Grundzustandseigenschaften zweidimensionaler, dimerisierter Heisenbergmodelle

Diplomarbeit

vorgelegt von

Jesko Sirker

Institut für Theoretische Physik

Universität zu
Köln

Juni 2000

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Spinsysteme stellen seit vielen Jahren wegen der Vielzahl der an ihnen beobachteten Phänomene ein interessantes Gebiet sowohl theoretischer als auch experimenteller Forschung dar. Dies gilt vor allem für ein- und zweidimensionale Systeme, da deren Verhalten wesentlich durch Quantenfluktuationen bestimmt wird. Die Untersuchung solcher niedrigdimensionaler Systeme ist vor allem deshalb so fruchtbar, weil es sich bei ihnen nicht nur um theoretische Modelle handelt, sondern mittlerweile eine große Anzahl von realen Substanzen bekannt ist, die tatsächlich quasi ein- bzw. zweidimensionales Verhalten zeigen. Ein wichtiges Beispiel für eindimensionales Verhalten stellt die anorganische Verbindung $CuGeO_3$ dar. Bekannt wurde diese Substanz vor allem, weil an ihr ein Spin-Peierls Übergang [1], d.h. eine selbsttätige Verzerrung des zugrundeliegenden Gitters aufgrund der Spin-Phonon Kopplung, beobachtet wurde. Auch quasi zweidimensionale Substanzen sind schon lange bekannt, so z.B. die Substanz La_2CuO_4, die ein $s = 1/2$ - Antiferromagnet ist, oder La_2NiO_4, was ebenfalls antiferromagnetisch, aber mit $s = 1$ ist. Besonders groß ist das Interesse an diesen Verbindungen seit einige sehr ähnliche Kuprate bekannt sind, die Hochtemperatursupraleitung zeigen [2].

Das generische Modell, um die bei einem Isolator verbleibenden magnetischen Freiheitsgrade des elektronischen Systems zu beschreiben, ist das *Heisenbergmodell*. In einer Dimension ist dieses Modell für den Fall $s = 1/2$ durch den Betheansatz exakt lösbar [3] und kann außerdem durch die Jordan-Wigner Transformation [4] auf ein System wechselwirkender, spinloser Fermionen abgebildet werden. Es zeigt sich, daß das s=1/2-Modell für $T = 0$ kritisch ist, also algebraisch zerfallende Korrelationsfunktionen aufweist. Da die Untersuchung kritischer Systeme störungstheoretisch nicht möglich ist, werden andere Methoden wie z.B. die Renormierungsgruppe benötigt. Obwohl durch solche Ansätze das Wissen über kritische Phänomene gewachsen ist, gibt es immer noch viele offene Fragen, die dazu führen, daß kritische Systeme und damit auch das Heisenbergmodell immer noch ein aktuelles Thema darstellen. Ein anderer Aspekt, der das eindimensionale Heisenbergmodell interessant macht, ist seine Instabilität gegenüber einem strukturellen Übergang (Spin-Peierls Übergang). Dies bedeutet, daß das Modell bei Berücksichtigung der Spin-Phonon Kopplung nicht mehr kritisch ist, sondern ein Gap im Anregungsspektrum und einen dimerisierten Grundzustand aufweist. Eine weitere interessante Eigenschaft des Heisenbergmodells in einer Dimension ist die als *Haldanes conjecture* bekanntgewordene Vermutung [5], daß dieses für halbzahligen Spin kritisch ist, während es für ganzzahligen Spin ein massives Spektrum gibt.

Seit Anderson [6] die oben angesprochenen hochtemperatursupraleitenden Kuprate als zweidimensionale, dotierte Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnete beschrieben hat, ist das Interesse am antiferromagnetischen Heisenbergmodell in zwei Dimensionen wieder neu erwacht. Über dieses ist aber wesentlich weniger bekannt als für den Fall einer Dimension. So gibt es z.B. auch für $s = 1/2$ - anders als in einer Dimension - keine exakte Lösung. Desweiteren weiß man wegen des Mermin-Wagner Theorems zwar, daß es keine langreichweitige Ordnung für $T \neq 0$ in ein und zwei Dimensionen geben kann, für $T = 0$ ist eine solche Ordnung in zwei Dimensionen aber möglich. Dyson, Lieb und Simon [7] bewiesen ein Theorem, das zeigt, daß für $s \geq 1$ der Grundzustand tatsächlich langreichweitige Néelordnung aufweist. Für $s = 1/2$ gibt es dagegen immer noch keinen Beweis, ob der Grundzustand ebenfalls langreichweitig geordnet ist oder nicht. Die von Anderson [8] erstmals auf dieses Modell angewendete *lineare Spinwellentheorie* ergibt einen néelgeordneten Grundzustand, bei dem die Untergittermagnetisierung allerdings aufgrund von Quantenfluktuationen um fast 50% gegenüber dem klassischen Wert reduziert ist. Dieses Resultat ist auch durch eine Vielzahl numerischer Ergebnisse [9, 10] gestützt worden und wird mittlerweile allgemein akzeptiert. Um den geordneten Grundzustand zu zerstören, sind also zusätzliche Störungen in das Modell einzubauen. Dabei werden häufig frustrierte oder dimerisierte Kopplungen betrachtet. Man ist dann vor allem an dem Phasenübergang zwischen geordnetem und ungeordnetem Grundzustand in Abhängigkeit von den Parametern der Störung interessiert. Auch solche Systeme stellen nicht nur interessante theoretische Modelle dar, sondern finden ihre Realisierung in verschiedensten experimentell untersuchten Substanzen. Als ein Beispiel soll hier das CaV_4O_9 angeführt werden, dessen stark gekoppelte Spins Plaketten bilden.

Thema dieser Arbeit sollen die Grundzustandseigenschaften des antiferromagnetischen Spin-1/2 Heisenbergmodells mit nächster Nachbarkopplung auf dem Quadratgitter und einer zusätzlichen Dimerisierung sein. Dimerisierung bedeutet dabei nichts Anderes als eine wie auch immer gegebene Modulation der Kopplungsstärke. Eine Möglichkeit besteht dann darin, die starken und schwachen Bonds so anzuordnen, daß das Modell im Limes starker Dimerisierung in ungekoppelte Spinketten zerfällt. Dies bedeutet, daß solche Modelle geeignet sind, den Übergang von zwei- zu eindimensionalem Verhalten, was ja, wie oben angedeutet, sehr unterschiedlich ist, zu untersuchen. Ein Teil der Arbeit wird sich genau mit diesem Übergang beschäftigen. Ein anderer sehr wichtiger Aspekt, der bei allen dimerisierten Modellen auftritt, ist der Phasenübergang zwischen geordnetem und ungeordnetem Grundzustand. Da die in dieser Arbeit betrachteten Modelle für maximale Dimerisierung alle in Unterstrukturen (Ketten oder Plaketten) zerfallen, ist offensichtlich, daß spätestens an diesem

Punkt die langreichweitige Ordnung verschwinden muß. Ob dies nur ein singulärer Punkt ist oder ob die Néelordnung schon früher verschwindet, ist vom betrachteten Modell abhängig und im Einzelnen zu untersuchen. Dazu werden in dieser Arbeit zwei analytische Methoden verwendet. Dies ist zum einen die Abbildung des Heisenbergmodells auf ein nichtlineares Sigma-Modell (nlσ-Modell) mit anschließender Renormierungsgruppe und zum anderen die lineare Spinwellentheorie. Zusätzlich zu den bisher angesprochenen beiden Punkten wird auch die Frage untersucht werden, unter welchen Bedingungen es zu einer eigenständigen Verzerrung des Gitters, also einem Spin-Peierls Übergang, kommt. Dazu wird anhand der in linearer Spinwellentheorie gewonnen Grundzustandsenergie für das jeweilige Modell der Gewinn an magnetischer Energie mit den Kosten an elastischer Energie verglichen werden. Als ein Ergebnis läßt sich daran auch ablesen, welche Form der Verzerrung energetisch begünstigt ist.

In dem nachfolgenden Kapitel soll kurz auf die Zusammenhänge zwischen Magnetismus und Spinhamiltonians eingegangen werden. Hier soll auch in Erinnerung gerufen werden, daß es die Coulomb-Wechselwirkung ist, die effektiv zu einer Wechselwirkung zwischen den Spins führt. Dies ist für die Stärke der Wechselwirkung und damit auch für die beobachtbaren Phänomene von entscheidender Bedeutung. Danach werden das einfache Heisenbergmodell ohne zusätzliche Kopplungen und die schon bekannten Ergebnisse für ein und zwei Dimensionen vorgestellt. Hier geht es vor allem darum, die Grundlagen zu schaffen, auf die bei der Untersuchung der dimerisierten Modelle immer wieder zurückgegriffen wird.

In Kapitel 4 werden dann die vier in dieser Arbeit näher untersuchten Modelle vorgestellt. Als erste Fragestellung wird dann der Übergang von zwei zu einer Dimension anhand einfacher Skalenargumente untersucht. Zusätzlich werden hier für ein Modell auch numerische Daten aus einer Dichtematrixrenormierungsgruppe (DMRG) verwendet. Um das Problem des Phasenübergangs zwischen geordneter und ungeordneter Phase anzugehen, werden in Kapitel 7 alle Modelle in geeigneter Weise auf ein nlσ-Modell abgebildet, und dieses wird mit Hilfe der Renormierungsgruppe (RG) untersucht. Dabei ergibt sich ein recht universelles Bild, was aber nicht völlig zufriedenstellend ist, da die Größen der kritischen Kopplungen, wie für die RG charakteristisch, unbestimmt bleiben. Das führt uns dazu, auch lineare Spinwellentheorie (LSWT) auf diese Modelle anzuwenden. Obwohl diese Methode schon sehr alt ist und der Ansatz eigentlich recht primitiv, sind die quantitativen Ergebnisse für das zweidimensionale, isotrope Modell erstaunlich gut. Dies gibt uns die Hoffnung, daß man auch den Resultaten für die dimerisierten Modelle wenigstens teilweise vertrauen kann. [1] Hierzu bleibt auch festzustellen, daß es bisher trotz der schon lange bekannten Mängel der LSWT einfach keine bessere analytische Methode gibt, um für die uns interessierenden Größen auch quantitative Ergebnisse zu erhalten. Mit Hilfe des in LSWT gewonnen Ausdrucks für die Grundzustandsenergie des Systems ist es dann auch möglich, eine Bedingung für den strukturellen Phasenübergang anzugeben.

[1] Wenigstens für sehr kleine Dimerisierungen sollte LSWT brauchbare Resultate liefern.

Da in den vorangegangenen Kapiteln jedes Modell einzeln mit den angesprochenen Methoden untersucht wurde, sollen die Ergebnisse im letzten Kapitel noch einmal zusammengefaßt, in Zusammenhang gebracht und diskutiert werden. Außerdem soll ein kleiner Ausblick auf noch offene Fragestellungen und Möglichkeiten, diese zu behandeln, gegeben werden.

Kapitel 2

Magnetische Wechselwirkungen und Spinhamiltonians

Verantwortlich für die magnetischen Eigenschaften eines Festkörpers sind die vorhandenen oder induzierten *magnetischen Momente* $\boldsymbol{\mu}$. Bei einem freien Atom wird das magnetische Moment verursacht durch den Spin des Elektrons und seinen Bahndrehimpuls bezüglich des Kerns. Unabdingbar für ein Verständnis des Magnetismus ist deshalb die Quantenmechanik. Da das *Kernmagneton* $\boldsymbol{\mu}_K = \frac{e\hbar}{2m_p c}$ um das Verhältnis $\frac{m_e}{m_p} = \frac{1}{1836}$ kleiner ist als das *Bohrsche Magneton* $\boldsymbol{\mu}_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$, sind die Kernmomente meist zu vernachlässigen.

Durch ein von außen angelegtes magnetisches Feld kann - auch bei Atomen ohne vorhandene Momente - ein magnetisches Moment induziert werden. Dieses Moment resultiert aus einem Effekt, den man als Versuch der Elektronen, das Magnetfeld abzuschirmen, auffassen kann. Es wirkt dem Magnetfeld entgegen (*Diamagnetismus*). Die *magnetische Suszeptibilität* ergibt sich aus dem quantenmechanischen Hamiltonian in erster Ordnung Störungstheorie zu

$$\chi = -\frac{1}{V}\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = -\frac{N}{V}\frac{e^2}{6mc^2} < 0|\sum_i r_i^2|0 >$$

und ist deshalb für den Diamagnetismus negativ.

Enthält ein Festkörper Atome mit nichtverschwindenden magnetischen Momenten, so führt ein äußeres Magnetfeld zur Aufspaltung der Energieniveaus. Die unterschiedlich starke Besetzung dieser Niveaus im thermodynamischen Gleichgewicht führt dann zu einer *Magnetisierung* des Festkörpers im äußeren Feld (*Paramagnetismus*). Die magnetische Suszeptibilität ist dabei positiv und gehorcht näherungsweise dem Curieschen Gesetz $\chi = \frac{C}{T}$, wobei C eine vom Festkörper abhängige Konstante ist.

Manche Festkörper zeigen aber auch ohne äußeres magnetisches Feld unterhalb einer *kritischen Temperatur* T_c eine Magnetisierung. Diese bezeichnet man als *spontane Magnetisierung* und den Festkörper als *Ferromagneten.* Damit eine solche spontane Magnetisierung entsteht, müssen die einzelnen magnetischen Momente der Atome eine Ordnung aufweisen. Da dies ohne äußeres Feld geschieht, muß die Ursache für die Ordnung eine Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten sein. Ein Beispiel für eine solche ferromagnetische Ordnung ist in Abb. (2.1) dargestellt.[1]

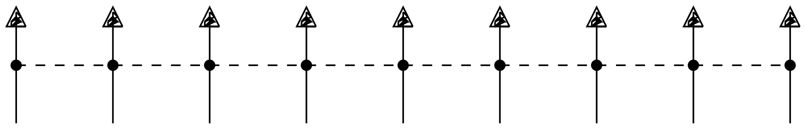

Abbildung 2.1: Einfache ferromagnetische Ordnung in einer Dimension

Dieser Ordnung entgegen wirken thermische Fluktuationen, die oberhalb von T_c so stark sind, daß die Magnetisierung zerstört wird. Beim *Antiferromagneten* gibt es zwar keine spontane Magnetisierung, dennoch sind die magnetischen Momente geordnet, und zwar so, daß sich kein resultierendes Gesamtmoment ergibt. Das einfachste Beispiel für eine solche antiferromagnetische Ordnung ist der sog. *Néelzustand*, der in Abb. (2.2) dargestellt ist.

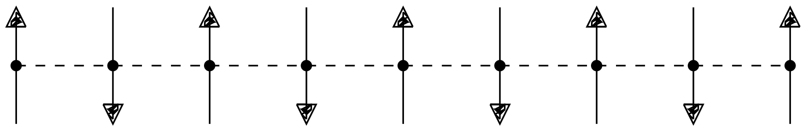

Abbildung 2.2: Néelzustand in einer Dimension

Erkennbar ist ein solcher Antiferromagnet durch Neutronenstreuung, die aufgrund der Wechselwirkung des magnetischen Moments des Neutrons mit den magnetischen Momenten im Festkörper auch Aussagen über die magnetische Struktur von Festkörpern erlaubt.

Um ein solches magnetisches System beschreiben zu können, muß man die Art der Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten kennen. Eine einfache Abschätzung zeigt, daß es sich dabei nicht um eine direkte Kopplung der magnetischen Dipole handeln kann. Falls man die Richtungsabhängigkeit außer acht läßt, so ergibt sich für zwei magnetische Momente $\boldsymbol{\mu}_1$, $\boldsymbol{\mu}_2$ eine Wechselwirkungsenergie von:

$$U = \frac{\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2}{r^3}$$

Mit $\boldsymbol{\mu}_1 \approx \boldsymbol{\mu}_2 \approx g\mu_B$ und einem typischen Abstand im Festkörper von $r \approx 2 \cdot 10^{-10} m$ ergibt sich eine Wechselwirkungsenergie von nicht mehr als $10^{-4} eV$ für die magnetische Dipolkopplung. Manche Ferromagneten wie z.B. Eisen weisen aber eine kritische Temperatur von $T_c > 1000K$ auf! Die thermischen Fluktuationen haben hierbei Energien von $E_{therm} \propto k_B T_c \approx 10^{-1} eV$. D.h., die

[1] Diese und die folgende Abbildung zeigen einfache Vorstellungen magnetischer Ordnung. Vor allem in einer Dimension entsprechen sie aber nicht der Realität.

typischen Energien der Dipol-Dipol Kopplung sind um den Faktor 10^3 zu klein, um diese hohen kritischen Temperaturen erklären zu können.

Tatsächlich ist der wesentliche Beitrag zur Wechselwirkung der magnetischen Momente ein Resultat des *Pauli-Prinzips*. Warum das Pauli-Prinzip zu einer Wechselwirkung der magnetischen Momente führt, wird schon am einfachsten Beispiel, dem Zweielektronensystem, deutlich [11]. Dieses System besteht aus zwei Kernen, die bei R_1 und R_2 fixiert seien, und zwei Elektronen, deren Ortsvektoren durch r_1 und r_2 gegeben seien. In gewissem Sinne stellt es den "einfachsten Festkörper" mit $N = 2$ dar.

Beschrieben werde das Zweielektronensystem durch einen spinunabhängigen Hamiltonian der Form:

$$\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}_1^2 + \boldsymbol{p}_2^2)\Psi + V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\Psi = E\Psi \tag{2.1}$$

Hierbei beschreibt das Potential die Coulombwechselwirkungen der Elektronen mit den Kernen und untereinander. Die Wellenfunktion separiert dann in einen Orbitalanteil Φ und einen Spinanteil χ:

$$\Psi = \Phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\chi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$$

Da Ψ als Fermionenwellenfunktion antisymmetrisch sein muß, gibt es zwei Möglichkeiten:

$$\Psi_1 = \Phi_s \chi_{as}$$

$$\Psi_2 = \Phi_{as} \chi_s$$

Der Spinanteil läßt sich aber leicht angeben. Es gibt nämlich nur folgende 4 Spinzustände:

Zustand	S	Multiplett
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\mid\uparrow\downarrow> - \mid\downarrow\uparrow>)$	0	Singulett
$\mid\uparrow\uparrow>$	1	Triplett
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\mid\uparrow\downarrow> + \mid\downarrow\uparrow>)$	1	Triplett
$\mid\downarrow\downarrow>$	1	Triplett

Wie leicht zu sehen, ist der Singulettzustand antisymmetrisch, während die Triplettzustände symmetrisch sind. Da der Grundzustand des nur von der Orbitalwellenfunktion abhängigen Hamiltonoperators (2.1) aber symmetrisch ist, ist die Energie des Singulettzustands E_S kleiner als die des Triplettzustands E_T. D.h., die rein elektrostatischen und spinunabhängigen Wechselwirkungen des Hamiltonians führen effektiv zu einer Wechselwirkung der Spins untereinander. Da diese effektive Wechselwirkung ein Resultat der elektrostatischen Coulombwechselwirkung ist, liegt die zugehörige Energie im richtigen Größenbereich von Bruchteilen eines Elektronenvolts.

Man kann nun einen effektiven Hamiltonian konstruieren, der für einen Zustand mit $S = 0$ die Energie E_S liefert und für einen Zustand mit $S = 1$ die Energie E_T. Im Falle des Zweielektronensystems gilt nämlich:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S}_i^2 &= \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) = \frac{3}{4} \\ \boldsymbol{S}^2 &= (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2 = \frac{3}{2} + 2\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{S}_2 = S(S+1) \end{aligned} \tag{2.2}$$

Daraus folgt, daß $\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$ den Eigenwert $-\frac{3}{4}$ für $S = 0$ und $\frac{1}{4}$ für $S = 1$ hat. Der effektive Spinhamiltonian für das Zweielektronensystem lautet dann:

$$H = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - (E_S - E_T)\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{S}_2$$

Ohne den ersten Term, der nur ein konstanter Energieshift ist, und mit der Definition $J = E_T - E_S$ erhält man:

$$H = J\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 \tag{2.3}$$

Wie schon vorher bemerkt, kann man das Zweielektronensystem als Festkörper mit $N = 2$ ansehen. Eine einfache Verallgemeinerung des obigen Hamiltonians für größere N lautet dann:

$$H = J \sum_{<i,j>} \boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_j \tag{2.4}$$

Hierbei laufe die Summe über nächste Nachbarplätze. Obiges Modell bezeichnet man als *Heisenbergmodell.* Klar ist, daß die Spinkopplungen nicht a priori die einfache Form des Heisenbergmodells haben müssen. Falls $s > \frac{1}{2}$ können auch Kopplungen der Form $(\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_j)^2$ und weitere Potenzen auftreten. Wann man für einen Festkörper die einfache Form des Heisenbergmodells rechtfertigen kann, ist meist schwierig zu entscheiden. Trotzdem ist das Heisenbergmodell für sich genommen ein interessantes Spinmodell, das sich trotz seiner scheinbaren Einfachheit im antiferromagnetischen Fall mit Ausnahme einer Raumdimension nicht mehr exakt lösen läßt.

Kapitel 3

Das Heisenbergmodell

Der vorherige Abschnitt hat anhand des Zweielektronensystems gezeigt, wie durch das Pauli-Prinzip für ein System mit einem Hamiltonian, der nur Coulombwechselwirkungen enthält, effektiv eine Wechselwirkung der Spins untereinander induziert wird. Diese Überlegungen lassen sich auch auf Systeme mit vielen Elektronen übertragen. Ausgangspunkt dabei ist meistens das *Hubbard-Modell* [13]. Da es sich bei diesen Systemen um Festkörper handeln soll, ist als Grundstruktur ein wie auch immer geartetes Gitter gegeben. Die Bandelektronen können sich nun in diesem Modell mit einer Hüpfamplitude t von Gitterplatz zu Gitterplatz bewegen. Die einzige Wechselwirkung, die dabei berücksichtigt wird, ist die repulsive Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen. D.h., es werden keine Phononen und keine attraktiven Wechselwirkungen in diesem Modell mitbetrachtet. In diesem Sinne ist das Hubbard-Modell das einfachste Modell für ein stark korreliertes Elektronensystem. Geht man weiterhin davon aus, daß es ausreichend ist, nur ein Band zu berücksichtigen, daß das Hüpfen auf nächste Nachbarplätze beschränkt sein soll und daß die Coulomb-Wechselwirkung so abgeschirmt ist, daß im wesentlichen nur eine repulsive Wechselwirkung zwischen Elektronen am gleichen Platz übrigbleibt, so erhält man in zweiter Quantisierung folgenden Hamiltonian für das *Einband-Hubbard-Modell*:

$$H = -t \sum_{\substack{<\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'> \\ \sigma=\uparrow,\downarrow}} \{c_\sigma^+(\boldsymbol{r})c_\sigma(\boldsymbol{r}') + c_\sigma^+(\boldsymbol{r}')c_\sigma(\boldsymbol{r})\} + U \sum_{\boldsymbol{r}} n_\uparrow(\boldsymbol{r})n_\downarrow(\boldsymbol{r}) \tag{3.1}$$

Dabei erzeugt der Operator $c_\sigma^+(\boldsymbol{r})$ ein Elektron an der Stelle $\boldsymbol{r}$, während $c_\sigma(\boldsymbol{r})$ ein Elektron an der Stelle $\boldsymbol{r}$ vernichtet. $n_\sigma(\boldsymbol{r}) = c_\sigma^+(\boldsymbol{r})c_\sigma(\boldsymbol{r})$ ist der Besetzungszahloperator, für den nach dem Pauli-Prinzip an jedem Platz $n_\sigma(\boldsymbol{r}) = 0,1$ gilt. D.h., falls N Plätze vorhanden sind, so können sich maximal 2N Elektronen im System befinden. Der erste Teil beschreibt somit das Hüpfen der Elektronen, während der zweite Teil die Energie erhöht, falls sich zwei Elektronen am gleichen Ort aufhalten, also eine repulsive Wechselwirkung beschreibt.

