Form adaptiver Modulation läßt sich im Rahmen eines Sinus-Gordon-Modells be-

rechnen. Es ergeben sich jedoch noch Unterschiede zwischen Experiment und direkter Numerik (DMRG) einerseits und der Kontinuumsbeschreibung andererseits. Noch laufende Untersuchungen deuten auf die Wichtigkeit ortsabhängiger Renormierung hin.

Der dritte Schwerpunkt beschäftigt sich mit nichtadiabatischen Zugängen zu Spin-Phonon-Kopplungen. Für schnelle Phononen bestehen Zweifel, ob eine molekularfeldartige Beschreibung mittels der Phononen am Brillouinzone-Rand allein hinreichend ist. Zugänge über unitäre Transformationen zeigen, daß man für schnelle Phononen ( $g/\omega_0 < 1, J/\omega_0 < 1$ ) ein effektives Spinmodell erhält, in dem ein Teil der Frustration effektiv von den Phononen herrührt und die Kopplungen auch temperaturabhängig sind. Die Spin-Phonon-Kopplung erweist sich dabei als marginal, sofern nur isolierte Ketten betrachtet werden. Wesentlich für den Spin-Peierls-Übergang ist das Kettenensemble. Die Kohärenz der Dimerisierung in der ganzen Probe wird erst durch die elastische Kopplung der Ketten erreicht.

Von besonderem Interesse ist, daß in der nichtadiabatischen Beschreibung schneller Phononen kein Weichwerden der Phononen auftritt, was sich mit der experimentellen Situation deckt. Statt des weichwerdenden Phonons ist ein isingartiger Ordnungs-Unordnungs-Übergang zu erwarten, der durch die Kohärenzterme getrieben wird, die sich aus der elastischen Kettenkopplung ergeben.

Abschließend kann festgestellt werden, daß durch die neuen experimentellen Möglichkeiten der Synthese und Analyse (quasi-)eindimensionaler Substanzen und der großen und auch noch wachsenden Anzahl theoretischer Zugänge zu solchen Systemen ein Gebiet sehr interessanter Physik erschlossen wird.

- 
- [1] M. Hase, I. Terasaki und K. Uchinokura, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651 (1993)
  - [2] J. G. Bednorz und K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986)
  - [3] J. P. Boucher und L. P. Regnault, *J. Phys. I France* **6**, 1939 (1996)
  - [4] N. Tsuda, K. Nasu, A. Yanase und K. Saitori, *Electronic Conduction in Oxides*, Bd. 94 der *Springer Series in Solid-State Sciences* (Springer, Berlin, 1991)
  - [5] N. W. Ashcroft und N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, 1976)
  - [6] F. Gebhard, *The Mott Metal-Insulator Transition*, Bd. 137 der Reihe *Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften* (Springer, Berlin, 1997).
  - [7] A. B. Harris und R. V. Lange, *Phys. Rev.* **157**, 295 (1967)
  - [8] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism, Graduate Texts in Contemporary Physics* (Springer, New York, 1994).
  - [9] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987)
  - [10] S. Liang, B. Douçot und P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 365 (1988)
  - [11] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1 (1991)
  - [12] B. Kleine, G. S. Uhrig und E. Müller-Hartmann, *Europhys. Lett.* **31**, 37 (1995)
  - [13] L. Pitaevskii und S. Stringari, *J. Low Temp. Phys.* **85**, 377 (1991)
  - [14] P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158**, 383 (1967)
  - [15] N. D. Mermin und H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966)
  - [16] D. K. Ghosh, *Phys. Rev. Lett.* **27**, 1584 (1971)
  - [17] G. S. Uhrig, *Phys. Rev. B* **45**, 4738 (1992)
  - [18] P. Lecheminant *et al.*, *Phys. Rev. B* **56**, 2521 (1996)

- [19] C. Waldtmann *et al.*, Eur. Phys. J. B **2**, 501 (1998)
- [20] R. Jullien und F. D. M. Haldane, Bull. Am. Phys. Soc. **28**, 344 (1983)
- [21] K. Okamoto und K. Nomura, Phys. Lett. **A169**, 433 (1992)
- [22] G. Castilla, S. Chakravarty und V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **75**, 1823 (1995)
- [23] S. Eggert, Phys. Rev. B **54**, R9612 (1996)
- [24] C. K. Majumdar und D. K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1388 (1969)
- [25] C. K. Majumdar und D. K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1399 (1969)
- [26] P. M. van den Broek, Phys. Lett. **77A**, 261 (1980)
- [27] H. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931)
- [28] J. des Cloizeaux und M. Gaudin, J. Math. Phys. **7**, 1384 (1966)
- [29] C. N. Yang und C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 321 und 327 (1966)
- [30] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- [31] J. des Cloizeaux und J. J. Pearson, Phys. Rev. **128**, 2131 (1962)
- [32] L. D. Faddeev und L. A. Takhtajan, Phys. Lett. **85A**, 375 (1981)
- [33] A. Klümper, Z. Phys. B **91**, 507 (1993)
- [34] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **47**, 1840 (1981)
- [35] F. D. M. Haldane, J. Phys. **C14**, 2585 (1981)
- [36] A. M. Tsvelik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995)
- [37] J. C. Talstra und S. P. Strong, Phys. Rev. B **56**, 6094 (1997)
- [38] G. Müller, H. Thomas, H. Beck und J. C. Bonner, Phys. Rev. B **24**, 1429 (1981)
- [39] E. Müller-Hartmann und G. S. Uhrig, in Vorbereitung (1999)
- [40] M. Karbach *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 12510 (1997)
- [41] B. S. Shastry und B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **47**, 964 (1981)
- [42] W. J. Caspers, K. M. Emmett und W. Magnus, J. Phys. A: Math. Gen. **88A**, 103 (1982)
- [43] S. Brehmer, A. K. Kolezhuk, H. Mikeska und U. Neugebauer, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 1103 (1998)
- [44] K. Fabricius und U. Löw, Phys. Rev. B **57**, 13371 (1998)
- [45] M. C. Cross und D. S. Fisher, Phys. Rev. B **19**, 402 (1979)
- [46] T. Lorenz *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 5914 (1997)
- [47] U. Ammerahl *et al.*, Z. Phys. B **102**, 71 (1997)
- [48] T. Lorenz *et al.*, Phys. Rev. B **56**, R501 (1997)
- [49] T. Lorenz *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 148 (1998)
- [50] G. Chaboussant *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 3046 (1997)
- [51] N. Elstner und R. R. P. Singh, Phys. Rev. B **58**, 11484 (1998)
- [52] A. W. Garrett *et al.*, Phys. Rev. Lett. **79**, 745 (1997)
- [53] A. V. Prokofiev *et al.*, Eur. Phys. J. B **5**, 313 (1998)
- [54] A. Weiße, G. Bouzerar und H. Fehske, Eur. Phys. J. B **7**, 5 (1999)
- [55] M. Nishi, O. Fujita und J. Akimitsu, Phys. Rev. B **50**, 6508 (1994)
- [56] J. Riera und A. Dobry, Phys. Rev. B **51**, 16098 (1995)
- [57] M. Isobe und Y. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1178 (1996)
- [58] Y. Fujii *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 326 (1997)
- [59] P. Thalmeier und P. Fulde, Europhys. Lett. **44**, 242 (1998)
- [60] H. Smolinski *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 5164 (1998)
- [61] P. Horsch und F. Mack, Eur. Phys. J. B **5**, 367 (1998)
- [62] J. C. Talstra, S. P. Strong und P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **74**, 5256 (1995)