Einfache Umformungen und Abziehen eines konstanten Energieshifts führen den Hamiltonian (3.1) über in:

$$H = -t \sum_{\substack{<\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'> \\ \sigma=\uparrow,\downarrow}} \{c_\sigma^+(\boldsymbol{r})c_\sigma(\boldsymbol{r}') + c_\sigma^+(\boldsymbol{r}')c_\sigma(\boldsymbol{r})\} - \frac{2U}{3}\sum_{\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}))^2 \qquad (3.2)$$

Dabei ist $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{2}c_\sigma^+(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'}c_{\sigma'}(\boldsymbol{r})$ und $\boldsymbol{\tau}$ sind die drei Pauli-Matrizen.

Auf das *Heisenbergmodell* wird man nun geführt, wenn man das halbgefüllte System im Limes starker Kopplung U betrachtet. Eine einfache störungstheoretische Entwicklung nach Potenzen von $\frac{t}{U}$, also im Limes verschwindenden Hüpfens, liefert dann nämlich in erster Ordnung gerade den Hamiltonian des antiferromagnetischen Heisenbergmodells:

$$H = \frac{2t^2}{|U|}\sum_{<\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'>} \boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}') \qquad (3.3)$$

In den folgenden Abschnitten soll nun kurz auf schon bekannte Eigenschaften des Heisenbergmodells in ein und zwei Raumdimensionen mit und ohne Dimerisierung eingegangen werden. **Hierbei soll Dimerisierung eine beliebige gegebene Modulation der Kopplungsstärke J zwischen den Spins bezeichnen.**

3.1 Die Spinkette ohne Dimerisierung

Wir wollen hier direkt eine Verallgemeinerung der Heisenbergkette betrachten. Diese soll in einer zusätzlichen Anisotropie in z-Richtung bestehen und werde wie üblich durch λ parametrisiert. Das so entstandene Modell wird als *XXZ-Modell* bezeichnet. Im Folgenden wollen wir uns ausschließlich mit dem *antiferromagnetischen Fall* beschäftigen, der durch $J > 0$ charakterisiert ist.
Der Hamiltonian des XXZ-Modells kann nun mit Hilfe der Auf- und Absteigeoperatoren $S^+ = S_x + iS_y$, $S^- = S_x - iS_y$ wie folgt geschrieben werden:

$$H = J\sum_i \left\{\frac{1}{2}\left[S^+(i)S^-(i+1) + (S^-(i)S^+(i+1)\right] + \lambda S_z(i)S_z(i+1)\right\} \qquad (3.4)$$

Für $\lambda = 1$ stimmt dies mit dem isotropen Heisenbergmodell von (2.4) überein. Ist $s = 1/2$, so ist (3.4) mit Hilfe des Bethe-Ansatzes [3] exakt lösbar. D.h., sowohl die Eigenwerte als auch die Eigenfunktionen können exakt bestimmt werden. Leider sind die exakten Eigenfunktionen so kompliziert, daß sie zur Berechnung von Korrelationsfunktionen nutzlos sind. Mittels Jordan-Wigner Transformation [4] kann das Modell aber auf ein System spinloser, wechselwirkender Fermionen abgebildet werden, wobei die Kopplungsstärke dem Anisotropieparameter λ entspricht. Das Modell ist also besonders einfach für $\lambda = 0$, da man dann freie Fermionen erhält. Das ursprüngliche Modell wird in diesem

Grenzfall konsequenterweise als *XY-Modell* bezeichnet. Die Dichteoperatoren in dieser fermionischen Darstellung genügen bosonischen Vertauschungsregeln, und es ist möglich, den Hamiltonian in diesen bosonischen Dichteoperatoren auszudrücken. Dieser Vorgang wird *Bosonisierung* genannt und wurde für das XXZ-Modell zum ersten Mal von Luther und Peschel [14] durchgeführt. Luther und Peschel nutzten diese Bosonisierung, verbunden mit einem kritischen Exponenten, der aus dem Betheansatz bekannt war, um die Korrelationsfunktionen exakt zu berechnen. Die errechneten Korrelationsfunktionen zeigen einen algebraischen Zerfall, d.h., das XXZ-Modell mit $s = 1/2$ ist kritisch. Ist die Vorgehensweise von Luther und Peschel teilweise noch sehr intuitiv, so ist es heute möglich, dieses Resultat exakt zu zeigen (siehe z.B. [15]).

Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen lauten hiernach:

$$< S_z(r)S_z(0) >= \frac{(-1)^r}{r^{v_z}} \tag{3.5}$$

$$< S^+(r)S^-(0) >= \frac{(-1)^r}{r^{v_x}} \tag{3.6}$$

Die *kritischen Exponenten* sind dabei gegeben als:

$$v_z = \frac{1}{v_x} = 2K \qquad \text{mit} \qquad K = \frac{\pi}{2[\pi - \arccos(\lambda)]} \tag{3.7}$$

Für das isotrope Heisenbergmodell folgt also $K = 1/2$, und obige Korrelationsfunktionen zeigen SU(2)-invariantes Verhalten mit $v_x = v_z = 1$. Die Spin-Spin Korrelationsfunktion zerfällt also sehr langsam, und man kann von einer "fast langreichweitigen, néelartigen Struktur" sprechen. Da das System kritisch ist, gibt es natürlich **keine Energielücke** zu den elementaren Anregungen hin.

Interessant ist jetzt die Art dieser Anregungen. Ausgehend von der fast langreichweitigen, néelartigen Struktur könnte man erwarten, daß die elementaren Anregungen Spinflips mit $S = 1$ sind. Dies ist aber falsch. Die elementaren Anregungen sind vielmehr *Spinonen* mit $S = 1/2$ [16]. Geht man in einem Bereich der Länge $L < \xi$, wobei ξ die Korrelationslänge ist, von einer néelartigen Ordnung aus, so läßt sich ein Spinon, wie in Abb. (3.1) dargestellt [1], als *Domänenwand* auffassen.

Da der Gesamtspin des Systems entweder ganzzahlig oder halbzahlig ist, können Spinonen nur paarweise erzeugt werden. Die Energiedispersion des Spinonpaares lautet:

$$\omega(q) = \frac{\pi}{2}|\cos(q)| \tag{3.8}$$

Da der Gesamtimpuls $q = q_1 + q_2$ beträgt, ist durch die Energie nur der Impuls eines Spinons festgelegt. Es ensteht ein *Zweispinon-Kontinuum* wie in Abbildung (3.2) dargestellt.

[1] Auch dieses ist nur ein sehr einfaches Bild, das der Anschauung dient. Die realen Zustände sehen weit komplizierter aus.

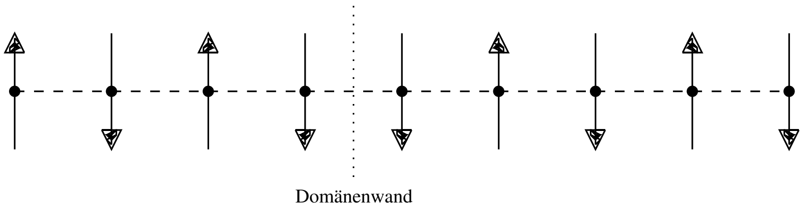

Abbildung 3.1: Ein $S = 1/2$ Spinon dargestellt als Domänenwand

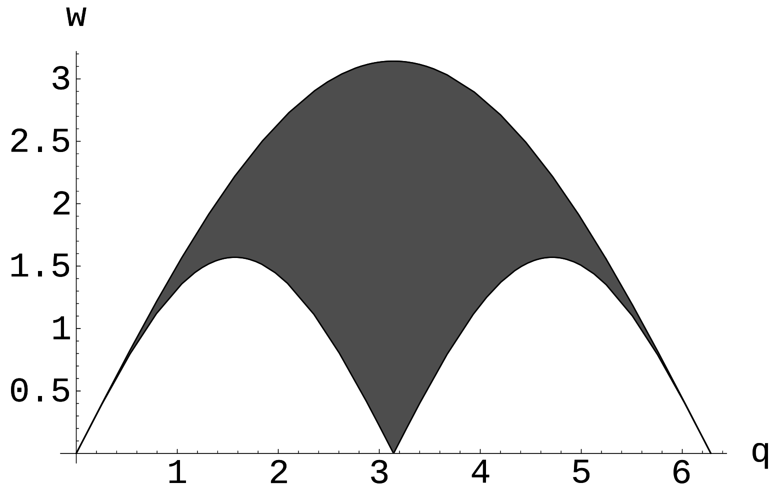

Abbildung 3.2: Das Zweispinonkontinuum zur Dispersion (3.8)

Mittels Holstein-Primakoff Transformation [17] ist es auch möglich, $s = 1/2$-Spins direkt auf hardcore-Bosonen abzubilden. Der dabei entstehende Hamiltonian ist aber nur in einer 1/s-Entwicklung [8] handhabbar. Bei dieser Spinwellennäherung bleiben zwar die bosonischen Kommutatorrelationen erhalten, die hardcore-Zwangsbedingung wird aber verletzt. Die 1/s-Entwicklung ist außerdem eine Entwicklung um den klassischen Néelzustand und führt in einer Dimension zu Infrarotdivergenzen [2]. Dies ist Ausdruck dafür, daß die globale SU(2)-Spinsymmetrie in einer Dimension nach dem Colemanschen-Theorem nicht gebrochen werden kann.

Aussagen zu den Eigenschaften der Spinkette mit beliebigem Spin kann man durch eine Abbildung auf das *nlσ-Modell* gewinnen. Haldane [5] hat gezeigt, daß man für ganzzahlige Spins ein gewöhnliches nlσ-Modell erhält, während bei halbzahligem Spin zusätzlich noch ein topologischer Term in der Wirkung auftritt [3]. Die berühmte Schlußfolgerung daraus ist bekannt als *Haldanes conjecture*:

[2]LSWT wird ausführlich in Kapitel 8 behandelt werden. Die Ergebnisse für $d = 1$ finden sich in Kapitel 8.1.1

[3]Dies wird in Kapitel 7.3.1 noch einmal ausführlich diskutiert werden.

I) Spinketten mit s halbzahlig sind immer kritisch,

II) Während Spinketten mit s ganzzahlig ungeordnet sind.

3.2 Die Spinkette mit Dimerisierung

Nachdem bisher die isolierte Spinkette besprochen wurde, soll jetzt die Ankopplung an die Schwingungen des zugrundeliegenden Gitter mitberücksichtigt werden. Die Quasiteilchen der Gitterschwingungen in quantisierter Form sind bekanntlich die Phononen. Diese sollen in harmonischer Näherung betrachtet werden, was für nicht zu große Auslenkungen eine vernünftige Annahme ist. Der Hamiltonoperator für die Phononen lautet dann:

$$H_{Ph} = \sum_{q,s} \hbar\omega_{qs} \left(b^{+}_{qs} b_{qs} + \frac{1}{2} \right) \tag{3.9}$$

Dabei ist ω_{qs} die Frequenz der Gitterschwingung zum Impuls q im Zweig s. Die Kopplung zwischen den Spins soll wie im Abschnitt zuvor durch das Heisenbergmodell (2.4) beschrieben werden, wobei jetzt zusätzlich noch eine Kopplung zwischen übernächsten Nachbarn (NNN-Kopplung) hinzugefügt wird. Diese Kopplung soll wie die zwischen nächsten Nachbarn (NN-Kopplung) ebenfalls antiferromagnetisch sein.

$$H_{S-S} = J \sum_{i} \left(\boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_{i+1} + \alpha \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_{i+2} \right) \tag{3.10}$$

Da die NN-Kopplung versucht, die Spins von übernächsten Nachbarn parallel zu stellen, während die NNN-Kopplung eine antiparallele Ausrichtung dieser Spins favorisiert, ist die Spinkette mit eingeschalteter NNN-Kopplung ($\alpha \neq 0$) *frustriert.*

Zu einer Ankopplung der Phononen an das Spinsystem kommt es jetzt, da sich durch eine Verzerrung des Gitters die Kernabstände und damit die magnetischen Austauschkopplungen verändern. Unter der Annahme, daß die NN-Kopplung linear vom Kernabstand abhängig ist, während die NNN-Kopplung unverändert bleibt, läßt sich der Hamiltonian der Spin-Phonon-Kopplung in folgender Form angeben:

$$H_{S-Ph} = \lambda \sum_{l} \left\{ (u_{l+1} - u_l) \cdot (\boldsymbol{S}_l \boldsymbol{S}_{l+1}) \right\} \tag{3.11}$$

Dabei bezeichne u_l die Auslenkung des l-ten Kernes aus der Ruhelage parallel zur Kette.

Diese Auslenkung läßt sich natürlich durch die sie verursachenden Phononen ausdrücken.

$$H_{S-Ph} = \sum_{q,k} g(q,k)(b_q + b^+_{-q})\boldsymbol{S}_k \boldsymbol{S}_{-k-q} \tag{3.12}$$

Die Frage ist nun, ob die Energie des Gesamtsystems $H = H_{Ph} + H_{S-S} + H_{S-Ph}$ durch eine Verzerrung des Gitters abgesenkt wird oder nicht. Um das Problem zu vereinfachen, soll im folgenden die Frustration $\alpha = 0$ sein. Nun ist der Gewinn an magnetischer mit dem Verlust an elastischer Energie zu vergleichen. Berechnet man dazu im Rahmen einer *Random Phase Approximation* den Phononpropagator [1], so zeigt sich, daß das System unterhalb einer kritischen Temperatur $T_C > 0$ immer dimerisiert. Dies wird auch deutlich an der Dimer-Dimer-Korrelationsfunktion, die bei einer Verzerrung mit $q = \pi$ für $T \to 0$ sogar divergiert.

Dieser strukturelle Phasenübergang wird als *Spin-Peierls-Übergang* bezeichnet. Damit verbunden ist bei der s=1/2-Kette aber auch ein magnetischer Übergang. Die nichtdimerisierte s=1/2-Kette ist nämlich kritisch und hat lückenlose Anregungen, während die dimerisierte Kette eine Anregungslücke aufweist. Anschaulich zu verstehen ist die dimerisierte Phase, wenn man sich vorstellt, daß sich je zwei Spins zu einem Singulett binden, wobei die Kopplung zwischen den einzelnen Singuletts schwach ist. In diesem Bild ist die Anregungslücke einfach die Energie, die nötig ist, um ein Singulett aufzubrechen.

Berücksichtigt man nur Verzerrungen in der Umgebung von $q \approx \pi$, so wird man auf folgenden effektiven Hamiltonian für ein an die Gitterschwingungen angekoppeltes Spinsystem geführt:

$$H_{eff} = \frac{NK}{2}\delta^2 + J\sum_i \left\{(1 + (-1)^i\delta)\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_{i+1} + \alpha\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_{i+2}\right\} \tag{3.13}$$

Der erste Term ist die elastische Energie, wobei N die Anzahl der Gitterplätze und K die Kopplungskonstante ist. Die Größe δ ist dabei ein Maß für die Dimerisierung des Systems.

Für eine unterkritische Frustration $\alpha < \alpha_c$ zeigt dieses Modell, wie schon besprochen, bei einer kritischen Temperatur einen Spin-Peierls Phasenübergang. Für die Grundzustandsenergie gilt dabei $E \propto \delta^{\frac{4}{3}}$ und für das Gap $\Delta \propto \delta^{\frac{2}{3}}$ [1]. Wenn die Frustration hingegen den kritischen Wert α_c übersteigt, so wird die Kritikalität der Kette schon durch die Frustration zerstört. Für die Grundzustandsenergie gilt in diesem Bereich $E \propto \delta$.

Dieser Spin-Peierls Übergang wurde experimentell zuerst an einigen organischen Verbindungen beobachtet. Seit 1993 entdeckt wurde, daß auch die anorganische Verbindung $CuGeO_3$ einen solchen Übergang zeigt [18], ist das Interesse daran wiedererwacht. Dabei wurde vor allem versucht, die beiden Parameter δ, α im Modellhamiltonian (3.13) möglichst akurat an die experimentellen Daten anzupassen [19]. Nicht berücksichtigt dabei wurde, daß es sich bei $CuGeO_3$ nicht um ein rein eindimensionales Problem handelt. Vielmehr beträgt die Zwischenkettenkopplung etwa 15% der Kopplungsstärke in Richtung der Ketten [20]. Will man wirklich möglichst genaue Werte für δ und α erhalten, so scheint es notwendig, diese Zwischenkettenkopplung mit zu berücksichtigen. Dies wird auf verschiedene Weise in vielen aktuellen Artikeln versucht [20, 21] und ist Gegenstand der momentanen theoretischen Forschung an Spin-Peierls-Systemen. Das Beispiel des $CuGeO_3$ soll auch als Motivation dienen, warum es sinnvoll ist, sich mit zweidimensionalen Verallgemeinerungen von (3.13) zu beschäftigen. Bevor wir aber zum eigentlichen Thema der Arbeit, den zweidimensionalen, dimerisierten Modellen kommen, soll noch auf den zweidimensionalen, isotropen Fall eingegangen werden.

3.3 Das zweidimensionale, isotrope Heisenbergmodell

Wir wollen hier das zweidimensionale, antiferromagnetische Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter betrachten, das durch den Hamiltonian

$$H = J \sum_{<\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'>} \boldsymbol{S}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}') \tag{3.14}$$

beschrieben wird. Wie schon in der Einleitung erwähnt, ist das Interesse an diesem Modell in den letzten Jahren durch die Entdeckung der Verwandtschaft von zweidimensionalen Antiferromagneten mit neueren Hochtemperatursupraleitern wieder gewachsen. Da aber in zwei Dimensionen leider weder der Betheansatz noch die Jordan-Wigner Transformation [4] anwendbar und auch keine anderen Verfahren bekannt sind, um wenigstens in einem Grenzfall exakte Lösungen zu erhalten, weiß man über dieses Modell wesentlich weniger als über den eindimensionalen Fall. Während für $s \geq 1$ nach dem Theorem von Dyson, Lieb und Simon [7] wenigstens bekannt ist, daß der Grundzustand langreichweitige, antiferromagnetische Ordnung aufweist, gibt es für $s = 1/2$ keine ähnliche Aussage.

Andererseits gibt es aber auch die in einer Dimension auftretenden Infrarotdivergenzen der linearen Spinwellentheorie (LSWT) nicht mehr, so daß diese in zwei Raumdimensionen ein brauchbares analytisches Mittel darstellt. Mit dieser ergibt sich für obigen Hamiltonoperator im Falle $s = 1/2$ im Grundzustand eine Untergittermagnetisierung pro Gitterplatz von $m = 0.3034$ [8]. Dies bedeutet, daß anscheinend auch für $s = 1/2$ eine langreichweitige Ordnung vorliegt. Erstaunlicherweise wird dieses Resultat nicht nur qualitativ durch unterschiedlichste numerische Berechnungen bestätigt, sondern auch der konkrete Wert für die Untergittermagnetisierung weicht kaum ab! Als Vergleich sei hier eines der neuesten numerischen Ergebnisse von Beard, Birgeneau, Greven und Wiese [9] genannt, die für dieses Modell eine Untergittermagnetisierung von $m = 0.308$

[4] Eine Verallgemeinerung der Jordan-Wigner Transformation auf zwei Dimensionen ist zwar möglich, führt aber zu nicht lokalen Wechselwirkungen. Die bisherigen Versuche [22], trotzdem diese Transformation anzuwenden, haben keine neuen Erkenntnisse gebracht.

erhalten. Wenn man sich mit den Grundzustandseigenschaften des zweidimensionalen Heisenberg-Antiferromagneten beschäftigt, ist LSWT also tatsächlich eine brauchbare Methode. Dies gilt aber nicht für die Thermodynamik! Dazu erinnere man sich daran, daß die LSWT ein 1/s-Entwicklung beeinhaltet. Diese Enwicklung verletzt aber die Zwangsbedingung, daß es maximal ein Boson pro Gitterplatz geben darf. Für $T \neq 0$ macht sich dies entscheidend bemerkbar, da dann jeder Gitterplatz vielfach besetzt wird. Die thermodynamischen Größen, die man so erhält, haben dann mit denen des realen Modells natürlich nichts mehr gemein.

Eine Möglichkeit, diesen Mangel zu beheben, stellt die modifizierte Spinwellentheorie (MSWT) von Takahashi [23] dar. Bei dieser wird eine gewöhnliche LSWT unter der Voraussetzung verschwindender Untergittermagnetisierung durchgeführt. Diese Bedingung wird einfach in Form eines Lagrange-Multiplikators dem Hamiltonoperator in LSWT hinzugefügt. Die MSWT eignet sich also, um Bereiche des Phasendiagramms zu untersuchen, die ungeordnet sind. Die thermodynamischen Größen, die sich in MSWT ergeben, stimmen erstaunlicherweise hervorragend mit experimentellen Daten und Ergebnissen der Renormierungsgruppe überein. Da ich mich in dieser Arbeit ausschließlich mit Grundzustandseigenschaften beschäftigen werde, spielt die MSWT in dieser Arbeit keine Rolle.

Eine andere Möglichkeit stellt auch in zwei Dimensionen die Abbildung des Heisenbergmodells auf das nlσ-Modell dar. Auch wenn dieser Ansatz besser begründet ist als die LSWT - so ist z.B. mit Hilfe des nlσ-Modells auch Thermodynamik möglich - handelt es sich letztlich auch nur um eine 1/s-Entwicklung. Die Ergebnisse sind deshalb erst einmal nur für genügend großen Spin gültig. Wenigstens qualitativ scheinen sie aber sogar für $s = 1/2$ zuzutreffen. Wie die Abbildung auf das nlσ-Modell im einzelnen funktioniert, wird in Kapitel 7 dargestellt werden. Hier soll nur kurz auf die Resultate eingegangen werden, die Chakravarty, Halperin und Nelson [24] mit einer auf dieses Modell angewandten Renormierungsgruppe erhalten haben.

In Standardform ist der Hamiltonian des nlσ-Modells durch

$$H_{nl\sigma} = \frac{1}{2g} \int d^3x (\partial_\mu m)(\partial^\mu m) \tag{3.15}$$

gegeben. Dabei sind Raum und Zeit isotrop behandelt worden und die nackte Kopplung g_0 ist durch $g_0 = \frac{2}{s}$ definiert. Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall gibt es hier weder für ganz- noch für halbzahlige Spins einen topologischen Term, solange die Spinkonfiguration als hinreichend glatt angenommen werden kann [13].

Die β-Funktion für die Kopplung g ist schon vor vielen Jahren von Polyakov berechnet worden [25] und lautet in *ϵ-Entwicklung*:

$$\beta(g) = g - \frac{g^2}{2\pi} + \mathcal{O}(g^3) \tag{3.16}$$

Diese Funktion beschreibt den Fluß der Kopplung g unter Renormierung des Modells. Man sieht, daß es für $T = 0$ eine kritische Kopplung (nichttrivialer Fixpunkt des Renormierungsgruppenflusses) $g_c = 2\pi$ gibt. Ist nun die nackte Kopplung kleiner als dieser Fixpunktwert, so bedeutet dies, daß die effektive Kopplung zu Null zurückfließt und wir damit einen Néelzustand mit schwach gekoppelten Spinwellen erhalten. Umgekehrt bedeutet $g_0 > g_c$, daß die effektive Kopplung gegen unendlich fließt und sich das Modell in einer ungeordneten Phase befindet. Genau für $g_0 = g_c$ ist das Modell kritisch, und die Korrelationsfunktionen zerfallen algebraisch. Ein Problem ist, daß man den genauen Wert der kritischen Kopplung im Rahmen einer Renormierungsgruppe nicht bestimmen kann. So ist der oben angegebene kritische Wert nur in 1-Loop Ordnung gültig, während sich in höheren Ordnungen kleinere Werte ergeben. Chakravarty, Halperin und Nelson haben deshalb die LSWT benutzt, um für $s = 1/2$ auf ein Verhältnis von nackter zu kritischer Kopplung von $g_0/g_c = 0.685$ zu schließen. Dies bedeutet, daß auch diese Theorie einen néelgeordneten Grundzustand für den $s = 1/2$-Heisenberg Antiferromagneten vorhersagt. Behandelt man Raum und Zeit [5] nicht mehr isotrop, so kann man für endliche Temperaturen Crossover-Linien zwischen drei verschiedenen Phasen definieren. Diese Phasen sind natürlich alle gemäß dem Mermin-Wagner-Theorem ungeordnet, unterscheiden sich aber in der Abhängigkeit der Korrelationslänge von der Temperatur. Die exakten Ausdrücke für die Phasengrenzen sind recht kompliziert [24], so daß wir uns hier auf das resultierende Phasendiagramm (Abb.3.3) beschränken wollen.