- [63] Z. G. Soos, S. Kuwajima und J. E. Mihalick, Phys. Rev. B **32**, 3124 (1985)
- [64] G. Spronken, B. Fourcade und Y. Lépine, Phys. Rev. B **33**, 1886 (1986)
- [65] R. Chitra *et al.*, Phys. Rev. B **52**, 6581 (1995)
- [66] H. Yokoyama und Y. Saiga, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 3617 (1997)
- [67] G. Bouzerar, A. P. Kampf und F. Schönfeld, cond-mat/9701176 (1997)
- [68] I. Affleck, in *Dynamical Properties of Unconventional Magnetic Systems* (NATO ASI, Geilo, Norway, 1997)
- [69] A. B. Harris, Phys. Rev. B **7**, 3166 (1973)
- [70] B. S. Shastry und B. I. Shraiman, Phys. Rev. Lett. **65**, 1068 (1990)
- [71] P. Jordan und E. Wigner, Z. Phys. **47**, 42 (1928)
- [72] A. Fledderjohann und C. Gros, Europhys. Lett. **37**, 189 (1997)
- [73] H. Bergknoff und H. B. Thacker, Phys. Rev. D **19**, 3666 (1979)
- [74] G. Bouzerar, A. P. Kampf und G. I. Japaridze, Phys. Rev. B **58**, 3117 (1998)
- [75] C. Gros *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 15048 (1997)
- [76] S. Coleman, Phys. Rev. D **11**, 2088 (1975)
- [77] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **5**, 544 (1950)
- [78] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963)
- [79] A. Luther und I. Peschel, Phys. Rev. B **9**, 2911 (1974)
- [80] D. C. Mattis, J. Math. Phys. **15**, 609 (1974)
- [81] R. Heidenreich, R. Seiler und A. Uhlenbrock, J. Stat. Phys. **22**, 27 (1980)
- [82] H. J. Schulz, in *Proceedings of the Adriatico Research Conference Physics of Strongly Correlated Systems* (1990)
- [83] H. Schulz, in *Proceedings of Les Houches Summer School LXI*, Herausgeber E. Akkermans, G. Montambaux, J. Pichard und J. Zinn-Justin (Elsevier, Amsterdam, 1995), Bd. 61, S. 533
- [84] J. Voit, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995)
- [85] T. Nakano und H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **50**, 2489 (1981)
- [86] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. B **25**, 4925 (1982)
- [87] J. Zang, S. Chakravarty und A. R. Bishop, Phys. Rev. B **55**, R14705 (1997)
- [88] J. Zang, A. R. Bishop und D. Schmeltzer, Phys. Rev. B **52**, 6723 (1995)
- [89] J. Zang, A. R. Bishop und D. Schmeltzer, Phys. Rev. B **54**, 9556 (1995)
- [90] I. Affleck, in *Fields, Strings and Critical Phenomena* (Elsevier, North-Holland, Amsterdam, 1990), S. 566.
- [91] S. R. White und I. Affleck, Phys. Rev. B **54**, 9862 (1996)
- [92] R. Chitra und T. Giamarchi, Phys. Rev. B **55**, 5861 (1997)
- [93] T. Nakano und H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **49**, 1679 (1980)
- [94] R. F. Dashen, B. Hasslacher und A. Neveu, Phys. Rev. D **10**, 4114 (1974)
- [95] R. F. Dashen, B. Hasslacher und A. Neveu, Phys. Rev. D **10**, 4130 (1974)
- [96] R. F. Dashen, B. Hasslacher und A. Neveu, Phys. Rev. D **10**, 4138 (1974)
- [97] R. F. Dashen, B. Hasslacher und A. Neveu, Phys. Rev. D **11**, 3424 (1975)
- [98] H. J. Schulz, Phys. Rev. Lett. **77**, 2790 (1996)
- [99] F. H. L. Essler, A. M. Tsvelik und G. Delfino, Phys. Rev. B **56**, 11001 (1998)
- [100] K. Fabricius *et al.*, Phys. Rev. B **57**, 1102 (1998)
- [101] F. J. Wegner, Ann. Physik **3**, 77 (1994)
- [102] J. Stein, J. Stat. Phys. **88**, 487 (1997)
- [103] C. Knetter und G. S. Uhrig, in Vorbereitung (1999)
- [104] B. S. Shastry und B. Sutherland, Physica **108B**, 1069 (1981)
- [105] S. Miyahara und K. Ueda, cond-mat/9807075 (1998)

- [106] M. Hase *et al.*, Phys. Rev. Lett. **71**, 4059 (1993)
- [107] J. G. Lussier, S. M. Coad, D. F. McMorrow und D. M. Paul, J. Phys.: Condens. Matter **7**, L325 (1995)
- [108] S. B. Oseroff *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 1450 (1995)
- [109] S. Coad, J.-G. Lussier, D. F. McMorrow und D. M. Paul, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 6251 (1996)
- [110] Y. Ajiro *et al.*, Phys. Rev. B **51**, 9399 (1995)
- [111] J. P. Renard *et al.*, Europhys. Lett. **30**, 475 (1995)
- [112] M. Weiden *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 15067 (1997)
- [113] B. Grenier *et al.*, Phys. Rev. B **57**, 3444 (1998)
- [114] B. Grenier *et al.*, Vorabdruck Universität Paris-Sud (1998)
- [115] G. B. Martins, E. Dagotto und J. A. Riera, Phys. Rev. B **54**, 16032 (1996)
- [116] G. B. Martins, M. Laukamp, E. Dagotto und J. A. Riera, Phys. Rev. Lett. **78**, 3563 (1997)
- [117] M. Laukamp *et al.*, Phys. Rev. B **57**, 10755 (1998)
- [118] P. Hansen, D. Augier, J. Riera und D. Poilblanc, cond-mat/9805325 (1998)
- [119] D. Augier *et al.*, condmat/9807265 (1998)
- [120] S. Eggert und I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **75**, 934 (1995)
- [121] T.-K. Ng, Phys. Rev. B **50**, 555 (1994)
- [122] M. Braden *et al.*, Phys. Rev. B **54**, 1105 (1996)
- [123] M. Braden *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 3634 (1998)
- [124] R. Werner, C. Gros und M. Braden, cond-mat/9810038 (1998)
- [125] A. K. Hassan *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 1984 (1998)
- [126] T. Sekine *et al.*, J. Mag. Mag. Mat. **177-181**, 692 (1998)
- [127] T. Sekine *et al.*, J. Mag. Mag. Mat. **177-181**, 692 (1998)
- [128] V. N. Muthukumar *et al.*, Phys. Rev. B **54**, R9635 (1996)
- [129] G. Els *et al.*, in Vorbereitung (1999)
- [130] D. Khomskii, W. Geertsma und M. Mostovoy, Czech. Journ. of Physics **46**, 3239 (1996)
- [131] H. Fukuyama, T. Tanimoto und M. Saito, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1182 (1996)
- [132] M. Fabrizio und R. Mélin, Phys. Rev. Lett. **78**, 3382 (1997)
- [133] M. Fabrizio und R. Mélin, Phys. Rev. B **56**, 5996 (1997)
- [134] V. Kiryukhin und B. Keimer, Phys. Rev. B **52**, 704 (1995)
- [135] V. Kiryukhin, B. Keimer, J. P. Hill und A. Vigliante, Phys. Rev. Lett. **76**, 4608 (1996)
- [136] V. Kiryukhin *et al.*, Phys. Rev. B **54**, 7269 (1996)
- [137] Y. Fagot-Revurat *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 1861 (1996)
- [138] Y. Fagot-Revurat *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 2964 (1997)
- [139] M. Horvatić *et al.*, Physica **B246-247**, 22 (1998)
- [140] M. Horvatić *et al.*, Vorabdruck Grenoble (1998)
- [141] M. Fujita und K. Machida, J. Phys. **C21**, 5813 (1988)
- [142] A. E. Feiguin, J. A. Riera, A. Dobry und H. A. Ceccatto, Phys. Rev. B **56**, 14607 (1997)
- [143] D. Förster, Y. Meurdesoif und B. Malet, cond-mat/9802245 (1998)
- [144] W. Palme *et al.*, J. Appl. Phys. **79**, 5384 (1996)
- [145] G. S. Uhrig, F. Schönfeld, J. Boucher und M. Horvatić, in Vorbereitung (1999)
- [146] S. A. Brazovskii, Sov. Phys. JETP **51**, 342 (1980)
- [147] S. A. Brazovskii, S. A. Gordyunin und N. N. Kirova, JETP Lett. **31**, 456 (1980)
- [148] J. Mertsching und H. J. Fischbeck, Phys. Stat. Sol. (b) **103**, 783 (1981)
- [149] B. Horovitz, Phys. Rev. B **35**, 734 (1987)
- [150] A. I. Buzdin und V. V. Tugushev, Sov. Phys. JETP **58**, 428 (1983)