Es bleibt festzuhalten, daß sowohl die LSWT als auch die Renormierungsgruppe des nlσ-Modells einen néelgeordneten Grundzustand für das isotrope Heisenbergmodell ergeben. Dies bedeutet, daß zusätzliche Störungen des Systems nötig sind, um die langreichweitige Ordnung zu zerstören. In dieser Arbeit werden dies dimerisierte Kopplungen sein. Da wir uns ausschließlich mit den Grundzustandseigenschaften beschäftigen werden, bietet sowohl die LSWT als auch die Renormierungsgruppe des nlσ-Modells in entsprechender Verallgemeinerung einen analytischen Zugang zu solchen Modellen.

[5] Diese entspricht der imaginären, inversen Temperatur.

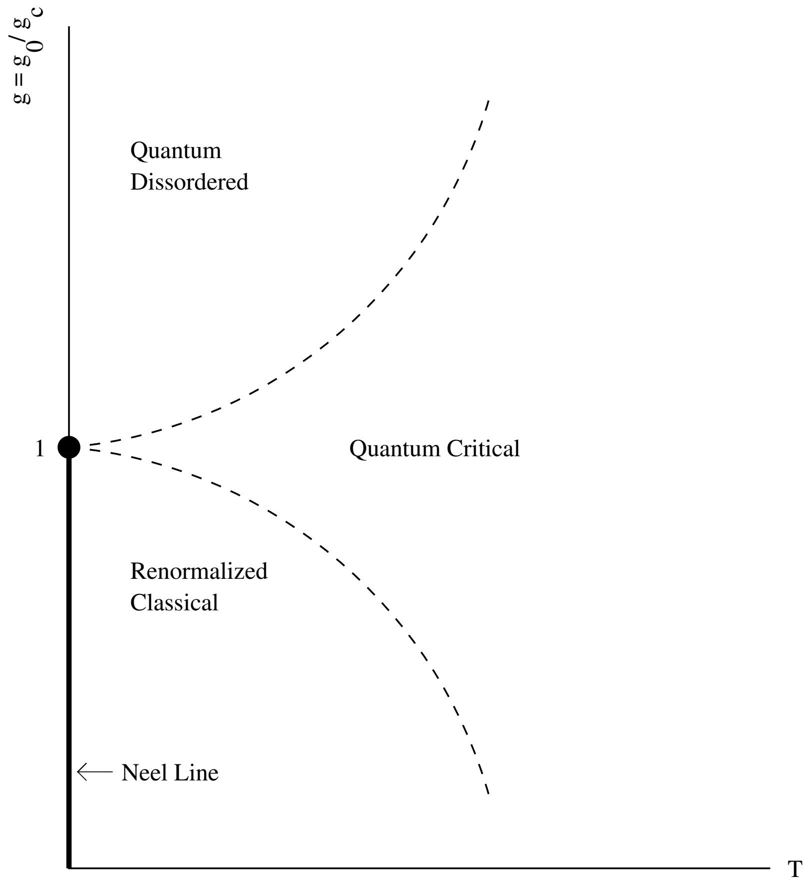

Abbildung 3.3: Phasendiagramm für das nlσ-Modell

Kapitel 4

Zweidimensionale Heisenbergmodelle mit Dimerisierung

Es sollen hier zweidimensionale Heisenbergmodelle auf dem Quadratgitter mit NN-Wechselwirkung vorgestellt werden, bei denen die Kopplungsstärke zwischen den Spins nicht mehr konstant ist, sondern sich räumlich verändert. Und zwar soll die Stärke der Bonds in eine oder in beide Raumrichtungen zwischen $J(1+\delta)$ und $J(1-\delta)$ alternieren. Da $J > 0$ und $\delta \in [0,1]$ gelten soll, bleiben die Kopplungen immer antiferromagnetisch. Außerdem wird im folgenden ausschließlich der Fall s=1/2 betrachtet!

Je nachdem wie man die starken und schwachen Bonds anordnet, ergeben sich unterschiedliche Muster. Diese lassen sich in drei Kategorien einteilen. Hat man nur in eine Raumrichtung alternierende Kopplungen, während in die andere schwache aber konstante Kopplungen wirken, so erhält man schwach gekoppelte Spin-Peierls Ketten. Hier kann man noch einmal zwei Fälle unterscheiden, je nachdem, ob die Spin-Peierls Ketten kollumnar oder alternierend untereinander angeordnet sind. Eine weitere Kategorie beinhaltet zwei Modelle, bei denen in beide Raumrichtungen alternierende Kopplungen vorliegen. Diese sind dabei so angeordnet, daß die Modelle im Falle starker Dimerisierung in schwach gekoppelte Spinketten zerfallen. In der dritten Kategorie befindet sich nur ein Modell. Bei diesem sind die Kopplungen ebenfalls in beide Raumrichtungen alternierend. Die Anordnung der starken und schwachen Kopplungen ist aber so gewählt, daß das Modell bei starker Dimerisierung nicht in Ketten, sondern in Plaketten zerfällt.

4.1 Schwach gekoppelte Spin-Peierls Ketten

In Kapitel 3.2 war die Ankopplung der Phononen an die Spinkette beschrieben worden. Das Resultat war ein effektiver Hamiltonoperator der Form (3.13). Es zeigte sich, daß dieses System für hinreichend kleine Temperatur in eine dimerisierte Phase übergeht. Die wichtigste experimentelle Substanz, an der ein solcher Spin-Peierls Übergang zu beobachten ist, ist das $CuGeO_3$. Diese Substanz besteht aber - wie schon beschrieben - nicht aus rein eindimensionalen Strukturen, sondern vielmehr aus Spinketten mit einer Zwischenkettenkopplung, die immerhin 15% der Kopplung in Richtung der Kette beträgt. In Abbildung (4.1) ist die realistische Struktur des Kupfergermanats dargestellt. Die dicke Linie bezeichne dabei eine Kopplung der Größe $J_{||}(1+\delta)$, die dünne eine der Größe $J_{||}(1-\delta)$, während die gestrichelte Linie für die Zwischenkettenkopplung $J_{\perp}$ steht. In $CuGeO_3$ gilt dabei $J_{\perp}/J_{||} \approx 0.15$. Eine andere Möglichkeit ist es, ein Modell zu betrachten, bei dem die starken und schwachen Bonds kollumnar untereinander angeordnet sind, wie in Abb. (4.2) zu sehen.

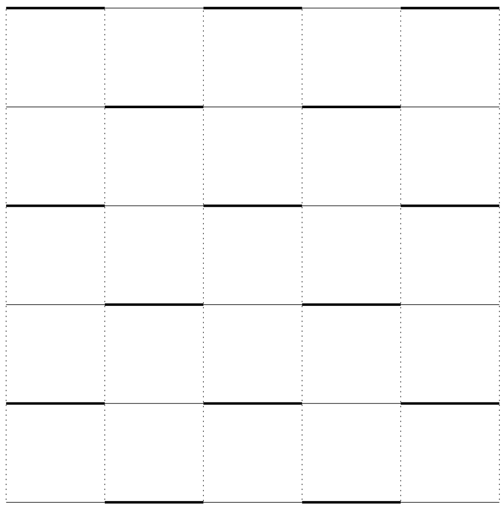

Abbildung 4.1: Struktur des $CuGeO_3$ mit Zwischenkettenkopplung

Diese Modelle sind aber beide, vom theoretischen Standpunkt aus betrachtet, nicht sonderlich interessant. Wie in Kapitel 3.2 beschrieben, hat die Kette in der dimerisierten Phase nämlich schon ein Spingap. Wenn man dann solche Ketten aneinanderkoppelt, so betrachtet man eine Kopplung zwischen massiven und nicht mehr zwischen kritischen eindimensionalen Systemen. Eine solche Kopplung ist natürlich viel leichter zu behandeln als die zwischen kritischen Ketten, da einfache Störungstheorie anwendbar ist. In den hierzu in letzter Zeit zahlreich erschienenen Artikeln [1] wird deshalb auch nur die Spin-Peierls Kette "exakt" behandelt (z.B. mittels DMRG), während die Zwischenkettenkopplung einfach störungstheoretisch hinzugefügt wird. Dies führt natürlich auch qualitativ zu keinen neuen Erkenntnissen, einzig und allein die Parameter des Modells werden gegenüber der rein eindimensionalen Behandlung ein wenig verschoben. Ist man daran interessiert, die experimentellen Resultate möglichst perfekt theoretisch zu reproduzieren, so ist der zusätzliche Aufwand natürlich gerechtfertigt. Es ist aber festzuhalten, daß das Problem für nicht zu große Zwischenketten-

[1] Siehe hierzu [20] und die zahlreichen Verweise in diesem Artikel

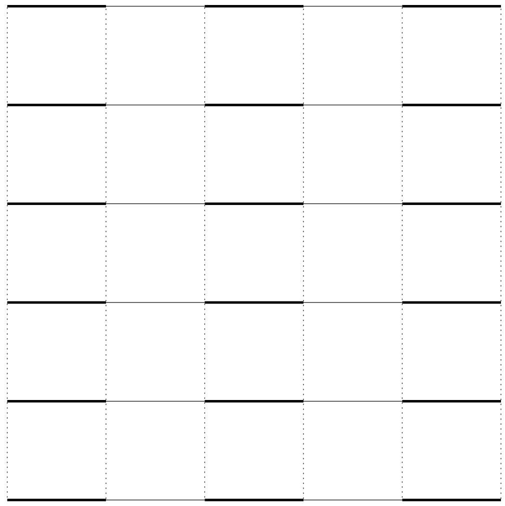

Abbildung 4.2: kollumnare Anordnung der dimerisierten Ketten

kopplungen quasi eindimensional bleibt. Aus diesen Gründen werde ich mich mit diesen Modellen im folgenden nicht näher beschäftigen.

4.2 Schwach gekoppelte Spinketten

Unter diesem Begriff sollen zweidimensionale Modelle verstanden werden, bei denen die Kopplungen so zwischen $J(1+\delta)$ und $J(1-\delta)$ alternieren, daß man für $\delta = 1$ ungekoppelte, eindimensionale Spinketten erhält. Dabei können zwei verschiedene Muster auftreten, die ich als Treppen- bzw. Mäandermodell bezeichnen möchte. Das Treppenmodell ist in Abbildung (4.3) und das Mäandermodell in (4.4) dargestellt. Die dicken Linien stellen hier die Kopplungen mit Stärke $J(1+\delta)$ dar, während die mit $J(1-\delta)$ durch gestrichelte Linien angedeutet sind.

Als Hamiltonoperator liest man für das

$$\text{Treppenmodell:}\quad H = J\sum_{i,j}[1+(-1)^{i+j}\delta)]\,\boldsymbol{S}_{i,j}\cdot\boldsymbol{S}_{i,j+1} + J\sum_{i,j}[1+(-1)^{i+j}\delta]\,\boldsymbol{S}_{i,j}\cdot\boldsymbol{S}_{i+1,j} \tag{4.1}$$

ab und für das

$$\text{Mäandermodell:}\quad H = J\sum_{i,j}[1+(-1)^{i+j}\delta)]\,\boldsymbol{S}_{i,j}\cdot\boldsymbol{S}_{i,j+1} + J\sum_{i,j}[1+(-1)^{i}\delta]\,\boldsymbol{S}_{i,j}\cdot\boldsymbol{S}_{i+1,j} \tag{4.2}$$

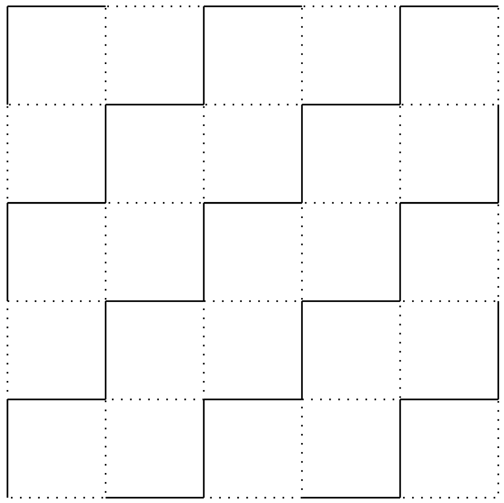

Abbildung 4.3: Das Treppenmodell

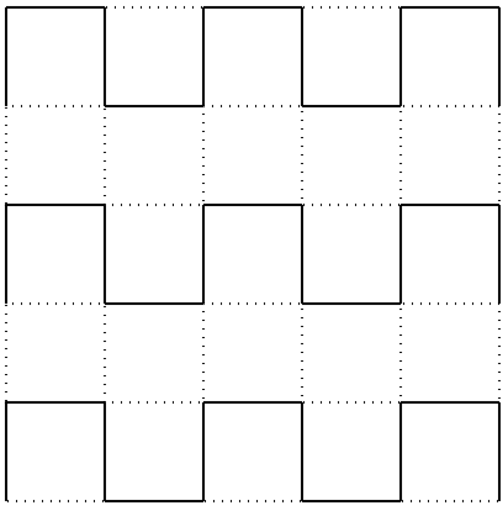

Abbildung 4.4: Das Mäandermodell

Beim Treppenmodell erhält man für starke Dimerisierung, d.h. δ nahe Eins, treppenartige Zickzackketten von Spins, die mit Stärke $J(1+\delta)$ gekoppelt sind. Untereinander sind diese Ketten mit einer schwachen Zwischenkettenkopplung $J(1-\delta)$ verbunden.

Im Mäandermodell enstehen für starke Dimerisierung ebenfalls Ketten, die untereinander nur noch schwach gekoppelt sind. Zusätzlich ist hier aber auch noch eine überübernächste Nachbarwechselwirkung (NNNN-Kopplung) der Stärke $J(1-\delta)$ innerhalb einer Kette vorhanden. Was diese zusätzliche Kopplung für eine isolierte Kette bedeutet, ist eine sehr interessante Frage, die wir in Kapitel 6.3 durch Skalenargumente und numerische Berechnungen (DMRG) beantworten werden. Durch die NNNN-Kopplung stellt das Mäandermodell sicher das komplexeste Modell in dieser Arbeit dar.

Außer den beiden gerade vorgestellten Modellen soll auch noch das einfachst denkbare Modell auf dem Quadratgitter betrachtet werden, das sowohl den Grenzfall ungekoppelter, eindimensionaler Ketten als auch den Grenzfall des isotropen Heisenbergmodells enthält. Dieses Modell ist in Abb. (4.5) dargestellt und wird durch folgenden Hamiltonian beschrieben:

$$\begin{aligned} J_x/J_y\text{-Modell:} \quad H &= J_x \sum_{i,j} \boldsymbol{S}_{i,j} \cdot \boldsymbol{S}_{i,j+1} \\ &\quad + J_y \sum_{i,j} \boldsymbol{S}_{i,j} \cdot \boldsymbol{S}_{i+1,j} \end{aligned} \tag{4.3}$$

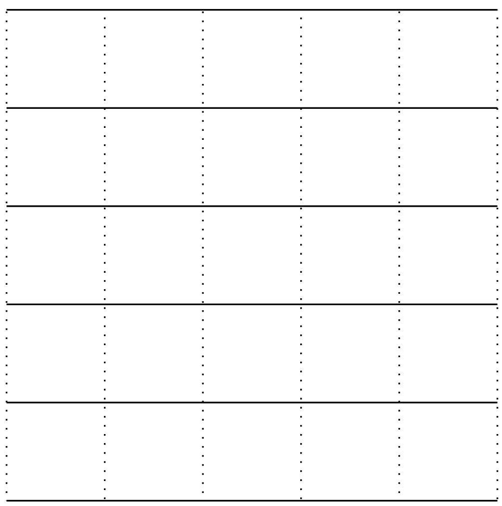

Abbildung 4.5: Das J_x/J_y-Modell

Dabei ist $J_x > 0$ die antiferromagnetische Kopplung in x-Richtung und $J_y \geq 0$ die antiferromagnetische Kopplung in y-Richtung. Dieses Modell soll hier mitbetrachtet werden, da es sehr ähnlich wie die beiden vorherigen aufgebaut ist und in der Literatur schon intensiv behandelt wurde [26, 27, 29, 30]. Das Verhalten des Modells wird durch das Verhältnis der Kopplungsstärken $R := J_y/J_x$ bestimmt. Für $R = 1$ liegt das räumlich isotrope Heisenbergmodell vor, das - wie in Kapitel 3.3 beschrieben - einen néelartigen Grundzustand hat, wobei die Untergittermagnetisierung allerdings durch Quantenfluktuationen wesentlich gegenüber dem klassischen Wert reduziert ist. Für $R = 0$ liegen ungekoppelte Spinketten mit $s = 1/2$ vor, die kritisch sind. Es stellt sich nun zum einen die Frage, ob sich das Modell für sehr kleine Werte von R quasi eindimensional verhält [2], und zum anderen, bei welchem Wert von R der néelartige Zustand zerstört wird.

4.3 Das Plakettenmodell

Bei diesem Modell sind die alternierenden Kopplungen so angeordnet, daß für $\delta = 1$ das Modell in einzelne Plaketten zerfällt, die jeweils aus vier gekoppelten Spins bestehen. Diese Anordnung ist in Abb. (4.6) dargestellt und wird durch

$$\begin{aligned} H &= J \sum_{i,j} [1 + (-1)^j \delta)] \, \boldsymbol{S}_{i,j} \cdot \boldsymbol{S}_{i,j+1} \\ &+ J \sum_{i,j} [1 + (-1)^i \delta] \, \boldsymbol{S}_{i,j} \cdot \boldsymbol{S}_{i+1,j} \end{aligned} \tag{4.4}$$

beschrieben.

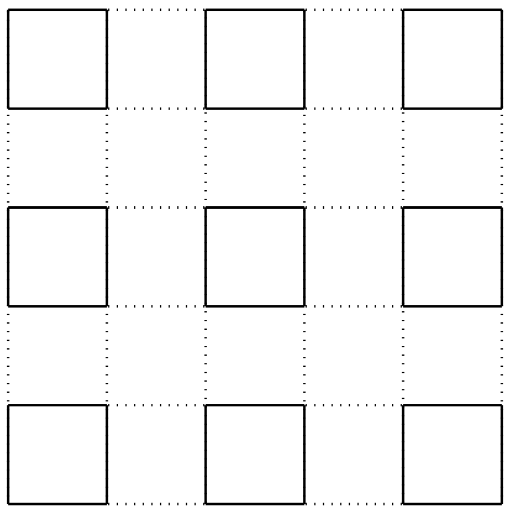

Abbildung 4.6: Das Plakettenmodell

Im Gegensatz zu den im vorherigen Abschnitt beschriebenen Modellen gibt es hier also keinen eindimensionalen Grenzfall. Hier ist sofort klar, daß man für große Dimerisierung einen ungeordneten Grundzustand mit einem Spingap

[2] In Kapitel 5.3.1 werden wir sehen, daß dies nicht der Fall ist.

erwartet. Dieses wird anschaulich hervorgerufen durch die Bildung eines Singuletts in jeder Plakette. Die Lücke ist dann durch die Energie gegeben, die nötig ist, um ein solches Singulett aufzubrechen. Da es mit CaV_4O_9 ein Material gibt, das tatsächlich eine solche Plakettenstruktur zeigt [3], ist dieses Modell in der Literatur schon behandelt worden. So haben z.B. Koga, Kumada und Kawakami [31] das Plakettenmodell auf ein nlσ-Modell abgebildet [4] und auch LSWT verwendet. Deshalb bietet dieses Modell die Möglichkeit, die in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse mit denen in der Literatur zu vergleichen. Da ich aber in LSWT auch eine Bedingung für die selbsttätige Verzerrung herleiten werde und sich auch meine Methode, das Modell auf ein nlσ-Modell abzubilden, von der Kawakamis unterscheidet, gehen die hier erzielten Resultate auch ein Stück weit über das bisher schon Bekannte hinaus. Desweiteren gibt es für dieses Modell auch Reihenentwicklungen, die von einer Singulett-Konfiguration aus starten [32]. Diese nähern sich in gewisser Weise dem Problem von der anderen Seite und bieten eine interessante Vergleichsmöglichkeit zu den Resultaten in LSWT und RG.

[3] Allerdings liegt hier ein zu 1/5 geleertes Quadratgitter vor.

[4] Sie haben dann allerdings keine RG angewandt, sondern das Modell auf Mean-Field Niveau betrachtet.

Kapitel 5

Renormierungsgruppe und kritische Phänomene

In diesem Kapitel sollen die grundlegenden Methoden der Renormierungsgruppe (RG) und die wichtigsten Definitionen aus dem Bereich der kritischen Phänomene vorgestellt werden. Hier wird die Renormierungsgruppe von Wilson [33], die als wesentlichen Schritt eine Integration über Impulsschalen beinhaltet, beschrieben werden. Diese hat den Vorteil, physikalisch sehr anschaulich und für die Berechnung der RG-Funktionen in erster Ordnung auch praktikabel zu sein. Ist man an höheren Ordnungen interessiert, so ist es aus rechnerischen Gründen häufig einfacher, einen anderen Weg zu gehen. Dabei berechnet man geeignete Korrelationsfunktionen störungstheoretisch und nutzt die RG-Gleichungen, um daraus die RG-Funktionen zu erhalten. Auf diesen Weg soll hier nicht näher eingegangen werden. Eine sehr ausführliche Darstellung dieser Methode findet sich in dem Buch von Zinn-Justin [34].

5.1 Renormierungsgruppe

Ausgangspunkt der Betrachtung soll ein beliebiges d-dimensionales, quantenmechanisches Vielteilchensystem in zweiter Quantisierung sein. Ein solches System wird für die meisten physikalischen Probleme auch Wechselwirkungen zwischen den Teilchen enthalten. Die älteste Methode, um auch solche wechselwirkenden Systeme zu behandeln, stellt die Störungstheorie dar. Dabei treten allerdings vielfach in der Entwicklung divergente Terme auf, die charakteristisch für Phasenübergänge sind und letztlich die störungstheoretische Behandlung unmöglich machen. Die RG ist nun gerade eine Möglichkeit, auch solche Systeme zu behandeln, die sich an oder dicht bei einem *kritischen Punkt* befinden.

Um die RG in der Wilsonschen Formulierung anzuwenden, ist es geschickt, als Erstes die *Feymansche Pfadintegraldarstellung* einzuführen. Diese erhält man, indem man *kohärente Zustände* definiert und die Zustandssumme mit Hilfe der *Trotter-Formel* als Funktionalintegral schreibt. Für die in dieser Arbeit betrachteten Spinsysteme werden wir in Kapitel 7 ein solches Pfadintegral im

Detail herleiten. Hier ist erst einmal nur wichtig, daß sich die Zustandssumme in folgender Form darstellen läßt:

$$Z[\Phi] = \int D\Phi \; \mathrm{e}^{-S[\Phi]} \tag{5.1}$$

Die Wirkung S errechnet sich dabei aus der Lagrangedichte des Systems:

$$S[\Phi] = \int d^{d+1}x \; \mathcal{L}(\Phi) \tag{5.2}$$

D.h. das d-dimensionale, quantenmechanische System ist äquivalent zu einer d+1 dimensionalen, klassischen Feldtheorie !

Speziell soll jetzt ein System, bestehend aus Teilchen der Masse m, auf einem Gitter betrachtet werden. Außerdem sei eine Wechselwirkung vorhanden, deren Kopplungsparameter mit g bezeichnet sei. Durch die Gitterkonstante a ist dann im Impulsraum mit $\Lambda = \frac{2\pi}{a}$ ein natürlicher Abschneideparameter für den Impuls gegeben. Damit gibt es keine UV-Divergenzen, wie sie z.B. in der Quantenelektrodynamik auftreten! Dieses System wird somit durch die Wirkung $S = S[\Phi, m, g, \Lambda]$ beschrieben.

Die Idee der RG nach Wilson ist es nun, durch teilweises Ausintegrieren der schnellen Moden in (5.1) eine effektive Theorie zu erhalten, die auf großen Längenskalen die gleichen Eigenschaften wie die ursprüngliche Theorie hat. Konkret geht man durch Fouriertransformation in den Impulsraum über und integriert in der Zustandssumme (5.1) alle Moden mit einem Impuls $\frac{\Lambda}{b} \leq |\boldsymbol{p}| \leq \Lambda$ aus, wobei $b > 1$ ist. Die Integration führt zu Termen, die sich als Korrekturen der mikroskopischen Kopplungen m und g schreiben lassen. Die neue, effektive Theorie hat dann eine Wirkung der Form $S = S[\Phi, m', g', \Lambda']$, wobei m' und g' die korrigierten Kopplungen sind und der Impulscutoff auf $\Lambda' = \Lambda/b$ reduziert wurde. Die Änderung der Impulsskala läßt sich also durch Justieren der mikroskopischen Kopplungen bei Erhaltung der physikalischen Eigenschaften auffangen! Mittels einer einfachen Umskalierung läßt sich der neue Cutoff Λ' auf den alten zurückführen:

$$b = \frac{\Lambda}{\Lambda'} \quad ; \quad r' = \frac{r}{b} \quad ; \quad p' = b \cdot p \tag{5.3}$$

Damit geht die Wirkung von $S[\Phi, m', g', \Lambda']$ zu $S[\Phi', \tilde{m}, \tilde{g}, \Lambda]$ über, wobei $\tilde{m}, \tilde{g}$ die reskalierten Kopplungen sind und das Φ' andeutet, daß im allgemeinen auch das Feld umskaliert werden muß.

Das Abintegrieren über die Impulsschale und die anschließende Reskalierung stellen zusammengenommen gerade einen Schritt der RG-Transformation dar. Wendet man diese Transformation mehrfach hintereinander an, so ergibt sich ein Fluß der mikroskopischen Kopplungen. Dieser wird beschrieben durch die *β-Funktion*, die als

$$\beta(g) = \left. \frac{g(b)}{\ln b} \right|_{b=1} \tag{5.4}$$

definiert ist [1]. Eine Nullstelle g^* der β-Funktion bedeutet, daß sich die Kopplung durch einen weiteren RG Schritt nicht verändert. g^* ist damit ein Fixpunkt der Renormierungsgruppe. Startet man mit beliebigen mikroskopischen Kopplungen m und g, so treibt der Renormierungsgruppenfluß diese zu einem Fixpunkt[2]. Das Verhalten des Systems ist also unabhängig von den mikroskopischen Details. Es wird bestimmt durch die meist wenigen vorhandenen Fixpunkte!
Unabhängig vom konkreten RG-Schritt (hier Impulsschalenintegration nach Wilson) läßt sich die RG allgemein formulieren. Dies soll im folgenden Abschnitt geschehen.

5.1.1 Allgemeine Formulierung der Renormierungsgruppe

In (5.2) hatten wir die Wirkung als Integral über die Lagrangedichte des Systems geschrieben. Völlig gleichwertig ist es natürlich, durch eine Legendretransformation zum Hamiltonformalismus überzugehen und die Wirkung durch die Hamiltondichte $\mathcal{H}$ auszudrücken. Eine RG-Transformation R_b stellt dann eine Abbildung im Raum der Hamiltonfunktionen H dar.

$$R_b\ : H \to H \quad ; \quad \mathcal{H} \to \mathcal{H}' \tag{5.5}$$

Diese Transformation wird zwar als Renormierungsgruppe bezeichnet, ist aber in Wirklichkeit nur eine Halbgruppe, da es keine inversen Transformationen gibt. Wie im vorherigen Kapitel beschrieben, ändert eine RG-Transformation die Zustandssumme nicht, d.h., $Z[\mathcal{H}] = Z[\mathcal{H}']$. Es ist nun leicht zu zeigen, daß daraus für die Dichte der freien Energie

$$f[\mathcal{H}] = b^{-d} f[\mathcal{H}'] \tag{5.6}$$

folgt. Als nächstes betrachten wir die Auswirkung der Transformation auf die Korrelationslänge ξ des Systems. Durch die Reskalierung nach (5.3) geht diese in $\xi' = \xi/b$ über. Ist das System nicht kritisch, d.h., ist $\xi < \infty$, so folgt $\xi' < \xi < \infty$. Die RG führt also vom kritischen Punkt fort. Anders sieht dies bei einem kritischen System aus. Dann ist $\xi = \infty$ und damit auch $\xi' = \xi/b = \infty$. **Ein kritisches System bleibt also unter RG kritisch!** Als Fixpunkte der RG kommen also nur Punkte in Frage, für die entweder $\xi = 0$ (Hochtemperaturfixpunkt) oder $\xi = \infty$ (krit. Fixpunkt) gilt. Von besonderem Interesse sind dabei natürlich die kritischen Fixpunkte des Systems.

Starten wir mit dem Hamiltonoperator $\mathcal{H}_c$ eines kritischen Systems, so wird dieser durch die RG wieder auf einen kritischen Hamiltonian abgebildet, der aber nicht identisch mit dem ursprünglichen sein muß. Die RG generiert also eine Trajektorie von kritischen Hamiltonians im Raum aller Hamiltonfunktionen. Wir wollen jetzt annehmen, daß diese Trajektorie an einem Fixpunkt $\mathcal{H}^*$ endet [3]. Zusammengefaßt bedeutet dies, daß alle kritischen Systeme auf der

[1] Die Definition für $\beta(m)$ ist völlig analog.
[2] Null und ∞ werden als triviale Fixpunkte bezeichnet.
[3] Diese Annahme läßt sich für viele Systeme plausibel machen.

stabilen Mannigfaltigkeit des Fixpunktes $\mathcal{H}^*$ liegen und durch den Renormierungsgruppenfluß letztlich zu diesem Fixpunkt befördert werden.

Nun betrachten wir einen Hamiltonoperator $\mathcal{H}$ in der Nähe des Fixpunktes $\mathcal{H}^*$. Dieser läßt sich als

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^* + g\mathcal{Q} \tag{5.7}$$

schreiben. Dabei ist g ein kleiner Entwicklungsparameter, und $\mathcal{Q}$ ist der Operator der Störung. Wendet man nun die RG-Transformation auf diesen Hamiltonian an und linearisiert, so ergibt sich:

$$\mathcal{H}' = R_b[\mathcal{H}] = R_b[\mathcal{H}^*] + gL_b[Q] \tag{5.8}$$

Dabei ist $L_b = \delta\mathcal{H}'/\delta\mathcal{H}$ der linearisierte RG-Operator. Als linearer Operator hat er ein Spektrum von Eigenwerten und zugehörigen Eigenvektoren. Diese werden bestimmt durch die Gleichung:

$$L_b\mathcal{Q}_j = \Lambda_j(b)\mathcal{Q}_j \tag{5.9}$$

Aus der Halbgruppeneigenschaft folgt dann, daß die Eigenwerte die Form

$$\Lambda_j(b) = b^{\lambda_j} \tag{5.10}$$

haben. Unter der Annahme, daß die Eigenvektoren $\mathcal{Q}_j$ einen vollständigen Satz bilden, läßt sich $\mathcal{H}$ entwickeln:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^* + \sum_j g_j\mathcal{Q}_j \tag{5.11}$$

Die g_j werden dabei als *Skalenfelder* und die $\mathcal{Q}_j$ als *Skalenoperatoren* bezeichnet. Unter l-maliger Anwendung der RG geht dann $\mathcal{H}[g_1, g_2, \cdots, g_n]$ in $\mathcal{H}'[b^{l\lambda_1}g_1, b^{l\lambda_2}g_2, \cdots, b^{l\lambda_n}g_n]$ über. Für die freie Energie folgt unter Benutzung von (5.6):

$$f(g_1, \cdots, g_n) = b^{-ld}f(b^{l\lambda_1}g_1, \cdots, b^{l\lambda_n}g_n) \tag{5.12}$$

Dies bedeutet, daß sich das System abhängig von λ_j unterschiedlich verhält:

1) $\lambda_j > 0$: Die durch g_j angekoppelte Störung ist relevant und führt das System unter RG-Transformation vom Fixpunkt weg.

2) $\lambda_j < 0$: Die hiermit verbundene Störung ist irrelevant, und die RG-Transformation führt zum Fixpunkt hin. Solche Störungen können ignoriert werden (*Universalität*).

3) $\lambda_j = 0$: Eine solche Störung wird als marginal bezeichnet. Die Linearisierung reicht nicht aus, um zu entscheiden, ob die Störung anwächst oder verschwindet. Ein typischer Effekt einer marginalen Störung sind logarithmische Korrekturen zu dem üblichen algebraischen Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes.

5.2 Kritische Phänomene

Ein besonders interessanter Teil der Festkörperphysik ist die Untersuchung von Systemen in der Nähe eines kritischen Punktes. Da Störungstheorie in diesem Fall nicht anwendbar ist, waren kritische Phänomene lange Zeit unverstanden. Dies änderte sich erst Anfang der 70er Jahre, als Wilson u.a. die RG ausarbeiteten und damit einen theoretischen Zugang schufen.

Eines der bekanntesten Systeme, das einen kritischen Punkt besitzt, ist der dreidimensionale Ferromagnet. Ohne uns um die Details zu kümmern, wollen wir an diesem Beispiel exemplarisch kritisches Verhalten studieren und die wichtigsten Größen definieren. Ausgangspunkt ist das sich in Abhängigkeit von Magnetfeld H und Temperatur T ergebende Phasendiagramm (5.1).

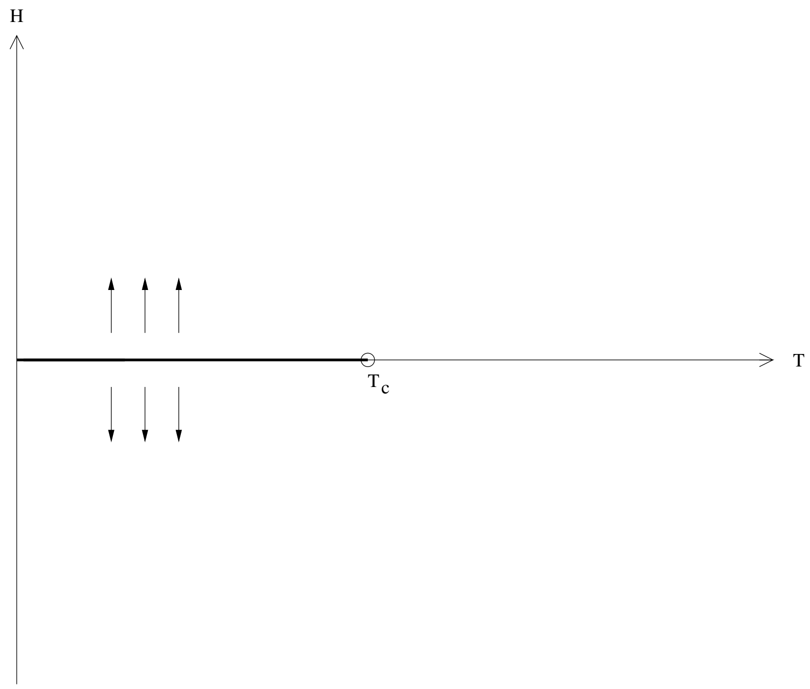

Abbildung 5.1: Phasendiagramm eines Ferromagneten

Wie schematisch dargestellt, gibt es für $T < T_c$ zwei Phasen. Wählt man wie üblich die z-Achse als Quantisierungsachse, so ergibt sich für $H > 0$ ein ferromagnetischer Zustand, bei dem die Spins entlang dieser Achse ausgerichtet sind, während für $H < 0$ die Spins in die entgegengesetzte Richtung zeigen [4]. Genau bei $H = 0$ verläuft eine Linie von Phasenübergängen erster Ordnung, die am kritischen Punkt T_c endet. Auf dieser Linie existiert eine spontane Magnetisierung, die als

$$M_0(T) = \lim_{H \to 0+} M(H,T) \tag{5.13}$$

[4] Auch dieses Bild ist natürlich stark vereinfacht.

definiert ist. Da wir uns für das Verhalten in der Nähe von T_c interessieren, definieren wir noch

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \tag{5.14}$$

als charakteristische Temperatur. Die spontane Magnetisierung knapp unterhalb der kritischen Temperatur läßt sich dann durch ein Potenzgesetz beschreiben:

$$M_0(T) \propto |t|^{\beta} \tag{5.15a}$$

Dabei ist β ein Beispiel für einen *kritischen Exponenten*. Solche Potenzgesetze sind typisch für das Verhalten von Observablen in der Nähe eines kritischen Punktes. Wir definieren deshalb weitere kritische Exponenten für die folgenden Größen:

$$\begin{aligned}
\text{spezifische Wärme}: &\quad C(T) = |t|^{-\alpha} && (5.15b)\\
\text{Suszeptibilität}: &\quad \chi(T) = |t|^{-\gamma} && (5.15c)\\
\text{Magnetisierung bei } T = T_c: &\quad M(T = T_c) = H^{-\delta} && (5.15d)\\
\text{Greensche Funktion}: &\quad G(\boldsymbol{r}) = \frac{e^{-\boldsymbol{r}\xi}}{\boldsymbol{r}^{d-2+\eta}} && (5.15e)\\
\text{Korrelationslänge}: &\quad \xi = |t|^{-\nu} && (5.15f)
\end{aligned}$$

Die charakteristische Temperatur t und das Magnetfeld H sind *Skalenfelder*, die häufig relevant sind. Wir wollen jetzt in (5.11) das Skalenfeld $g_1 := t$ und das Skalenfeld $g_2 := H$ setzen. Aus dem Verhalten der freien Energie unter l-maliger Anwendung der RG, wie in (5.12) beschrieben, kann man dann auf einfache Weise Relationen zwischen den kritischen Exponenten und den zu t und H gehörigen Eigenwerten λ_1, λ_2 der RG erhalten. Diese Relationen lauten wie folgt:

$$\begin{aligned}
\alpha &= 2 - \frac{d}{\lambda_1} && (5.16a)\\
\beta &= \frac{d - \lambda_2}{\lambda_1} && (5.16b)\\
\gamma &= \frac{2\lambda_2 - d}{\lambda_1} && (5.16c)\\
\delta &= \frac{\lambda_2}{d - \lambda_2} && (5.16d)\\
\nu &= \frac{1}{\lambda_1} && (5.16e)\\
d - 2 + \eta &= 2(d - \lambda_2) = 2\, x_2 && (5.16f)
\end{aligned}$$

In der letzten Relation wurde noch die *Skalendimension* als $x_j = d - \lambda_j$ definiert.

Dies bedeutet, daß man aus den Skalendimensionen von algebraisch abfallenden Korrelationsfunktionen die Eigenwerte der RG-Transformation erhalten kann und daraus sämtliche kritische Exponenten! Vor allem ist es möglich durch einfaches Errechnen von Korrelationsfunktionen, Aussagen über die Relevanz oder Irrelevanz von Störungen im Sinne der RG zu treffen.

Einfach zu überprüfen anhand obiger Relationen, ist die Gültigkeit der folgenden *Skalengesetze*:

$$\gamma = \nu(2-\eta) \tag{5.17a}$$
$$\gamma = \beta(\delta-1) \tag{5.17b}$$
$$2 = \alpha+2\beta+2\gamma \tag{5.17c}$$
$$\nu d = 2-\alpha \tag{5.17d}$$

Im folgenden Kapitel wollen wir für die in Kapitel 4.2 vorgestellten Modelle gekoppelter Spinketten mit Hilfe dieser Relationen untersuchen, ob die Zwischenkettenkopplung eine relevante oder irrelevante Störung des Systems darstellt. Falls die Störung relevant ist, interessiert besonders der Response in der Grundzustandsenergie und der kritische Exponent für die entstehende Lücke. Wenn man das Skalenfeld jetzt wieder mit g bezeichnet, liest man aus obigen Gleichungen für die Änderung der Grundzustandsenergie

$$\boxed{\Delta E_0 \propto g^{\frac{d}{\lambda}} = g^{\frac{d}{d-x}}} \tag{5.18}$$

und für die entstehende Anregungslücke

$$\boxed{\Delta \propto \frac{1}{\xi} \propto g^{\frac{1}{\lambda}} = g^{\frac{1}{d-x}}} \tag{5.19}$$

ab.

Kapitel 6

Skalenargumente für gekoppelte Spinketten

Den drei Modellen in Kapitel 4.2 ist gemein, daß sie für $\delta = 1$ in eindimensionale Spinketten zerfallen. Da wir hier den Fall $s = 1/2$ betrachten, sind diese Spinketten kritisch. Setzt man $\delta = 1 - \epsilon$ mit $\epsilon \ll 1$, so ist ϵ ein kleiner Parameter, der die Ankopplung der Zwischenkettenkopplung an das kritische System beschreibt. Wir haben also genau die in (5.7) dargestellte Situation eines kritischen Hamiltonians mit einer kleinen Störung. Dabei ist jetzt ϵ das Skalenfeld und die Zwischenkettenkopplung stellt die Störung dar. Wir wollen nun im folgenden für die drei verschiedenen Modelle jeweils die Energie-Energie Korrelationsfunktion berechnen. Aus dieser erhält man die Skalendimension und damit den Eigenwert der RG-Transformation. Anhand dieses Eigenwertes läßt sich, wie im vorherigen Kapitel beschrieben, entscheiden, ob die Zwischenkettenkopplung eine relevante Störung darstellt und damit die Kritikalität zerstört oder ob diese irrelevant ist und das System kritisch bleibt.

Besonders kompliziert ist die Situation beim Mäandermodell. Hier treten auch zusätzliche Kopplungen innerhalb der Ketten auf. Wir werden feststellen, daß nicht sofort klar ist, was die Skalenargumente in diesem Fall bedeuten. Außerdem wollen wir noch ein weiteres Modell betrachten, das im Moment Gegenstand aktueller Forschung ist und ein Beispiel für eine marginale Zwischenkettenkopplung darstellt.

Konkret werden wir aus den zweidimensionalen Modellen jeweils zwei homogene Spinketten herausgreifen und die vom jeweiligen Modell abhängige Zwischenkettenkopplung als kleine Störung der beiden kritischen Ketten betrachten. Beginnen wollen wir dabei mit dem J_x/J_y-Modell, da in diesem Modell die einfachste Form der Zwischenkettenkopplung realisiert ist.

6.1 Das J_x/J_y-Modell

Bei dem in Abb.(4.5) dargestellten J_x/J_y-Modell verlaufen die stark gekoppelten Spinketten in x-Richtung, während die schwache Zwischenkettenkopplung in y-Richtung wirkt. Greift man zwei Spinketten mit der sie verbindenden Zwischenkettenkopplung heraus, so erhält man die in Abb.(6.1) dargestellte Konfiguration.

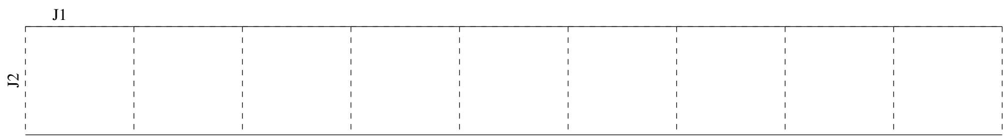

Abbildung 6.1: Zwei schwach gekoppelte Spin - 1/2 - Heisenbergketten

Aus dem in (4.3) angegebenen Hamiltonian des Systems entnimmt man, daß der Hamiltonoperator der Zwischenkettenkopplung wie folgt lautet:

$$\tilde{H} = J_y \sum_r \boldsymbol{S}_r^1 \boldsymbol{S}_r^2 \tag{6.1}$$

Dabei numeriere der obere Index die beiden Ketten. Die Energie-Energie Korrelationsfunktion ist dann wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} < \sigma_0 \sigma_r > &= J_y^2 \sum_{\alpha,\beta} < S_0^{\alpha,1} S_0^{\alpha,2} S_r^{\beta,1} S_r^{\beta,2} > \\ &= J_y^2 \sum_{\alpha,\beta} < S_0^{\alpha,1} S_r^{\beta,1} >< S_0^{\alpha,2} S_r^{\beta,2} > \\ &= J_y^2 \sum_{\alpha} < S_0^{\alpha,1} S_r^{\alpha,1} >< S_0^{\alpha,2} S_r^{\alpha,2} > \\ &= \frac{J_y^2}{3} < \boldsymbol{S}_0 \boldsymbol{S}_r >^2 = \frac{J_y^2}{3} \cdot \left(\frac{(-1)^r}{r} \right)^2 \propto \frac{1}{r^2} \end{aligned} \tag{6.2}$$

D.h., es gilt $2 = 2 \cdot x$, und damit ist die Skalendimension $x = 1$. Aus $x = D - \lambda$ und $D = 2$ folgt $\lambda = 1$. Die Zwischenkettenkopplung ist also eine relevante Störung. Die Skalenrelationen (5.18, 5.19) liefern nun für den Response in der Grundzustandsenergie und für die entstehende Anregungslücke bis auf logarithmische Korrekturen:

$$\text{Grundzustandenergie} \propto J_2^{\frac{D}{D-x}} = J_2^2 \tag{6.3}$$

$$\text{Anregungslücke} \propto |J_2|^{\frac{1}{D-x}} = |J_2| \tag{6.4}$$

Die Zwischenkettenkopplung führt also dazu, daß die Kritikalität zerstört wird und die entstehende Spinleiter ein gegaptes System ist. Die Lücke öffnet sich dabei linear mit der Zwischenkettenkopplung. Dieses Ergebnis, das wir hier

durch das naive Anwenden von Standardskalenargumenten erhalten haben, ist auch numerisch bestätigt worden [27]. In dem gleichen Artikel ist auch berechnet worden, daß die Lücke für drei gekoppelte Ketten verschwindet. Die hierzu aufgestellte RVB-Theorie läßt vermuten, daß dies für jede ungerade Zahl von gekoppelten Spinketten der Fall ist. Es stellt sich nun die Frage, was dies für unendlich viele schwach gekoppelte Ketten bedeutet. Hierzu kann man nur sagen, daß es möglich ist, daß mit zunehmender Anzahl von Ketten die Lücke immer kleiner wird und asymptotisch gegen Null geht. Dies muß der Fall sein, falls das zweidimensionale System für das gegebene Kopplungsverhältnis $R = \frac{J_y}{J_x}$ néelordnet. Dann ist nämlich die Korrelationslänge $\xi = \infty$ und damit die Lücke $\Delta \propto \frac{1}{\xi} = 0$. Sollte für sehr kleines R doch eine ungeordnete Phase existieren, so können wir wenigstens aus der Relevanz der Zwischenkettenkopplung schließen, daß diese Phase zweidimensionaler Natur ist.
Fazit: In jedem Fall ist auszuschließen, daß sich - wie teilweise fälschlich in der Literatur zu finden - das System für sehr kleine R wie ein System von ungekoppelten eindimensionalen Spinketten verhält. Ein Übergang von zwei- zu eindimensionalem Verhalten findet nicht statt!