- [151] M. Fujita und K. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 4395 (1984)
- [152] B. Horowitz, Phys. Rev. Lett. **46**, 742 (1981)
- [153] A. I. Buzdin, M. L. Kulić und V. V. Tugushev, Solid State Commun. **48**, 483 (1983)
- [154] M. C. Cross, Phys. Rev. B **20**, 4606 (1979)
- [155] S. M. Bhattacharjee, T. Nattermann und C. Ronnewinkel, Phys. Rev. B **58**, 2658 (1998)
- [156] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publisher, New York, 1964)
- [157] G. S. Uhrig, in Vorbereitung (1999)
- [158] T. Lorenz, U. Ammerahl, R. Ziemes und B. Büchner, Phys. Rev. B **54**, R15610 (1996)
- [159] G. S. Uhrig, F. Schönfeld und J. Boucher, Europhys. Lett. **41**, 431 (1998)
- [160] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics -2nd ed.* (Plenum Press, New York, 1990).
- [161] C. Gros und R. Werner, Phys. Rev. B **58**, R14677 (1998)
- [162] A. Klümper, R. Raupach und F. Schönfeld, cond-mat/9809224 (1998)
- [163] G. Baym und L. P. Kadanoff, Phys. Rev. **124**, 287 (1961)
- [164] G. Baym, Phys. Rev. **127**, 1391 (1962)
- [165] J. W. Bray, L. V. Interrante, I. C. Jacobs und J. C. Bonner, in *Extended Linear Chain Compounds*, Herausgeber J. S. Miller (Plenum Press, New York, 1983), Bd. 3, S. 353
- [166] L. G. Caron und S. Moukouri, Phys. Rev. Lett. **76**, 4050 (1996)
- [167] E. Pytte, Phys. Rev. B **10**, 2039 (1974)
- [168] U. Brandt und H. Leschke, Z. Phys. **271**, 295 (1974)
- [169] W. Brenig, persönliche Mitteilung (1998)
- [170] H. Fröhlich, Phys. Roy. Soc. Lond. **A215**, 291 (1952)
- [171] S. K. Kehrein und A. Mielke, Ann. of Phys. **252**, 1 (1996)
- [172] S. D. Glazek und K. G. Wilson, Phys. Rev. D **48**, 5863 (1993)
- [173] S. D. Glazek und K. G. Wilson, Phys. Rev. D **49**, 4214 (1994)
- [174] P. Lenz und F. Wegner, Nucl. Phys. B **482**, 693 (1996)
- [175] A. W. Sandvik, R. R. P. Singh und D. K. Campbell, Phys. Rev. B **56**, 14510 (1997)
- [176] D. Augier, D. Poilblanc, E. Sørensen und I. Affleck, Phys. Rev. B **58**, 9110 (1998)
- [177] M. Ain *et al.*, Phys. Rev. Lett. **78**, 1560 (1997)
- [178] M. Arai *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3649 (1996)
- [179] M. Braden *et al.*, Phys. Rev. B **57**, 11497 (1998)
- [180] M. Mostovoy und D. Khomskii, Z. Phys. B **103**, 209 (1997)