6.2 Das Treppenmodell

Betrachtet man noch einmal die Abb. (4.3), so sind Treppenstufen zu erkennen (durchgezogene Bonds), die von links unten nach rechts oben durch das Modell verlaufen. Diese Ketten bestehen aus Spins, die mit der Stärke $J \cdot (1+\delta)$ antiferromagnetisch gekoppelt sind. Die gestrichelten Bonds stellen dann für δ nahe Eins die schwache Zwischenkettenkopplung mit Stärke $J \cdot (1-\delta)$ dar. Nimmt man wieder zwei Ketten heraus und zeichnet sie in ein um 45^0 gedrehtes Koordinatensystem, so erhält man die in Abb. (6.2) dargestellte Konfiguration.

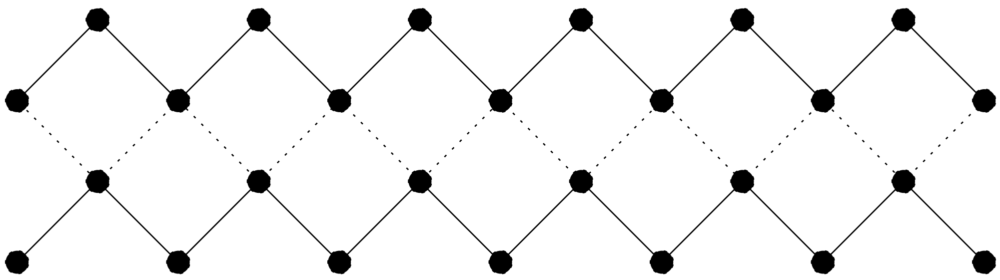

Abbildung 6.2: Zwei gekoppelte Zickzackketten des Treppenmodells

Im thermodynamischen Limes kann man die Ketten glattziehen und erhält dann das in (6.3) abgebildete System.

Aus dem Hamiltonian des Modells (4.1) entnimmt man, daß die Zwischenket-

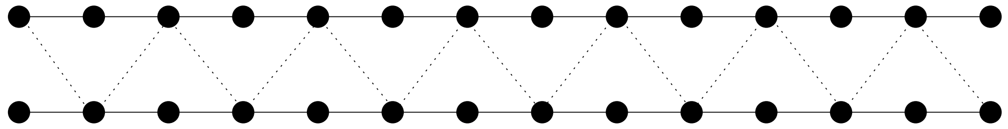

Abbildung 6.3: Zwei glattgezogene Ketten mit Zickzackkopplung

tenkopplung hier durch

$$\tilde{H} = \tilde{J} \sum_{r=1}^{N/2} \boldsymbol{S}_{2r}^{1} (\boldsymbol{S}_{2r-1}^{2} + \boldsymbol{S}_{2r+1}^{2}) \tag{6.5}$$

gegeben ist, wobei der untere Index wieder den Gitterplatz und der obere die Kette numeriere. Nun errechnen wir wieder die Energie-Energie Korrelationsfunktion:

$$\begin{aligned} < \sigma_1 \sigma_{r+1} > &= \tilde{J}^2 \sum_{\alpha,\beta} < S_2^{\alpha,1} \left(S_1^{\alpha,2} + S_3^{\alpha,2} \right) S_{2r+2}^{\beta,1} \left(S_{2r+1}^{\beta,2} + S_{2r+3}^{\beta,2} \right) > \\ &= \tilde{J}^2 \sum_{\alpha} < S_2^{\alpha,1} S_{2r+1}^{\alpha,1} > [< S_1^{\alpha,2} S_{2r+1}^{\alpha,2} > + < S_1^{\alpha,2} S_{2r+3}^{\alpha,2} > \\ &\qquad + < S_3^{\alpha,2} S_{2r+1}^{\alpha,2} > + < S_3^{\alpha,2} S_{2r+3}^{\alpha,2} >] \\ &\propto \tilde{J}^2 \frac{(-1)^{2r}}{2r} \left[\frac{(-1)^{2r}}{2r} + \frac{(-1)^{2r+2}}{2r+2} + \frac{(-1)^{2r-2}}{2r-2} + \frac{(-1)^{2r}}{2r} \right] \\ &= \tilde{J}^2 \frac{1}{2r} \frac{8r^2 - 4}{r(4r^2 - 4)} \propto \frac{r^2}{r^4} = \frac{1}{r^2} \end{aligned} \tag{6.6}$$

Die Skalendimension ist deshalb wie beim J_x/J_y-Modell gleich Eins. Wir haben es also wieder mit einer relevanten Störung zu tun; d.h., das Modell zeigt auch für infinitesimale Zwischenkettenkopplung kein quasi eindimensionales Verhalten. Es entsteht eine Anregungslücke, die sich wieder linear mit $\tilde{J}$ öffnet.

6.3 Das Mäandermodell

Bei der zum Mäandermodell gehörigen Abbildung (4.4) sind mäandrierende Ketten, gebildet aus Bonds der Kopplungsstärke $J \cdot (1+\delta)$, zu erkennen. Zeichnet man zwei solcher Ketten und die zugehörigen schwachen Kopplungen $J \cdot (1-\delta)$, so erhält man Abb. (6.4).

Hier fällt auf, daß die Störung nicht nur in einer Zwischenkettenkopplung besteht, sondern auch in einer Kopplung der überübernächsten Nachbarn einer Kette. Um dies zu verdeutlichen, sind die beiden Ketten in Abb. (6.5) noch einmal glattgezogen gezeichnet worden.

Wir wollen nun zuerst die Störung durch die Kopplung zwischen überübernächsten Nachbarn innerhalb einer Kette untersuchen. Ausgehend von der kritischen

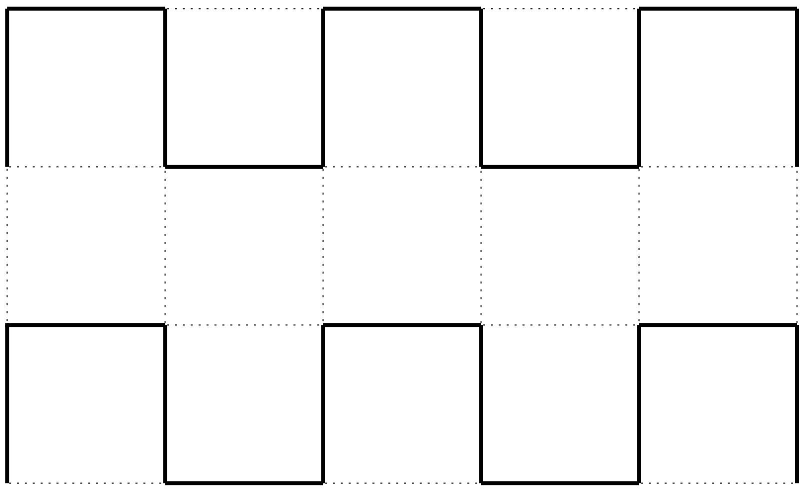

Abbildung 6.4: Zwei Ketten des Mäandermodells

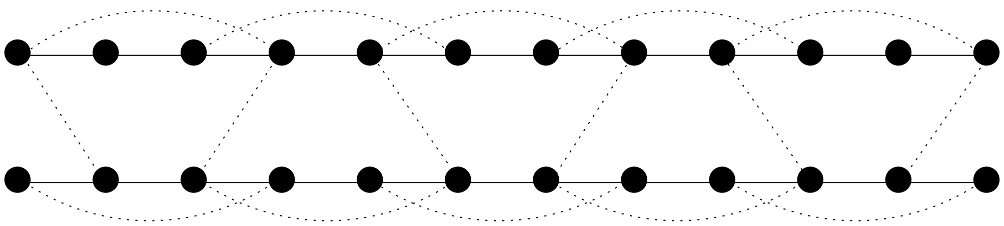

Abbildung 6.5: Zwei glattgezogene Ketten des Modells

Heisenbergkette mit s=1/2 lautet der Hamiltonoperator der Störung:

$$\tilde{H} = \tilde{J} \sum_{r=0}^{N/2} \boldsymbol{S}_{2r} \boldsymbol{S}_{2r+3} \tag{6.7}$$

Die zugehörige Energie-Energie Korrelationsfunktion errechnet sich dann wie folgt:

$$\begin{aligned} < \sigma_0 \sigma_r > &= \tilde{J}^2 < \boldsymbol{S}_0 \boldsymbol{S}_3 \boldsymbol{S}_{2r} \boldsymbol{S}_{2r+3} > \\ &\propto \frac{(-1)^{2r}}{2r} \end{aligned} \tag{6.8}$$

Daß obige Korrelationsfunktion wie 1/r abfällt, läßt sich mit Hilfe konformer Feldtheorie begründen. Im Prinzip stellt sich dabei heraus, daß sich $\langle \boldsymbol{S}_0 \boldsymbol{S}_3 \boldsymbol{S}_{2r} \boldsymbol{S}_{2r+3} \rangle$ genauso verhält wie die Dimer-Dimer Korrelationsfunktion $\langle \boldsymbol{S}_0 \boldsymbol{S}_1 \boldsymbol{S}_r \boldsymbol{S}_{r+1} \rangle$. Von dieser weiß man aber, daß sie wie 1/r abfällt [1]. Um dies wirklich zu zeigen, wäre ein kleiner Exkurs in konformer Feldtheorie nötig. Dies würde hier aber zu weit führen, weshalb es bei obiger kurzer Erläuterung bleiben soll. Es ergibt sich somit eine Skalendimension von $x = 1/2$, so daß auch diese Störung relevant ist. Der Eigenwert der RG ist dann durch $\lambda = D - x = 3/2$ gegeben.

Die Frage ist nun, was Relevanz in diesem Fall bedeutet. Nimmt man die gewöhnlichen Skalenargumente bedenkenlos hin, so würde man sagen, daß die zuerst sehr kleine Störung immer weiter anwächst, bis die schwachen Bonds in Abb.(6.4) sogar stärker sind als die Bonds entlang der Kette. Dies ergäbe dann ein System von schwach gekoppelten Singuletts und damit eine Lücke im Anregungsspektrum. Andererseits beschreibt λ nur den Eigenwert der um den kritischen Punkt linearisierten RG-Transformation (5.8). Diese Linearisierung ist aber nur in einer Umgebung des kritischen Hamiltonians korrekt und kann nicht einfach beliebig weit fortgesetzt werden. Mit Hilfe dieser einfachen Argumente können wir also nur schließen, daß die infinitesimale Störung anwächst, solange wir noch in der Nähe des Fixpunktes sind. Ob die Kopplung dann noch weiter wächst und das effektive Modell tatsächlich ein System schwach gekoppelter Singuletts ist oder ob wir in einen dazwischenliegenden Fixpunkt laufen, kann so nicht geklärt werden. Auch andere einfache Argumente helfen hier nicht weiter. So kann man sich zwar die kritische Heisenbergkette als ein System vorstellen, indem eine kurzreichweitige Néelordnung herrscht. In diesem Bild wäre die hinzugefügte Kopplung nicht frustrierend, würde also die Ordnung nicht stören, selbst wenn die Kopplungsstärke der Störung in der Größenordnung der Kopplung innerhalb der Kette liegen sollte. Andererseits kann man sich die Kette auch aus Singuletts aufgebaut vorstellen (RVB-Bild). Dann ist klar, daß die überübernächste Nachbarkopplung zu einer Lücke führt. Das Problem ist, daß keines der beiden Bilder das System wirklich korrekt beschreibt. Der reale Grundzustand liegt vielmehr dazwischen. Deshalb ist dieses Modell auch numerisch mit Hilfe der Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG) untersucht

[1] Vgl. S.15

worden [2]. Die Resultate der DMRG sollen im nächsten Abschnitt besprochen werden.

Zuvor bleibt aber noch die Zwischenkettenkopplung zu untersuchen, wobei wir davon ausgehen, daß innerhalb jeder Kette sich die Korrelationsfunktionen wie die der gewöhnlichen Heisenbergkette verhalten. Die Zwischenkettenkopplung ist durch

$$\tilde{H} = \tilde{J} \sum_{r=0}^{N/4} \{ \boldsymbol{S}^1_{4r+1} \boldsymbol{S}^2_{4r} + \boldsymbol{S}^1_{4r+2} \boldsymbol{S}^2_{4r+3} \} \tag{6.9}$$

gegeben. Die Energie-Energie Korrelationsfunktion lautet dann:

$$\begin{aligned}
< \sigma_0 \sigma_r > &= \tilde{J}^2 < \left(\boldsymbol{S}^1_{4r+1} \boldsymbol{S}^2_{4r} + \boldsymbol{S}^1_{4r+2} \boldsymbol{S}^2_{4r+3} \right) \left(\boldsymbol{S}^1_{4r+1} \boldsymbol{S}^2_{4r} + \boldsymbol{S}^1_{4r+2} \boldsymbol{S}^2_{4r+3} \right) > \\
&= \tilde{J}^2 \{ < \boldsymbol{S}^1_1 \boldsymbol{S}^1_{4r+1} >< \boldsymbol{S}^2_0 \boldsymbol{S}^2_{4r} > + < \boldsymbol{S}^1_1 \boldsymbol{S}^1_{4r+2} >< \boldsymbol{S}^2_0 \boldsymbol{S}^2_{4r+3} > \\
&\quad + < \boldsymbol{S}^1_2 \boldsymbol{S}^1_{4r+1} >< \boldsymbol{S}^2_3 \boldsymbol{S}^2_{4r} > + < \boldsymbol{S}^1_2 \boldsymbol{S}^1_{4r+2} >< \boldsymbol{S}^2_3 \boldsymbol{S}^2_{4r+3} > \} \\
&\propto \tilde{J}^2 \left\{ \frac{(-1)^{4r}}{4r} \frac{(-1)^{4r}}{4r} + \frac{(-1)^{4r+1}}{4r+1} \frac{(-1)^{4r+3}}{4r+3} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(-1)^{4r-1}}{4r-1} \frac{(-1)^{4r-3}}{4r-3} + \frac{(-1)^{4r}}{4r} \frac{(-1)^{4r}}{4r} \right\} \\
&\propto \frac{r^6}{r^8} = \frac{1}{r^2}
\end{aligned} \tag{6.10}$$

Die Zwischenkettenkopplung hat also genau wie die des Treppenmodells und des J_x/J_y-Modells die Skalendimension $x = 1$.

6.3.1 DMRG für die Kette mit NNNN-Kopplung

Da durch die angeführten Skalenargumente nicht klar geworden ist, wie der Grundzustand der Spin-1/2 Heisenbergkette mit einer zusätzlichen, kleinen NNNN-Kopplung aussieht, wollen wir dieses System auch noch numerisch untersuchen. Bei eindimensionalen Quantensystemen bietet sich hierzu die DMRG an. Bei dieser handelt es sich um eine Renormierungsgruppe im Ortsraum, die allerdings nicht exakt ist, da die Basis des Hilbertraumes immer wieder auf eine konstante Größe reduziert wird. Konkret bedeutet dies, daß man mit dem Hamiltonian H_L eines endlichen Systems der Länge L startet und dann das System durch Hinzufügen eines einzelnen Spins mit der entsprechenden Wechselwirkung auf die Länge $L + 1$ vergrößert. Heftet man zwei solcher vergrößerten Systeme zusammen, so erhält man den sogenannten Superblock. Den Hamiltonoperator des Superblocks diagonalisiert man dann und approximiert den Grundzustand durch eine reduzierte Basis. Die Zustände, die man für eine optimale Approximation benötigt, erhält man aus einer geeigneten Dichtematrix [3]. Der Hamiltonoperator des Systems der Länge $L + 1$ wird jetzt in dieser reduzierten Basis

[2] Die eigentlichen numerischen Berechnungen hat Rainer Raupach durchgeführt, bei dem ich mich dafür bedanken möchte.

[3] Deshalb wird dieses Verfahren auch als Dichtematrix-Renormierungsgruppe bezeichnet. Die technischen Details dazu finden sich in [28].

dargestellt und dann zu H_L umbenannt. So erhält man ein iteratives Verfahren, das die Systemgröße sukzessive vergrößert.

Bei dem hier verwendeten Programm handelt es sich um eine Abwandlung dieses Verfahrens, das als Transfermatrix-DMRG bezeichnet wird. Mit der T-DMRG ist auch die Untersuchung der Thermodynamik eindimensionaler Quantensysteme möglich. Ausgangspunkt bildet die sogenannte *Trotter-Transformation*, die letztlich eine Abbildung des d dimensionalen Quantensystems auf ein d+1 dimensionales klassisches System erlaubt. Die zusätzliche Dimension entspricht dabei der inversen Temperatur [4]. Durch die *Quantentransfermatrix* ist es möglich, den räumlichen Limes $L \to \infty$ exakt durchzuführen. Um das System in Richtung der inversen Temperatur zu vergrößern, nutzt man hingegen die schon beschriebene DMRG.

Dieses Verfahren ist eigentlich nicht optimal, um Grundzustandseigenschaften zu untersuchen. Hierzu eignet sich ein gewöhnliches DMRG-Verfahren, bei dem man, wie oben beschrieben, die Raumrichtung sukzessive vergrößert, besser. Dann ist es nämlich möglich, aus dem Skalenverhalten der Lücke zwischen Grundzustand und erstem angeregtem Zustand gegenüber der inversen Länge des Systems direkt abzulesen, ob das unendlich lange System eine Lücke hat oder nicht [27]. Da ein solches Programm leider nicht zur Verfügung stand, müssen wir versuchen, diese Frage mit Hilfe thermodynamischer Größen zu beantworten. Dies ist auch generell möglich, denn für ein lückenloses, kritisches System skaliert die freie Energie [5] für kleine Temperaturen wie

$$f(T) \propto e_0 - a \cdot T^2 \quad , \tag{6.11}$$

während sie sich für ein System mit Gap wie

$$f(T) \propto e_0 - a \cdot T^{3/2} \, \mathrm{e}^{-\Delta/T} \tag{6.12}$$

verhält. Aus den Skalenargumenten wissen wir, daß eine sehr kleine Zwischenkettenkopplung $\tilde{J}$ durch den Renormierungsgruppenfluß in Richtung stärkerer Kopplung getrieben wird. Dieses Argument bleibt gültig, solange $\tilde{J}$ wesentlich kleiner als die NN-Kopplung J bleibt. Für die T-DMRG Berechnungen setzen wir deshalb $\tilde{J}/J = 0.25$. Dies ist zum einen so klein, daß in diesem Bereich das Skalenargument sicherlich noch gilt, zum anderen aber auch so groß, daß man eine Lücke - falls vorhanden - hoffentlich schon bemerkt. Desweiteren enthält die reduzierte Basis $m = 40$ Zustände, und der Trotter-Parameter ist auf $\epsilon = \beta/M = 0.05$ gesetzt. Für die freie Energie in Abhängigkeit von der in Einheiten von T/J gemessenen Temperatur ergibt sich dann der in Abb. (6.6) dargestellte Verlauf.

Es zeigt sich nun, daß ein quadratischer Fit das Tieftemperaturverhalten der freien Energie unabhängig vom Fitbereich nicht beschreiben kann. Fittet man hingegen eine Funktion der Form (6.12), so ergibt sich eine gute Übereinstimmung. Dieser Fit ist in der oberen rechten Ecke von Abb. (6.6) dargestellt. Die

[4]Die Details dieser Transformation werden in Kapitel 7.2 noch einmal ausführlich erläutert werden.

[5]Dies ist die geeignete Größe, da sie in der T-DMRG direkt berechnet wird.

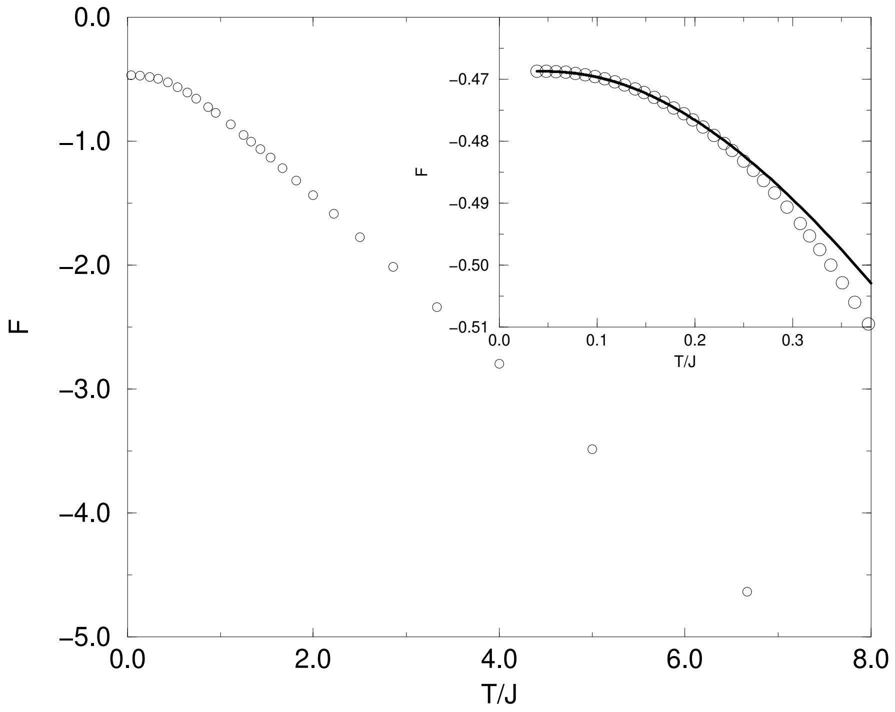

Abbildung 6.6: DMRG-Daten für die freie Energie des Mäandermodells

Parameter dazu lauten:

$$\begin{aligned} e_0 &= -0.468709 \pm 0.000001 \\ a &= 0.255 \pm 0.001 \\ \Delta &= 0.212 \pm 0.002 \end{aligned} \tag{6.13}$$

Dabei entsprechen die angegebenen Fehler nicht den mittleren quadratischen Fehlern, sondern stammen aus einer Variation des Fitbereichs von $T/J \in [0, 0.07]$ bis $T/J \in [0, 0.15]$, was sinnvoller ist.

Die Kette mit zusätzlicher schwacher NNNN-Kopplung weist also tatsächlich eine Lücke auf, wie man es erwartet hätte, wenn man den Skalenargumenten bedenkenlos glaubt! Die nächste interessante Frage ist jetzt natürlich, was passiert, wenn man zwei solcher Ketten zusammenkoppelt, also wieder zu der in Abb. (6.4) dargestellten Konfiguration übergeht. Da die Zwischenkettenkopplung genauso wie die NNNN-Kopplung relevant ist, könnte man meinen, daß hier eine eindimensionale Struktur übrigbleibt und deshalb das Spektrum wieder lückenlos ist. Andererseits sind an diese Kette aus ursprünglich schwachen Bonds einzelne Singuletts angehängt, die eventuell die Kritikalität zerstören könnten. Auch hier können letztlich wohl nur numerische Berechnungen für

Klarheit sorgen. Eine solche Numerik müßte innerhalb der DMRG sogar noch möglich sein und stellt eine interessante Aufgabe für die Zukunft dar.

Was man aber auch für dieses Modell wieder mit Sicherheit sagen kann, ist, daß es keinen Übergang von zwei- zu eindimensionalem Verhalten gibt!

6.4 Ein weiteres Modell

Bei den drei bisher betrachteten Modellen war die Skalendimension der Zwischenkettenkopplung jeweils gleich Eins gewesen. D.h., die Kopplung war relevant, und für das J_x/J_y-Modell und für das Treppenmodell entstand eine Lücke. Es gibt aber auch verwandte Modelle, die aus gekoppelten Ketten aufgebaut sind und bei denen die Zwischenkettenkopplung marginal oder sogar irrelevant ist. Eines dieser Modelle, das auch Gegenstand aktueller Forschung ist [35, 36, 37, 38], soll hier noch kurz betrachtet werden.

Dieses Modell ist ähnlich aufgebaut wie das J_x/J_y-Modell, wobei zusätzlich noch eine Kopplung vorhanden ist, die auf den Diagonalen des Quadratgitters verläuft. Dargestellt ist dies in Abb. (6.7).

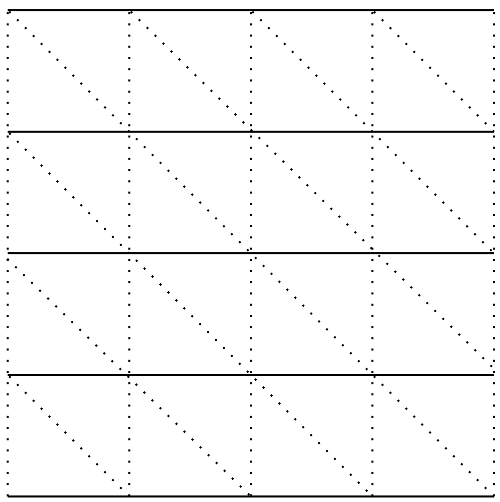

Abbildung 6.7: Das Modell mit zusätzlicher Diagonalkopplung

Verschiebt man das Gitter ein wenig, so erhält man Ketten, die durch eine zickzackförmig verlaufende Zwischenkettenkopplung verbunden sind. Greift man nun wieder zwei Spinketten heraus, so ergibt sich die in Abb. (6.8) dargestellte Struktur. Das Interessante ist nun, daß diese beiden Ketten mit der sie verbindenden Zickzackkopplung völlig äquivalent zu **einer** Spinkette mit übernächster Nachbarwechselwirkung (Abb. 6.9) sind. Dieses Modell ist für den Fall einer gegenüber der Nächstnachbarkopplung kleinen Übernächstnachbarkopplung schon sehr gut untersucht. Hier ergibt sich aber genau der umgekehrte Fall, d.h., die Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn ist viel größer als die zwischen nächsten ($J_1 \ll J_2$)!

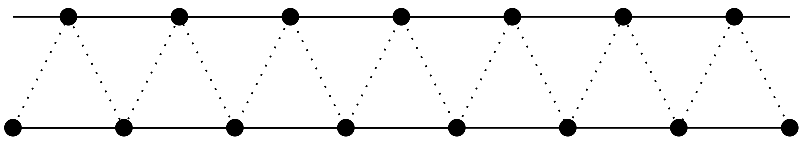

Abbildung 6.8: 2 Ketten mit zickzackförmiger Kopplung

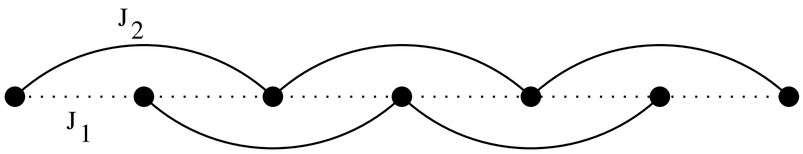

Abbildung 6.9: Die Spinkette mit übernächster Nachbarwechselwirkung

Gehen wir von Darstellung (6.8) aus, so hat der Hamiltonian der Störung die Form:

$$H = J_2 \sum_r \boldsymbol{S}_r^1 (\boldsymbol{S}_r^2 + \boldsymbol{S}_{r+1}^2) \tag{6.14}$$

Wie üblich kann man jetzt wieder die Energie-Energie Korrelationsfunktion berechnen:

$$\begin{aligned}
< \sigma_0 \sigma_r > &= J_2^2 \sum_{\alpha,\beta} < S_0^{\alpha,1} \left(S_0^{\alpha,2} + S_0^{\alpha,2} \right) \cdot S_r^{\beta,1} \left(S_r^{\beta,2} + S_{r+1}^{\beta,2} \right) > \\
&= J_2^2 \sum_{\alpha,\beta} < S_0^{\alpha,1} S_r^{\beta,1} >< \left(S_0^{\alpha,2} + S_1^{\alpha,2} \right) \left(S_r^{\beta,2} + S_{r+1}^{\beta,2} \right) > \\
&= J_2^2 \sum_{\alpha} < S_0^{\alpha,1} S_r^{\alpha,1} > [< S_0^{\alpha,2} S_r^{\alpha,2} > + < S_0^{\alpha,2} S_{r+1}^{\alpha,2} > \\
&\quad + < S_1^{\alpha,2} S_r^{\alpha,2} > + < S_1^{\alpha,2} S_{r+1}^{\alpha,2} >] \\
&\propto J_2^2 \cdot \frac{(-1)^r}{r} \left(\frac{(-1)^r}{r} + \frac{(-1)^{r+1}}{r+1} + \frac{(-1)^{r-1}}{r-1} + \frac{(-1)^r}{r} \right) \\
&= J_2^2 \cdot \frac{1}{r} \left(\frac{2}{r} - \frac{2r}{r^2-1} \right) = J_2^2 \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{-2}{r^3 - r} \\
&\propto \frac{1}{r^4} = \frac{1}{r^{2x}}
\end{aligned}$$

Damit folgt für die Skalendimension $x = 2$ und damit $\lambda = D - x = 0$. Die Zwischenkettenkopplung stellt also eine marginale Störung des Systems dar. Aus diesem einfachen Skalenargument läßt sich nicht schließen wie das System auf die Zwischenkettenkopplung reagiert. Vor allem bleibt auch die Frage unbeantwortet, ob schon bei infinitesimaler Zwischenkettenkopplung ein Gap im

Anregungsspektrum ensteht oder nicht. Weitergehende Untersuchungen zeigen, daß die zusätzliche Kopplung marginal relevant für den antiferromagnetischen Fall ist [35]. Dies bedeutet, daß die Lücke exponentiell klein ist:

$$\Delta = \mathrm{e}^{-const \cdot J_2/J_1} \tag{6.15}$$

In der Praxis wäre diese Lücke für $\frac{J_2}{J_1} \gg 1$ so klein, daß das System von einem lückenlosen, kritischen System kaum oder gar nicht mehr zu unterscheiden wäre.

Solche Systeme mit marginalen oder sogar irrelevanten Zwischenkettenkopplungen zeigen also tatsächlich einen Übergang von zwei- zu (quasi)eindimensionalem Verhalten. Ist die Zwischenkettenkopplung dagegen wie beim J_x/J_y-, Treppen- und Mäandermodell relevant, so ist der Grundzustand - unabhängig davon, ob es sich um einen geordneten oder ungeordneten Zustand handelt - immer zweidimensionaler Natur!

Kapitel 7

Das nlσ-Modell

In Kapitel 3.3 hatten wir festgestellt, daß der zweidimensionale, isotrope Heisenbergantiferromagnet mit $s = 1/2$ offensichtlich einen néelartigen Grundzustand hat. Eine solche langreichweitige Ordnung bedeutet, daß die kontinuierliche SU(2)-Spinsymmetrie gebrochen ist. Symmetriebrechung führt aber immer zu masselosen Anregungen, den sogenannten *Goldstone-Bosonen.* Für den speziellen Fall der gebrochenen SU(2)-Symmetrie erhält man zwei solcher masselosen Goldstone-Moden und eine massive Mode. Wir wollen nun um den klassischen Néelzustand entwickeln. Bei einer effektiven Theorie der niedrigliegenden Anregungen sollten dann die Fluktuationen der Amplitude des Ordnungsparameterfeldes $\boldsymbol{m}$ - diese entsprechen der massiven Mode - eingefroren sein. Die Fluktuationen $\boldsymbol{l}$ der Richtung des Ordnungsparameterfeldes sind dann orthogonal und entsprechen den beiden Goldstone-Moden. Diese Überlegungen lassen sich auch auf den Fall einer gebrochenen O(N)-Symmetrie verallgemeinern. In diesem Fall gibt es immer noch ein Ordnungsparameterfeld, dessen Amplitude festgehalten wird, hinzu kommen jedoch jetzt $N-1$ Goldstone-Bosonen.

Der zugehörige effektive Lagrangian ist dann der des nlσ-Modells und lautet:

$$\boxed{\mathcal{L} = \frac{1}{2g}\left(\partial_\mu \boldsymbol{m}\right)^2} \tag{7.1}$$

Wobei die Zwangsbedingung

$$\boxed{\sum_i^N |m^i(x)|^2 = 1} \tag{7.2}$$

gilt. Der Kopplungsparameter g ist für den isotropen Heisenbergantiferromagneten durch $g = 2/s$ gegeben.

Um zu dieser effektiven Theorie zu gelangen, hat man letztlich den Spin in der Entwicklung als klassischen Vektor $\boldsymbol{S}_i \approx s \cdot \boldsymbol{n}_i \approx \pm s \cdot \boldsymbol{m}_i + \boldsymbol{l}_i$ aufgefaßt. Deshalb ist das nlσ-Modell erst einmal auch nur für große s das korrekte effektive Modell. Es wird sich aber zeigen, daß viele der Resultate auch bei beliebigem s gültig bleiben. Um jetzt auch die dimerisierten Modelle auf ein nlσ-Modell abzubilden, ist es notwendig, *spinkohärente Zustände* und *Pfadintegrale* einzuführen. Dies geschieht in den nächsten beiden Abschnitten, die keine eigenständigen Rechnungen enthalten und sich hauptsächlich an [13] orientieren.

7.1 Spinkohärente Zustände

Ähnlich wie man für Bosonen und Fermionen kohärente Zustände einführt, um zu einer Pfadintegraldarstellung zu gelangen, kann man auch für Spins solche Zustände definieren. Diese sogenannten *spinkahärenten Zustände* wurden zuerst von Wiegmann [39] und Fradkin & Stone [40] eingeführt [1].

Sei nun ein System mit Spinquantenzahl s gegeben. Dann gibt es hierzu 2s+1 Zustände, die wie üblich mit $|s, m>$, $m = -s, -s+1, ..., s$ bezeichnet seien. Mit $\hbar = 1$ gilt dann:

$$S_z|s,m>= m|s,m>$$

$$\boldsymbol{S}^2|s,m>= s(s+1)|s,m>$$

Die 2s+1 Zustände transformieren sich unter SU(2). Die Generatoren der SU(2) in der Spin-s Darstellung sind dabei die drei Pauli-Matrizen. Der kohärente Zustand $|\boldsymbol{n}>$ geht nun durch eine SU(2)-Rotation aus $|s,s>$ hervor und ist wie folgt definiert:

$$|\boldsymbol{n}>:= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\boldsymbol{n}_0\times\boldsymbol{n})\boldsymbol{S}}|s,s> \tag{7.3}$$

Dabei ist $\boldsymbol{n}_0$ ein Einheitsvektor in Richtung der Quantisierungsachse, und der Winkel θ ist durch

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}_0 = \cos(\theta) \tag{7.4}$$

gegeben. Da $|s,m>$ eine Basis bildet, kann man den kohärenten Zustand $|\boldsymbol{n}>$ hiernach entwickeln:

$$|\boldsymbol{n}>= \sum_{m=-s}^{s} D(\boldsymbol{n})_{ms}|s,m> \tag{7.5}$$

Die Matrizen D erfüllen jetzt für drei beliebig gegebene Einheitsvektoren $\boldsymbol{n}_1$, $\boldsymbol{n}_2$, $\boldsymbol{n}_3$ die Beziehung

$$D(\boldsymbol{n}_1)D(\boldsymbol{n}_2) = D(\boldsymbol{n}_3)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Phi(\boldsymbol{n}_1,\boldsymbol{n}_2,\boldsymbol{n}_3)S_3}. \tag{7.6}$$

Dabei ist $\Phi(\boldsymbol{n}_1,\boldsymbol{n}_2,\boldsymbol{n}_3)$ das von den drei Einheitsvektoren aufgespannte sphärische Dreieck. Der Term $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Phi(\boldsymbol{n}_1,\boldsymbol{n}_2,\boldsymbol{n}_3)S_3}$ in (7.6) führt später in der Pfadintegraldarstellung für das Spinsystem gerade zu einem *topologischen Term*, der entscheidenden Einfluß auf die Eigenschaften des Systems hat!

[1]Einen Überblick über kohärente Zustände und ihre Verwendung für Pfadintegraldarstellungen bietet das Buch von Perelomov [41].

Für die hier eingeführten spinkohärenten Zustände gelten folgende Relationen (zu den Beweisen siehe [41]):

$$< \boldsymbol{n}_1|\boldsymbol{n}_2 >= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Phi(\boldsymbol{n}_1,\boldsymbol{n}_2,\boldsymbol{n}_3)s} \left(\frac{1+\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2}{2}\right)^s \tag{7.7a}$$

$$< \boldsymbol{n}|\boldsymbol{S}|\boldsymbol{n} >= s\boldsymbol{n} \tag{7.7b}$$

$$1 = \int d\mu(\boldsymbol{n})|\boldsymbol{n} >< \boldsymbol{n}| \tag{7.7c}$$

$$d\mu(\boldsymbol{n}) = \frac{2s+1}{4\pi} d^3n\ \delta(\boldsymbol{n}^2 - 1) \tag{7.7d}$$

7.2 Pfadintegraldarstellung

Mit Hilfe der spinkohärenten Zustände ist es nun möglich, eine Pfadintegraldarstellung für ein Spinsystem mit Hamiltonian H zu formulieren. Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Systems wird durch den Evolutionsoperator $O = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht}$ beschrieben. Die Zustandssumme lautet dann:

$$Z = \text{Spur}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht} \tag{7.8}$$

In dieser Darstellung bilden Ort und Zeit zusammen den Minkowski-Raum. Die Metrik ist also als $g_{ij} = \text{diag}(-1,1,1,1)$ gegeben. Dies ist in Rechnungen häufig unpraktisch, so daß man geschickterweise durch eine *Wick-Rotation* zu einer euklidischen Metrik übergeht. Konkret bedeutet dies hier, daß man eine imaginäre Zeit als $t = i\beta$ einführt, wodurch die Zustandssumme die Form

$$Z = \text{Spur}\ \mathrm{e}^{-\beta H} \tag{7.9}$$

annimmt. Nun wendet man wie üblich die *Trotter-Formel* an, d.h. man teilt das imaginäre Zeitintervall in N Teile der Länge δt und schreibt:

$$Z = \text{Spur}\ \mathrm{e}^{-\beta H} = \lim_{N\to\infty}\lim_{\delta t\to 0}(\mathrm{e}^{-\delta t\cdot H})^N \tag{7.10}$$

Dabei wird $N \cdot \delta t = \beta$ festgehalten. Zu jedem Zeitpunkt wird jetzt der Einheitsoperator in der Form (7.7c) eingesetzt, wobei das Integrationsmaß durch (7.7d) gegeben ist.

$$Z = \lim_{N\to\infty}\lim_{\delta t\to 0}\left(\prod_{k=1}^{N}\int d\mu(\boldsymbol{n}_k)\right)\left(\prod_{k=1}^{N} < \boldsymbol{n}(t_k)|e^{-\delta t\cdot H}|\boldsymbol{n}(t_{k+1}) >\right) \tag{7.11}$$

Da δt im Limes einem infinitesimal kleinem Zeitintervall entspricht, ist es zulässig, die Näherung $\mathrm{e}^{-\delta t \cdot H} \approx 1 - \delta t \cdot H$ zu verwenden [2]. Die gleiche Näherung führt zu

$$< \boldsymbol{n}(t_k)|H|\boldsymbol{n}(t_{k+1}) > \approx < \boldsymbol{n}(t_k)|\boldsymbol{n}(t_{k+1}) >< \boldsymbol{n}(t_k)|H|\boldsymbol{n}(t_k) > \ . \tag{7.12}$$

Damit erhalten wir:

$$Z = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \delta t \to 0}} \left(\prod_{k=1}^{N} \int d\mu(\boldsymbol{n}_k) \right) \left(\prod_{k=1}^{N} \left[< \boldsymbol{n}(t_k)|\boldsymbol{n}(t_{k+1}) > - \delta t < \boldsymbol{n}(t_k)|H|\boldsymbol{n}(t_k) > \right] \right) \tag{7.13}$$

Das innere Produkt der spinkohärenten Zustände $< \boldsymbol{n}(t_k)|\boldsymbol{n}(t_{k+1}) >$ läßt sich nun gemäß der Relation (7.7a) berechnen. Schreibt man außerdem $1 - \delta t \cdot H$ wieder als $\mathrm{e}^{-\delta t \cdot H}$, so ergibt sich letztlich:

$$Z = \int D\boldsymbol{n}\, \mathrm{e}^{-S_E[\boldsymbol{n}]} \tag{7.14a}$$

Dabei ist das Integrationsmaß als

$$D\boldsymbol{n} = \prod_{k=1}^{N} d\mu(\boldsymbol{n}_k) \tag{7.14b}$$

und die euklidische Wirkung als

$$\begin{aligned} S_E[\boldsymbol{n}] \quad = \quad & \sum_{k=1}^{N} \left(- \mathrm{i} s \Phi\left(\boldsymbol{n}(t_k), \boldsymbol{n}(t_{k+1}), \boldsymbol{n}_0\right) - s \ln\left(\frac{1 + \boldsymbol{n}(t_k) \cdot \boldsymbol{n}(t_{k+1})}{2} \right) \right. \\ & \left. + < \boldsymbol{n}(t_k)|H|\boldsymbol{n}(t_k) > \right) \end{aligned} \tag{7.14c}$$

definiert. Erstaunlich ist, daß in der euklidischen Wirkung ein komplexer Term auftritt. Da $\Phi\left(\boldsymbol{n}\left(t_k\right), \boldsymbol{n}\left(t_{k+1}\right), \boldsymbol{n}_0\right)$ nach Definition die Fläche des von den drei Einheitsvektoren aufgespannten sphärischen Dreiecks ist, ergibt die Summe über diese Flächen gerade die Fläche der Kappe, die durch die Trajektorie von $\boldsymbol{n}(t)$ begrenzt wird. Dieser Term heißt *Wess-Zumino Term* und wird mit $S_{WZ}[\boldsymbol{n}]$ bezeichnet.

Wenn nun $\boldsymbol{n}(t,\tau)$ eine beliebige Parametrisierung der Kappe ist, die den Randbedingungen

$$\boldsymbol{n}(t,0) = \boldsymbol{n}(t) \qquad ; \qquad \boldsymbol{n}(t,1) = \boldsymbol{n}_0 \qquad ; \qquad \boldsymbol{n}(0,\tau) = \boldsymbol{n}(\beta,\tau) \tag{7.15}$$

genügt, wobei $t \in [0,\beta]$ und $\tau \in [0,1]$, so läßt sich der topologische Term als

$$S_{WZ}[\boldsymbol{n}] = \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\ \boldsymbol{n}(t,\tau) \cdot \left(\partial_t \boldsymbol{n}(t,\tau) \times \partial_\tau \boldsymbol{n}(t,\tau)\right) \tag{7.16}$$

[2] Zur Berechtigung dieser Näherungen und den mathematischen Feinheiten siehe [42]

schreiben. Betrachtet man jetzt den zweiten Term in (7.14c), so zeigt sich, daß dieser im Limes $\delta t \to 0$ gerade verschwindet, denn:

$$\sum_{k=1}^{N} \ln\left(\frac{1+\boldsymbol{n}(t_k)\cdot\boldsymbol{n}(t_{k+1})}{2}\right) = \sum_{k=1}^{N} \ln\left(1 - \frac{1}{4}\big[\boldsymbol{n}(t_k) - \boldsymbol{n}(t_{k+1})\big]^2\right)$$

Da die Parametrisierung glatt sein soll, ist für kleine δt auch $\big[\boldsymbol{n}(t_k) - \boldsymbol{n}(t_{k+1})\big]^2$ klein. Deshalb kann um $\big[\boldsymbol{n}(t_k) - \boldsymbol{n}(t_{k+1})\big]^2 = 0$ entwickelt werden:

$$\begin{aligned}
&\approx \sum_{k=1}^{N} \left(\ln(1) - \frac{1}{4}\big[\boldsymbol{n}(t_k) - \boldsymbol{n}(t_{k+1})\big]^2\right) = -\frac{1}{4}\sum_{k=1}^{N} \big[\boldsymbol{n}(t_k) - \boldsymbol{n}(t_{k+1})\big]^2 \\
&\to -\frac{\delta t}{4}\int_0^\beta dt \big[\partial_t \boldsymbol{n}(t)\big]^2 \quad \xrightarrow{\delta t \to 0} \quad 0
\end{aligned} \tag{7.17}$$

Die Wirkung in der Pfadintegraldarstellung (7.14a) für ein beliebiges Spinsystem ergibt sich damit letztlich zu

$$\boxed{\begin{aligned}
S_E[\boldsymbol{n}] \;=\; & -\mathrm{i}s\sum_{\boldsymbol{r}} \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{n}(t,\tau,\boldsymbol{r}) \cdot \left(\partial_t \boldsymbol{n}(t,\tau,\boldsymbol{r}) \times \partial_\tau \boldsymbol{n}(t,\tau,\boldsymbol{r})\right) \\
& + \sum_{\boldsymbol{r}} \int_0^\beta dt < \boldsymbol{n}(t,\boldsymbol{r})|H|\boldsymbol{n}(t,\boldsymbol{r}) > \qquad (7.18)
\end{aligned}}$$

Hier sei noch einmal darauf hingewiesen, daß das Besondere an diesem Pfadintegral der S_{WZ}-Term ist. Dieser topologische Term, der nicht vom Hamiltonian des betrachteten Systems abhängt, ist teilweise entscheidend für die Eigenschaften des Systems! Leitet man das Pfadintegral nicht sorgfältig aus den spinkohärenten Zuständen oder auch einer Schwinger-Bosonisierung ab, so geht dieser Term verloren. Der topologische Term ist typisch für **quantenmechanische Systeme mit constraint**. Die Zwangsbedingung, die in dieser Herleitung berücksichtigt werden mußte, lautete $\boldsymbol{n}^2 = 1$.

Geht man von der Schwinger-Bosonisierung aus, so hat man ebenfalls eine Zwangsbedingung zu berücksichtigen. Die Bosonenzahl pro Gitterplatz muß dann nämlich gleich $2s$ sein. Damit sind die Vorbereitungen soweit abgeschlossen, daß nun Pfadintegrale der hier betrachteten Modelle angegeben werden können.

7.3 Abbildung des Treppenmodells auf ein nlσ-Modell

In diesem Abschnitt soll anhand einer auf d Dimensionen verallgemeinerten Version des Treppenmodells das nlσ-Modell und die zugehörige Renormierungsgruppe etwas allgemeiner betrachtet werden. Bei den anderen Modellen werden wir uns direkt auf $d = 2$ beschränken. Außerdem bleibt die RG vom betrachteten Spinmodell unberührt, da das Ergebnis der Abbildung immer ein nlσ-Modell in Standardform ist. Der einzige Unterschied besteht dann in der Abhängigkeit der Kopplung g des nlσ-Modells von den mikroskopischen Kopplungen des Spinmodells. Das verallgemeinerte Treppenmodell soll deshalb dazu dienen, die RG exemplarisch vorzuführen. Bei den anderen Modellen reicht es dann aus, sich auf die Angabe einer geeigneten Abbildung auf das nlσ-Modell zu beschränken.

Um das Treppenmodell zu verallgemeinern, starten wir mit einem antiferromagnetischen Heisenbergmodell auf einem bipartiten, d dimensionalen, hyperkubischen Gitter. Außerdem soll auch noch ein Magnetfeld $\boldsymbol{B}$ mitbetrachtet werden. Damit ergibt sich

$$H = J \sum_{<i,j>} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j + \sum_i \boldsymbol{B}\boldsymbol{S}_i \tag{7.19}$$

Dabei bezeichne $< i, j >$ die Summe über nächste Nachbarn und $J > 0$ sei die Kopplungskonstante. Mit der Gitterkonstanten a_0 kann man schreiben:

$$i = o + a_0 \sum_{a=1}^{d} i_a \boldsymbol{e}^a \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{e}^a \boldsymbol{e}^b = \delta^{ab} \tag{7.20}$$

Das Modell soll außerdem die beim Treppenmodell gegebene Dimerisierung aufweisen. Die Schreibweise läßt sich wesentlich vereinfachen, wenn man dazu folgende Größe einführt:

$$p(i) := (-1)^{\sum_{a=1}^{d} i_a} \tag{7.21}$$

Da das Gitter als bipartit angenommen wurde, lässt es sich als $G = A \oplus B$ schreiben. Dann gilt $p(i) = 1$ für $i \in A$ und $p(i) = -1$ für $i \in B$. Mit den hier eingeführten Größen erhält man das kanonisch auf d Dimensionen verallgemeinerte Treppenmodell in folgender Form:

$$H = J \sum_{i \in G} \sum_{a=1}^{d} \left\{ [1 + p(i)\delta] \, \boldsymbol{S}(i) \boldsymbol{S}(i + a_0 \boldsymbol{e}^a) + \boldsymbol{B}\boldsymbol{S}(i) \right\} \tag{7.22}$$

Dabei ist $|\delta| < 1$ und damit die Kopplung J gestaggered, d.h., sie wechselt zwischen $J(1 + \delta)$ und $J(1 - \delta)$. Da $|\delta| < 1$ bleibt die Kopplung in jedem Fall antiferromagnetisch.

Der Hamiltonian (7.19) und auch speziell (7.22) ist **invariant unter Paritätstransformation**, d.h., unter räumlicher Spiegelung $x \to -x$ bleibt H invariant! Auch das nlσ-Modell, auf das abgebildet wird, sollte diese Symmetrie zeigen.

Setzt man den Hamiltonian in die Wirkung (7.18) ein und verwendet (7.7b), so ergibt sich:

$$\begin{aligned} S_E[\boldsymbol{n}] \quad &= \quad -\text{is}\, S_{WZ}[\boldsymbol{n}] \qquad (7.23) \\ &+ Js^2 \sum_{i \in G} \sum_{a=1}^{d} \int_0^\beta dt \, [1 + p(i)\delta] \boldsymbol{n}(i) \boldsymbol{n}(i + a_0 \boldsymbol{e}^a) + \boldsymbol{B}s \sum_{i \in G} \int_0^\beta dt \, \boldsymbol{n}(i) \end{aligned}$$

Dabei ist $\boldsymbol{n}$ natürlich immer noch von t abhängig. Aus Gründen der Schreibökonomie wird der Index t aber hier und im Folgenden weggelassen.

Bisher ist nichts weiter geschehen, als über die spinkohärenten Zustände exakt ein Pfadintegral für das Modell herzuleiten. Um dieses aber weiterzubehandeln, ist es notwendig, einen Ansatz zu machen. Wie schon zu Kapitelanfang beschrieben, bietet sich der Ansatz

$$\boldsymbol{n}(i) = p(i)\boldsymbol{m}(i)\sqrt{1 - a_0^{2d}\boldsymbol{l}^2(i)} + a_0^d\boldsymbol{l}(i) \tag{7.24}$$

an, wenn man von einem néelartigen Grundzustand ausgeht. Dabei ist $\boldsymbol{m}$ das Ordnungsparameterfeld, und $\boldsymbol{l}$ sind die schnellen, aber kleinen Fluktuationen um den durch $\boldsymbol{m}$ gegebenen Mittelwert. Dieser Ansatz wurde in einem anderen Zusammenhang von Polyakov [25] eingeführt. Häufig wird von anderen Autoren - so z.B. von Fradkin in seinem Buch über feldtheoretische Methoden in der Festkörperphysik [13] - die in (7.24) auftretende Wurzel gleich Eins gesetzt. Dies ist aber nicht korrekt und führt hier zu falschen Ergebnissen, da in einer Entwicklung der Wurzel auch Terme der Ordnung $\boldsymbol{l}^2$ auftreten und die quadratischen Fluktuationen noch mitberücksichtigt werden sollen!

Wie man leicht nachprüft, ist die Zwangsbedingung $\boldsymbol{n}^2(i) = 1$ erfüllt, wenn die Felder $\boldsymbol{m}$ und $\boldsymbol{l}$ folgenden Gleichungen genügen:

$$\boldsymbol{m}^2(i) = 1 \qquad ; \qquad \boldsymbol{m}(i)\cdot\boldsymbol{l}(i) = 0 \tag{7.25}$$

Dieser Ansatz ist jetzt sowohl für den Wess-Zumino Term als auch für den zweiten Term in (7.23) einzusetzen. Da die Fluktuationen klein sein sollen, wird die Entwicklung

$$\sqrt{1 - a_0^{2d}\boldsymbol{l}^2(i)} = 1 - \frac{1}{2}a_0^{2d}\boldsymbol{l}^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{l}^4) \tag{7.26}$$

verwendet.

Beginnen wir mit dem vom Hamiltonian abhängigen Teil und errechnen dazu:

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{n}(i)\cdot\boldsymbol{n}(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\\
\approx\;& \left[p(i)\boldsymbol{m}(i)\left(1 - \tfrac{1}{2}a_0^{2d}\boldsymbol{l}^2(i)\right) + a_0^d\boldsymbol{l}(i)\right]\\
&\cdot\left[p(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\boldsymbol{m}(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\left(1 - \tfrac{1}{2}a_0^{2d}\boldsymbol{l}^2(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\right) + a_0^d\boldsymbol{l}(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\right]\\
=\;& -\boldsymbol{m}(i)\boldsymbol{m}(i+a_0\boldsymbol{e}^a) + p(i)\boldsymbol{m}(i)a_0^d\boldsymbol{l}(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\\
&+\boldsymbol{m}(i)\tfrac{1}{2}a_0^{2d}\boldsymbol{l}^2(i)\boldsymbol{m}(i+a_0\boldsymbol{e}^a) + \boldsymbol{m}(i)\boldsymbol{m}(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\tfrac{1}{2}a_0^{2d}\boldsymbol{l}^2(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\\
&+p(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\boldsymbol{m}(i+a_0\boldsymbol{e}^a)a_0^d\boldsymbol{l}(i) + a_0^{2d}\boldsymbol{l}(i)\boldsymbol{l}(i+a_0\boldsymbol{e}^a)
\end{aligned} \tag{7.27a}$$

Führt man nun den *Kontinuumslimes* durch, dh. $a_0 \to 0$, und ersetzt die diskrete Gittervariable i durch den kontinuierlichen Index x, so gilt:

$$\boldsymbol{m}(i + a_0\boldsymbol{e}^a) = \boldsymbol{m}(x) = \boldsymbol{m}(i) + a_0 \cdot \left.\frac{\partial \boldsymbol{m}(x)}{\partial x_a}\right|_{x=i} + \frac{a_0^2}{2}\left.\frac{\partial^2 \boldsymbol{m}(x)}{\partial x_a^2}\right|_{x=i} + \cdots \tag{7.27b}$$

Damit wird (7.27a) zu:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{n}(i)\cdot\boldsymbol{n}(i + a_0\boldsymbol{e}^a) \quad = \quad & -\overbrace{\boldsymbol{m}^2(i)}^{=1} - a_0\boldsymbol{m}(i)\left.\frac{\partial \boldsymbol{m}(x)}{\partial x_a}\right|_{x=i} - \frac{a_0^2}{2}\boldsymbol{m}(i)\left.\frac{\partial^2 \boldsymbol{m}(x)}{\partial x_a^2}\right|_{x=i} \\ & + a_0^{d+1}p(i)\left[\boldsymbol{m}(i)\left.\frac{\partial \boldsymbol{l}(x)}{\partial x_a}\right|_{x=i} - \boldsymbol{l}(i)\left.\frac{\partial \boldsymbol{m}(x)}{\partial x_a}\right|_{x=i}\right] \\ & + 2a_0^{2d}\boldsymbol{l}^2(i) + \cdots \end{aligned} \tag{7.27c}$$

Konstante Terme und totale Ableitungen können in der Wirkung weggelassen werden. Außerdem tragen letztlich nur die ungestaggerten Terme in der betrachteten Ordnung bei. Im Kontinuumslimes erhält man so die Wirkung:

$$\begin{aligned} S_{kin}[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}] \quad = \quad & \frac{Js^2}{a_0^d}\sum_{a=1}^{d}\int_V d^dx \int_0^\beta dt\left[-\frac{a_0^2}{2}\boldsymbol{m}(x)\frac{\partial^2\boldsymbol{m}(x)}{\partial x_a^2} + 2a_0^{2d}\boldsymbol{l}^2(x)\right] \\ & + \delta a_0^{d+1}\sum_{a=1}^{d}\int_V d^dx \int_0^\beta dt\left[\boldsymbol{m}(x)\frac{\partial \boldsymbol{l}(x)}{\partial x_a} - \boldsymbol{l}(x)\frac{\partial \boldsymbol{m}(x)}{\partial x_a}\right] \\ & + \boldsymbol{B}s\int_V d^dx\int_0^\beta dt\,\boldsymbol{l}(x) \end{aligned} \tag{7.28a}$$

Durch partielle Integration und Weglassen der Randterme läßt sich die Wirkung zu

$$\begin{aligned} S_{kin}[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}] = & \frac{Js^2}{2}\sum_{a=1}^{d}\int_V d^dx\int_0^\beta dt\left[a_0^{2-d}(\partial_a\boldsymbol{m}(x))^2 + 4a_0^d\boldsymbol{l}^2(x) - 4\delta a_0\boldsymbol{l}(x)\cdot\partial_a\boldsymbol{m}(x)\right] \\ & + \boldsymbol{B}s\int_V d^dx\int_0^\beta dt\,\boldsymbol{l}(x) \end{aligned} \tag{7.28b}$$

vereinfachen. Nun ist der Ansatz (7.24) auch noch in den Wess-Zumino Term (7.16) einzusetzen. Dabei sind jetzt $\boldsymbol{n},\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}$ Funktionen von x,t,τ. Die Argumente werden in den folgenden Rechnungen wieder weggelassen.

$$
\begin{aligned}
-\mathrm{i}s\, S_{WZ}[\boldsymbol{n}] &= -\mathrm{i}s \sum_{i\in G} \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{n}(t,\tau,i)\cdot(\partial_t \boldsymbol{n}(t,\tau,i)\times\partial_\tau \boldsymbol{n}(t,\tau,i)) \\
&\approx -\mathrm{i}s \sum_{i\in G} \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, p(i)\boldsymbol{m}(i)\cdot(\partial_t \boldsymbol{m}(i)\times\partial_\tau \boldsymbol{m}(i)) \quad (S_1) \\
&\quad -\mathrm{i}s a_0^d \sum_{i\in G} \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{m}(i)\cdot(\partial_t \boldsymbol{m}(i)\times\partial_\tau \boldsymbol{l}(i)) \quad (S_2) \\
&\quad -\mathrm{i}s a_0^d \sum_{i\in G} \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{m}(i)\cdot(\partial_t \boldsymbol{l}(i)\times\partial_\tau \boldsymbol{m}(i)) \quad (S_3) \\
&\quad -\mathrm{i}s a_0^d \sum_{i\in G} \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{l}(i)\cdot(\partial_t \boldsymbol{m}(i)\times\partial_\tau \boldsymbol{m}(i)) \quad (S_4)
\end{aligned}
\tag{7.29}
$$

Term S_1 enthält drei $\boldsymbol{m}$-Felder und ist oszillierend. Unter der Annahme, daß die Konfiguration hinreichend glatt ist, kann man wieder zum Kontinuumslimes übergehen.

$$
\begin{aligned}
S_1[\boldsymbol{m}] &= -\mathrm{i}s \sum_{i\in G} \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, p(i)\boldsymbol{m}(i)\cdot[\partial_t \boldsymbol{m}(i)\times\partial_\tau \boldsymbol{m}(i)] \\
&= -\mathrm{i}s \sum_{i\in A}\sum_{a=1}^{d} \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, (\boldsymbol{m}(i)-\boldsymbol{m}(i+a_0\boldsymbol{e}^a))\cdot[\partial_t \boldsymbol{m}(i)\times\partial_\tau \boldsymbol{m}(i)] \\
&\approx -\mathrm{i}s\frac{a_0^{1-d}}{2} \int_V d^dx \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \left(\sum_{a=1}^{d} \partial_a \boldsymbol{m}(x)\right)\cdot[\partial_t \boldsymbol{m}(x)\times\partial_\tau \boldsymbol{m}(x)] \\
&= -\mathrm{i}s\frac{a_0^{1-d}}{2} \int_V d^dx \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{m}(x)\cdot\left[\left(\sum_{a=1}^{d} \partial_a \boldsymbol{m}(x)\right)\times\partial_t \boldsymbol{m}(x)\right]
\end{aligned}
\tag{7.30}
$$

Für den Fall $d = 1$ läßt sich dieser Term durch Übergang zu Kugelkoordinaten zu dem von Haldane angegebenen Resultat für den topologischen Term des nlσ-Modells in einer Dimension [43] umformen:

$$
S_1[\boldsymbol{m}] = \frac{\mathrm{i}s}{2}\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi k} d\phi \sin(\theta) = 2\mathrm{i}s\pi k \tag{7.31}
$$

Hierbei ist $k \in \mathcal{Z}$ die Windungszahl des Feldes $\boldsymbol{m}$.

Das Ordnungsparameterfeld $\boldsymbol{m}(x)$ ist gerade unter Paritätstransformation, während $\frac{d}{dx}$ ungerade ist. Da der topologische Term (7.30) linear in $\frac{d}{dx}$ ist, ist die Symmetrie unter Paritätstransformation gebrochen! Das bedeutet aber auch, daß der Term $2\mathrm{i}s\pi k$ in (7.31) unter Paritätstranformation auf $-2\mathrm{i}s\pi k$ übergeht. Definiert man $\theta = 2\pi s$, so verursacht (7.31) im Pfadintegral gerade einen Term der Art

$$
\mathrm{e}^{-S_1[\boldsymbol{m}]} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta k}. \tag{7.32}
$$

Für ganzzahlige s gilt dann $\theta = 0(\bmod 2\pi)$, und man erhält ein Pfadintegral **ohne topologischen Term.** Für halbzahlige s ist hingegen $\theta = \pi(\bmod 2\pi)$ und im Pfadintegral bleibt ein $(-1)^k$ stehen! Damit zerfällt das Pfadintegral für halbzahlige s in eine Summe über topologische Klassen, charakterisiert durch die Windungszahl k. Dieser Term muß verantwortlich für die unterschiedlichen Eigenschaften von Spinketten mit ganzzahligem und halbzahligem Spin sein, da er den einzigen Unterschied im Pfadintegral darstellt. Da θ nur die Werte $0, \pi$ annehmen kann, ist die Symmetrie unter Paritätstransformation letztlich wieder hergestellt, denn für diese Werte gilt $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta k} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta k}$. Würde man umgekehrt die Forderung aufstellen, daß durch die Abbildung keine Symmetrien des ursprünglichen Modells verletzt werden dürfen, so schließt man, daß s nur ganz- oder halbzahlige Werte annehmen kann!

In mehr als einer Raumdimension läßt sich zeigen, daß der topologische Term für glatte Spinkonfigurationen (Néelzustand) verschwindet, während er im ungeordneten Zustand wesentlich ist und die Art des Zustandes bestimmt. Eine solche topologische Invariante läßt sich in einer RG nicht behandeln. Es bleiben nur Mean-Field Näherungen eines bosonischen oder fermionischen Pfadintegrals, wobei der topologische Term zu sogenannten Instantonen führt [44, 45].

In (7.29) bleiben noch die Terme S_2, S_3, S_4 zu untersuchen. S_4 ist Null, da S_4 aus einem Spatprodukt von drei Vektoren besteht, die alle senkrecht zu $\boldsymbol{m}$ sind und deshalb in einer Ebene liegen. Auch der Term S_3 verschwindet, denn

$$
\begin{aligned}
S_3[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}] &= -\mathrm{i}s \int_V d^d x \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{m}(x) \cdot (\partial_t \boldsymbol{l}(x) \times \partial_\tau \boldsymbol{m}(x)) \\
&= -\mathrm{i}s \int_V d^d x \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \partial_t \{\boldsymbol{m}(x) \cdot (\boldsymbol{l}(x) \times \partial_\tau \boldsymbol{m}(x))\} \\
&= 0. \qquad (7.33)
\end{aligned}
$$

Der letzte Schritt gilt, da alle Felder periodisch in t sind. In S_2 läßt sich noch das τ-Integral ausführen:

$$
\begin{aligned}
S_2[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}] &= -\mathrm{i}s \int_V d^d x \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{m}(x) \cdot (\partial_t \boldsymbol{m}(x) \times \partial_\tau \boldsymbol{l}(x)) \\
&= -\mathrm{i}s \int_V d^d x \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt\, \partial_\tau \{\boldsymbol{m}(x) \cdot (\partial_t \boldsymbol{m}(x) \times \boldsymbol{l}(x))\} \\
&= -\mathrm{i}s \int_V d^d x \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{l}(x) \cdot (\boldsymbol{m}(x) \times \partial_t \boldsymbol{m}(x)) \qquad (7.34)
\end{aligned}
$$

Das Pfadintegral für das dimerisierte Modell nimmt somit die Form

$$
Z[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}] = \int \boldsymbol{Dm}\, \boldsymbol{Dl}\, \delta(\boldsymbol{m}^2 - 1) \mathrm{e}^{-S_1[\boldsymbol{m}] - S'[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}]} \qquad (7.35\text{a})
$$

an. Dabei ist $S'[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}]$ wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} S'[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}] &= S_{kin}[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}] + S_2[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}] \\ &= \frac{Js^2}{2}\int_V d^dx \int_0^\beta dt \left[a_0^{2-d}(\partial_a \boldsymbol{m})(\partial^a \boldsymbol{m}) + 4da_0^d \boldsymbol{l}^2 - 4\delta a_0 \boldsymbol{l}\cdot \sum_{a=1}^d \partial_a \boldsymbol{m}\right] \\ &\quad -s\int_V d^dx \int_0^\beta dt\, \boldsymbol{l}\cdot(\mathrm{i}\,\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m} - \boldsymbol{B}) \end{aligned} \tag{7.35b}$$

Das Funktionalintegral über das $\boldsymbol{l}$-Feld in (7.35a) ist nun nichts anderes als ein Gaußsches Integral. Dieses läßt sich ausführen (*Hubbard-Stratonovich Transformation*), und so erhält man durch Ausintegrieren der schnellen Fluktuationen eine *effektive Feldtheorie* des zweidimensionalen Heisenbergmodells mit Dimerisierung.

$$\int D\boldsymbol{l}\, \mathrm{e}^{-\int_V d^dx \int_0^\beta dt\left[2Js^2da_0^d\boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{l}\cdot\left(2Js^2d\delta a_0 \sum_{a=1}^d \partial_a\boldsymbol{m} - \mathrm{i}s\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m} - s\boldsymbol{B}\right)\right]} \tag{7.36a}$$

Wir definieren

$$A := 2Js^2da_0^d \tag{7.36b}$$

$$\boldsymbol{b}(x,t) := 2Js^2\delta a_0 \sum_{a=1}^d \partial_a\boldsymbol{m} + \mathrm{i}s\,\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m} - s\boldsymbol{B} \tag{7.36c}$$

und führen obiges Funktionalintegral aus:

$$\begin{aligned} &\int D\boldsymbol{l}\, \exp\left\{-\int_V d^dx \int_0^\beta dt\,\left[A\boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{l}\right]\right\} \\ =& \int D\boldsymbol{l}\, \exp\left\{-\int_V d^dx \int_0^\beta dt\,\left[A\left(\boldsymbol{l} - \frac{1}{2A}\boldsymbol{b}\right)^2 - \frac{1}{4A}\boldsymbol{b}^2\right]\right\} \\ =& \ C\cdot\exp\left\{\int_V d^dx \int_0^\beta dt\, \frac{\boldsymbol{b}^2}{4A}\right\} \end{aligned} \tag{7.36d}$$

Nun muß noch die Größe $\boldsymbol{b}^2$ berechnet werden. Aus der bac-cab Regel für das Spatprodukt und $\boldsymbol{m}\cdot\partial_t\boldsymbol{m} = 0$ folgt die Identität

$$(\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m})^2 = (\partial_t\boldsymbol{m})^2 \tag{7.37}$$

und damit

$$\begin{aligned} \boldsymbol{b}^2(x,t) &= 4J^2s^4\delta^2a_0^2\left(\sum_{a=1}^d \partial_a\boldsymbol{m}\right)^2 - s^2(\partial_t\boldsymbol{m})^2 + s^2\boldsymbol{B}^2 - 2\mathrm{i}s^2(\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m})\cdot\boldsymbol{B} \\ &\quad + 4\mathrm{i}Js^3\delta a_0\left(\sum_{a=1}^d \partial_a\boldsymbol{m}\right)\cdot(\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m}) - 4Js^3\delta a_0\left(\sum_{a=1}^d \partial_a\boldsymbol{m}\right)\cdot\boldsymbol{B}. \end{aligned} \tag{7.38}$$

Besonders interessant ist hier der dritte Term. Dieser ist nämlich eine zu δ proportionale Korrektur des topologischen Terms $S_1[\boldsymbol{m}]$!

Die Zustandssumme der effektiven Theorie ist jetzt nur noch ein Funktionalintegral über das $\boldsymbol{m}$-Feld und ist durch

$$\begin{aligned} Z[\boldsymbol{m}] &= \int D\boldsymbol{m}\,\delta(\boldsymbol{m}^2-1)\mathrm{e}^{-S_1[\boldsymbol{m}]+\int_V d^dx\int_0^\beta dt\{\frac{1}{4A}\boldsymbol{b}^2\}} \\ &= \int D\boldsymbol{m}\,\delta(\boldsymbol{m}^2-1)\mathrm{e}^{-S_{top}[\boldsymbol{m}]-S_{eff}[\boldsymbol{m}]} \end{aligned} \tag{7.39}$$

gegeben. Im zweiten Schritt sind dabei die Faktoren neu zusammengefaßt worden. Die Wirkung $S_{top}[\boldsymbol{m}]$ enthält den in (7.30) berechneten topologischen Term und die angesprochene zu δ proportionale Korrektur, während alle weiteren Terme zu $S_{eff}[\boldsymbol{m}]$ gehören. Es gilt also:

$$\begin{aligned} S_{top}[\boldsymbol{m}] &= S_1[\boldsymbol{m}] + \frac{\mathrm{i}sa_0^{1-d}\delta}{2d}\int_V d^dx\int_0^\beta dt\left(\sum_{a=1}^d \partial_a\boldsymbol{m}\right)\cdot(\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m}) \\ &= -\mathrm{i}s\frac{a_0^{1-d}}{2}\int_V d^dx\int_0^\beta dt\,\boldsymbol{m}\cdot\left[\left(\sum_{a=1}^d\partial_a\boldsymbol{m}\right)\times\partial_t\boldsymbol{m}\right] \\ &\quad +\frac{\mathrm{i}sa_0^{1-d}\delta}{2d}\int_V d^dx\int_0^\beta dt\left(\sum_{a=1}^d\partial_a\boldsymbol{m}\right)\cdot(\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m}) \end{aligned}$$

Als Endresultat ergibt sich damit für den topologischen Term des verallgemeinerten Treppenmodells in d Dimensionen:

$$\boxed{S_{top}[\boldsymbol{m}] = -\mathrm{i}\frac{sa_0^{1-d}}{2}\cdot(1+\frac{\delta}{d})\int_V d^dx\int_0^\beta dt\,\boldsymbol{m}\cdot\left[\left(\sum_{a=1}^d\partial_a\boldsymbol{m}\right)\times\partial_t\boldsymbol{m}\right] \quad (7.40)}$$

Die übrigen Terme in (7.38) führen zu einer Wirkung

$$\begin{aligned} S_{eff}[\boldsymbol{m}] &= \int_V d^dx\int_0^\beta dt\left[\frac{Js^2a_0^{2-d}}{2}(\partial_a\boldsymbol{m})(\partial^a\boldsymbol{m}) - \frac{Js^2\delta^2a_0^{2-d}}{2d}\left(\sum_{a=1}^d\partial_a\boldsymbol{m}\right)^2\right] \\ &+ \int_V d^dx\int_0^\beta dt\left[\frac{1}{8Jda_0^d}(\partial_t\boldsymbol{m})^2 + \frac{\mathrm{i}}{4Jda_0^d}(\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m})\cdot\boldsymbol{B}\right] \\ &+ \frac{s\delta a_0^{2-d}}{2d}\int_V d^dx\int_0^\beta dt\left(\sum_{a=1}^d\partial_a\boldsymbol{m}\right)\cdot\boldsymbol{B}. \end{aligned} \tag{7.41}$$

Da $\boldsymbol{B}$ ein homogenes Magnetfeld sein soll, ist der letzte Term eine totale Ableitung und kann deshalb ebenso wie alle konstanten Terme weggelassen werden. Nun ist es sinnvoll folgende kanonische Abkürzungen für die *nichtuniversellen*

Parameter einzuführen:

$$\begin{array}{lrcl} \textbf{Spinsteifigkeit} & \rho_s & = & Js^2 a_0^{2-d}(1-\frac{\delta^2}{d}) \\ \textbf{induzierte Anisotropie} & \gamma_s^{ab} & = & \delta^{ab} - \frac{\delta^2}{d-\delta^2}(1-\delta^{ab}) \\ \textbf{transversale magnetische Suszeptibilität} & \chi_\perp & = & 4Jda_0^d \\ \textbf{Spinwellengeschwindigkeit} & v_s & = & \sqrt{\rho_s \chi_\perp} \end{array} \tag{7.42}$$

Mit diesen Parametern ergibt sich:

$$\boxed{\begin{aligned} S_{eff}[\boldsymbol{m}] &= \frac{\rho_s}{2}\int_V d^d x \int_0^\beta dt \left[\gamma_s^{ab}(\partial_a \boldsymbol{m})(\partial_b \boldsymbol{m}) + \frac{1}{v_s^2}(\partial_t \boldsymbol{m})^2\right] \\ &+ \mathrm{i}\chi_\perp^{-1}\int_V d^d x \int_0^\beta dt\, (\boldsymbol{m}\times\partial_t \boldsymbol{m})\cdot \boldsymbol{B} \end{aligned} \qquad (7.43)}$$

Wichtig ist, daß im topologischen Term eine Korrektur proportional zu δ auftritt. Die Auswirkungen dieser Korrektur in ein und zwei Raumdimensionen sind noch näher zu untersuchen. Außerdem führt die Dimerisierung für $d > 1$ zu einer Anisotropie in der Wirkung, die in der Matrix γ_s^{ab} zum Ausdruck kommt. Diese Matrix ist symmetrisch und geht, wie erwartet, für $\delta \to 0$ in die Einheitsmatrix über [3].

7.3.1 Das nlσ-Modell in einer Dimension

In einer Dimension entspricht das verallgemeinerte Treppenmodell (7.22) natürlich der dimerisierten Spinkette, die wir in Kapitel 3.2 schon einmal betrachtet haben. In diesem Abschnitt wollen wir jetzt untersuchen, ob man mit Hilfe des nlσ-Modells zu vergleichbaren Resultaten gelangen kann.

Die schon erwähnte Korrektur im topologischen Term führt dazu, daß dieser jetzt statt (7.32) Beiträge der Form

$$\mathrm{e}^{-S_{top}[\boldsymbol{m}]} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta k(1+\delta)} \tag{7.44}$$

liefert mit $\theta = 0, \pi (mod\, 2\pi)$. Diese sind nur reell, falls δ die Werte $\frac{n}{2s}$ mit $n \in [-2s, 2s]$ annimmt, wobei n eine ganze Zahl ist. D.h., die ehemals kontinuierliche Größe δ kann nur noch bestimmte diskrete Werte annehmen! Dies scheint ein paradoxes Resultat zu sein, da δ ursprünglich kontinuierlich war. Nun ist aber die Zustandssumme (7.39) nicht für die nackten Felder und Kopplungen, sondern nur für die renormierten Größen wohldefiniert. Auch die Kopplung δ unterliegt einem Renormierungsgruppenfluß. Da ein topologischer Term aber

[3] An dieser Stelle möchte ich mich noch einmal ausdrücklich bei Jochen Gruneberg bedanken, der mir half, einige Fehler in obiger Rechnung zu finden und mir seine privaten Aufzeichnungen zu Spinmodellen und RG [46] zur Verfügung stellte.

nicht skaliert, sind für δ die Fixpunktwerte des Renormierungsgruppenflusses einzusetzen. Wir schließen also, daß nur die Werte

$$\delta_n^* = \frac{n}{2s} \quad \text{mit n ganz und} \quad n \in [-2s, 2s] \tag{7.45}$$

als Fixpunkte in Frage kommen.

Eine andere Möglichkeit, zu diesem Resultat zu gelangen, besteht darin, zu fordern, daß alle Terme in der Zustandssumme - also insbesondere auch der topologische Term - invariant unter einer Paritätstransformation bleiben. Da das ursprüngliche Modell diese Invarianz zeigt, ist es sinnvoll, die Erhaltung der Symmetrie zu fordern. Hieraus ergeben sich dann die gleichen Bedingungen an δ wie oben angegeben.

Besonders interessiert uns der Fall $s = \frac{1}{2}$. Da $\delta \in [-1, 1]$ sein soll, gibt es dann nur drei mögliche Fixpunkte, und zwar $\delta^* = -1, 0, 1$! Die Fälle $\delta = -1$ und $\delta = 1$ sind physikalisch völlig äquivalent, so daß tatsächlich nur zwei Möglichkeiten bleiben. Das Modell ist entweder homogen, oder es zerfällt vollständig in Dimere. Zu beantworten ist jetzt nur noch die Frage, welcher der beiden Fixpunkte attraktiv und welcher repulsiv ist, wenn man mit einem $\delta \in (0, 1)$ startet. Da aus der Cross-Fisher Theorie [1] bekannt ist, daß eine Verzerrung des Gitters zur Energieabsenkung führt und deshalb ein Spin-Peierls Übergang zu einem aus Dimeren aufgebauten Zustand stattfindet, erwartet man, daß der $\delta^* = 1$ Fixpunkt attraktiv ist. Die Vorhersage wäre also, daß schon für eine beliebig kleine Dimerisierung der Renormierungspruppenfluß zum $\delta = 1$ Fixpunkt führt. **Der Grundzustand der Spin-1/2 Kette mit alternierender Kopplung $\delta \in (0, 1]$ ist demnach dimerisiert.**

Abbildung 7.1: Renormierungsgruppenfluß für die Kopplung δ in $d = 1$

Wir wollen nun zu dem Fall eines allgemeinen s zurückkehren und noch einmal die Gleichung (7.45) für die Fixpunktwerte von δ betrachten. Falls dort n ungerade ist, so verschwindet der topologische Term für halbzahlige s, während er für ganzzahlige wesentlich wird. Dies ist eine Verallgemeinerung des Haldaneschen Resultats, das für die Kette ohne Dimerisierung einen topologischen Term für s halbzahlig und das Verschwinden eines solchen Terms für s ganzzahlig vorhersagt. Nach Haldane ist es genau dieser topologische Term, der dazu führt, daß die Kette mit halbzahligem s kritisch ist und die mit s ganzzahlig ein Gap hat. Auf die dimerisierte Kette übertragen, bedeutet dies, daß auch eine Kette mit s ganzzahlig einen topologischen Term haben kann und dann kritisches Verhalten zeigt! Umgekehrt öffnet sich bei einer Kette mit s halbzahlig bei entsprechender Dimerisierung ein Gap.

Dieser Zusammenhang soll am Beispiel $s = 1$ noch einmal beleuchtet werden. Entsprechend Gleichung (7.45) gibt es dann die Fixpunkte $\delta^* = -1, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1$. Für die Fixpunkte $\delta^* = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ wird der topologische Term wesentlich, während er für die anderen beiden Fixpunkte verschwindet. Falls man sich also an den Fixpunkten $\delta^* = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ befindet, sollte die Kette mit $s = 1$ kritisch werden und das Gap verschwinden. Qualitativ ist diese Vorhersage auch numerisch durch DMRG-Rechnungen bestätigt worden [47]. Allerdings ergibt sich ein abweichender Wert für die Dimerisierung, an der das Gap verschwindet, von $\delta^* = 0.25 \pm 0.01$. Diese Abweichung ist wohl auf die Abbildung der Spinkette auf das $O(3)$ nlσ-Modell zurückzuführen, die ja nur für große s gerechtfertigt ist.

Um weitere Einsichten in das Verhalten des nlσ-Modells zu erhalten, bietet sich die *Renormierungsgruppe* an. Da ein topologischer Term innerhalb der RG nicht behandelt werden kann, gehen wir von einer Situation aus, in der dieser verschwindet. Außerdem sei $0 < g \ll 1$, d.h., s hinreichend groß, so daß eine Entwicklung in g sinnvoll ist.

Für $\boldsymbol{B} = 0$ und mit den Definitionen

$$g = \frac{2}{s\sqrt{1-\delta^2}} \qquad ; \qquad \tilde{v}_s = 2a_0 J s \sqrt{1-\delta^2} \tag{7.46}$$

läßt sich die Wirkung (7.43) zu

$$S_{eff}[\boldsymbol{m}] = \frac{1}{2g} \int_0^L dx \int_0^\beta dt \, \left\{ \tilde{v}_s (\partial_x \boldsymbol{m})^2 + \frac{1}{\tilde{v}_s} (\partial_t \boldsymbol{m})^2 \right\} \tag{7.47}$$

umschreiben. Mit $x_0 = \tilde{v}_s \cdot t$ erhält man nun die Standardform der Wirkung des nlσ-Modells

$$S_\sigma[\boldsymbol{m}] = \frac{1}{2g} \int_\Omega d^2x \, (\partial_\mu \boldsymbol{m})(\partial^\mu \boldsymbol{m}), \tag{7.48}$$

wobei das Volumen durch $\Omega = [0, L] \times [0, \tilde{v}_s \beta]$ gegeben ist.

Diese isotrope Behandlung von Raum und Zeit ist für $\beta \to \infty$, d.h. $T \to 0$, gerechtfertigt. Die folgenden Ergebnisse betreffen also alle das Verhalten des Modells bei $T = 0$. Will man auch die Thermodynamik untersuchen, so muß man die Temperatur getrennt behandeln. Dies würde aber die Rechnungen wesentlich komplizierter machen, da dann diverse Matsubara-Summen ausgeführt werden müßten und außerdem eine Verallgemeinerung des nlσ-Modells auf N Komponenten mit anschließender Entwicklung um große N nötig wäre. Da sich diese Arbeit ausschließlich mit Grundzustandseigenschaften beschäftigt, verzichten wir auf diesen zusätzlichen Aufwand.

Kehren wir zu Gleichung (7.48) zurück, so bemerken wir, daß in $d = 1 + 1$ die Kopplung g dimensionslos ist, da das Feld $\boldsymbol{m}$ dimensionslos ist. Damit ist das nlσ-Modell in $d = 1 + 1$ Dimensionen renormierbar. Verallgemeinert man dieses Modell auf Raumzeitdimensionen $d > 2$, so ist g dimensionsbehaftet und erst einmal nicht mehr renormierbar. Wie aber Wilson [33] u.a. gezeigt haben, ist es möglich, analytisch in der Raumdimension fortzusetzen. Dieser

"Trick" ist bekannt als ϵ-*Entwicklung.* Im Falle des nlσ-Modells bedeutet dies, daß man $\epsilon = d-2$ setzt und dann die Renormierungsgruppe auch für kleine ϵ auswerten kann. Erstaunlicherweise scheint es sogar meist möglich zu sein, in dieser Entwicklung $\epsilon = 1$ zu setzen, so daß man bis zur nächsten physikalischen Dimension fortsetzen kann. Da die Durchführung der Renormierungsgruppe in ϵ keinen großen zusätzlichen Arbeitsaufwand bedeutet, verallgemeinern wir auf d Dimensionen und führen die dimensionslose Kopplung $g = \tilde{g} \cdot a_0^{d-2}$ ein. Damit nimmt die Wirkung des nlσ-Modell die Form

$$S_\sigma[\boldsymbol{m}] = \frac{1}{2\tilde{g}a_0^{d-2}} \int_\Omega d^d x\, (\partial_\mu \boldsymbol{m})(\partial^\mu \boldsymbol{m}) \tag{7.49}$$

an. Die Idee ist jetzt, wie schon im Kapitel Renormierungsgruppe beschrieben, durch Fouriertransformation und anschließendes Ausintegrieren der schnellen Moden, ein effektives Modell zu erhalten. Dabei ist zu beachten, daß das Pfadintegral über $\boldsymbol{m}$ immer noch der Zwangsbedingung $\boldsymbol{m}^2 = 1$ unterliegt. Diese kann durch folgende Parametrisierung berücksichtigt werden [13]:

$$m_1 = \sqrt{1-m_3^2}\cos(\theta) \qquad ; \qquad m_2 = \sqrt{1-m_3^2}\sin(\theta) \qquad ; \qquad m_3 \tag{7.50}$$

Damit und mit der Umskalierung $m_3 = \sqrt{\tilde{g}a_0^{d-2}}\phi$ nimmt die Wirkung die Form

$$S_\sigma[\boldsymbol{m}] = \frac{1}{2}\int_\Omega d^d x \left\{ (\nabla\phi)^2 + \frac{1}{\tilde{g}a_0^{d-2}}(1-\tilde{g}a_0^{d-2}\phi^2)(\nabla\theta)^2 + \frac{\tilde{g}a_0^{d-2}}{1-\tilde{g}a_0^{d-2}\phi^2}(\phi\nabla\phi)^2 \right\} \tag{7.51}$$

an. Da $\tilde{g} \ll 1$ sein soll, ist es möglich, den letzten Term um $\tilde{g} = 0$ zu entwickeln.

$$\begin{aligned} 2\mathcal{L} &= (\nabla\phi)^2 - \phi^2(\nabla\theta)^2 + \frac{1}{\tilde{g}a_0^{d-2}}(\nabla\theta)^2 \\ &\quad + \tilde{g}a_0^{d-2}(\phi\nabla\phi)^2 + \tilde{g}^2 a_0^{2(d-2)}\phi^2(\phi\nabla\phi)^2 + \mathcal{O}(\tilde{g}^3) \end{aligned} \tag{7.52}$$

Die Zustandssumme lautet mit dieser Parametrisierung:

$$Z = \int D\phi D\theta\, \exp\left\{ -\int d^d x \mathcal{L}(\phi,\theta) \right\} \tag{7.53}$$

Geht man durch Fouriertransformation zum Impulsraum über, so ist durch $\Lambda \propto \frac{1}{a_0}$ auf natürliche Weise ein UV-Cutoff gegeben. Unter der Annahme, daß nur ϕ Fourierkomponenten in der Impulsschale $b\Lambda < |\boldsymbol{p}| < \Lambda$ hat, wobei $b < 1$, läßt sich folgendes Funktionalintegral ausführen:

$$\begin{aligned} & \int_{b\Lambda}^{\Lambda} D\phi(\boldsymbol{p})\, \exp\left\{ -\frac{1}{2}\int d^d x \left[(\nabla\phi)^2 - \phi^2(\nabla\theta)^2 \right] \right\} \\ = & \int_{b\Lambda}^{\Lambda} D\phi(\boldsymbol{p})\, \exp\left\{ -\frac{1}{2}\int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \left[p^2|\phi(p)|^2 - |\phi(p)|^2(\nabla\theta)^2 \right] \right\} \\ = & \prod_{b\Lambda<|\boldsymbol{p}|<\Lambda} \sqrt{\frac{2\pi}{p^2-(\nabla\theta)^2}} \end{aligned} \tag{7.54}$$

Dabei war im letzten Schritt nur ein Gaußsches Integral zu berechnen. Schreibt man diesen Term wieder in den Exponenten zurück, so erhält man:

$$\prod_{b\Lambda<|\boldsymbol{p}|<\Lambda} \sqrt{\frac{2\pi}{p^2-(\nabla\theta)^2}} = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\int\frac{d^dp}{(2\pi)^d}\ln\left(\frac{2\pi}{p^2-(\nabla\theta)^2}\right)} \approx \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\int\frac{d^dp}{(2\pi)^d}\left\{\ln\left(\frac{2\pi}{p^2}\right)+\frac{1}{p^2}(\nabla\theta)^2\right\}} \tag{7.55}$$

In der Zustandssumme sind jetzt die schnellen Moden ausintegriert worden, wodurch sich der Cutoff von Λ auf $b\Lambda$ reduziert hat. Es verbleibt eine effektive Lagrangedichte, die durch

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{eff} &= -\frac{1}{2(2\pi)^d}\int_{b\Lambda<|\boldsymbol{p}|<\Lambda}\left\{\ln\left(\frac{2\pi}{p^2}\right)+\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2-\frac{1}{2}\phi^2(\nabla\theta)^2\right\}d^dp \\ &+ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\tilde{g}a_0^{d-2}}-\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{b\Lambda<|\boldsymbol{p}|<\Lambda}\frac{d^dp}{p^2}\right)(\nabla\theta)^2+\mathcal{O}(\tilde{g}) \qquad (7.56)\end{aligned}$$

gegeben ist. Das Ausintegrieren der schnellen Moden hat also drei Effekte:

1) Der Cutoff reduziert sich von Λ auf $b\Lambda$.
2) In $\mathcal{L}_{eff}$ tritt ein konstanter Shift auf (1.Term), der vernachlässigt werden kann.
3) Die Kopplungskonstante $\tilde{g}$ wird renormiert!

Die Theorie mit dem reduzierten Cutoff $b\Lambda$ ist also völlig äquivalent zur ursprünglichen Theorie, wenn man die Kopplungskonstante $\tilde{g}$ wie angegeben modifiziert. Die Transformation von Λ zu $b\Lambda$ wird mit $b\to 1$ kontinuierlich, und man bezeichnet sie als Renormierungsgruppe. Diese Transformation kann mehrfach hintereinander angewendet werden, solange die neue Kopplung klein gegen eins bleibt. Die Kopplung $\tilde{g}$ unterliegt dann einem *Renormierungsgruppenfluß*, der sie zu einem Fixpunkt treibt. In unserem Fall ist bei jedem Renormierungsgruppenschritt die alte Kopplung $\tilde{g}$ durch

$$\frac{1}{\tilde{g}_{neu}\tilde{a}_0^{d-2}} = \frac{1}{\tilde{g}a_0^{d-2}} - \frac{1}{(2\pi)^d}\int_{b\Lambda<|\boldsymbol{p}|<\Lambda}\frac{d^dp}{p^2} \tag{7.57}$$

zu ersetzen. Da in der neuen, effektiven Theorie der Cutoff auf $\Lambda' = b\Lambda$ reduziert wurde, hat sich dazu äquivalent die Gitterkonstante $a_0 = \frac{2\pi}{\Lambda}$ auf $\tilde{a}_0 = \frac{a_0}{b}$ vergrößert.

Mit der Bezeichnung S_d für die Fläche der d dimensionalen Einheitssphäre errechnet sich das Integral zu:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tilde{g}_{neu}\tilde{a}_0^{d-2}} &= \frac{1}{\tilde{g}a_0^{d-2}} - \frac{S_d}{(2\pi)^d}\int_{b\Lambda}^{\Lambda} p^{d-3}dp \\ &= \frac{1}{\tilde{g}a_0^{d-2}} - \frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{1}{d-2}p^{d-2}\Big|_{b\Lambda}^{\Lambda} \\ &= \frac{1}{\tilde{g}a_0^{d-2}} - \frac{S_d}{(2\pi)^d}\frac{1}{d-2}(1-b^{d-2})\Lambda^{d-2} \qquad (7.58)\end{aligned}$$

Formt man nun nach $\tilde{g}_{neu}$ um und führt eine Taylorentwicklung um $\tilde{g} = 0$ durch, so erhält man:

$$\begin{aligned}\tilde{g}_{neu} &= \frac{b^{d-2}}{a_0^{d-2}} \left(\tilde{g} a_0^{d-2} + \tilde{g}^2 a_0^{2(d-2)} \frac{S_d}{(2\pi)^d} \frac{1}{d-2} (1 - b^{d-2}) \Lambda^{d-2} \right) \\ &= b^{d-2} \left(\tilde{g} + \tilde{g}^2 \frac{S_d}{(2\pi)^2} \frac{1}{d-2} (1 - b^{d-2}) \right)\end{aligned} \tag{7.59}$$

Die *β-Funktion*, die den Fluß der Kopplung beschreibt, ist als

$$\beta(\tilde{g}) = \left. \frac{d\tilde{g}}{d \ln b} \right|_{b=1} = b \cdot \left. \frac{d\tilde{g}}{db} \right|_{b=1} \tag{7.60}$$

definiert [4]. Damit ergibt sich hier eine β-Funktion der Gestalt:

$$\beta(\tilde{g}) = (d-2)\tilde{g} - \frac{S_d}{(2\pi)^2} \tilde{g}^2 \tag{7.61}$$

Dies ist aber nur korrekt, falls $\epsilon = d - 2$ klein ist. Ist diese Bedingung erfüllt, so erhalten wir als Endresultat für die β-Funktion des nlσ-Modells in ϵ-Entwicklung

$$\boxed{\beta(\tilde{g}) = \epsilon \tilde{g} - \frac{\tilde{g}^2}{2\pi}} \tag{7.62}$$

und damit speziell für d=1+1:

$$\boxed{\beta(\tilde{g}) = -\frac{\tilde{g}^2}{2\pi}} \tag{7.63}$$

Die β-Funktion ist also negativ. Zusammmen mit der Definition (7.60) folgt dann, daß die Kopplung mit dem Ausintegrieren der Fluktuationen wächst! D.h., auch wenn man mit einer kleinen Kopplung $\tilde{g}_0$ startet, strebt die effektive Kopplung gegen unendlich. Im Bereich starker Kopplung ist das nlσ-Modell aber ungeordnet und hat endliche Korrelationslänge.

Abbildung 7.2: Renormierungsgruppenfluß für die Kopplung g in d=1+1

Fazit für d=1+1: Betrachtet man die homogenene Spinkette, also $\delta = 0$, so fallen die Ketten mit ganz- und die mit halbzahligem Spin in unterschiedliche Universalitätsklassen. Für s ganzzahlig verschwindet der topologische Term und die Renormierungsgruppe zeigt, daß sich das effektive Modell im Bereich starker Kopplung befindet. Homogene Spinketten mit s ganzzahlig sind deshalb

[4] In der Literatur findet man die β-Funktion teilweise auch mit umgekehrtem Vorzeichen!

ungeordnet, besitzen eine endliche Korrelationslänge ξ und haben eine Anregungslücke $\Delta \propto \frac{1}{\xi}$. Für s halbzahlig ist ein topologischer Term vorhanden, der Beiträge der Form $(-1)^k$ zur Zustandssumme liefert, wobei k die Windungszahl des Feldes $\boldsymbol{m}$ ist. Die Renormierungsgruppe von g bei festgehaltener Windungszahl k ist davon nicht beeinflußt und führt effektiv immer noch zu starker Kopplung. Da $s = 2/g$ ist, bedeutet großes g kleine Quantenzahl s. Alle halbzahligen Spinketten liegen also in der selben Universalitätsklasse und verhalten sich wie die Spin-1/2 Kette. Diese ist aber, wie aus dem Bethe-Ansatz folgt, kritisch. Die Behauptung ganzzahlige Spinketten sind ungeordnet und halbzahlige kritisch ist als *Haldanes conjecture* bekannt. Verantwortlich für diesen Unterschied muß der topologische Term sein! Dieser scheint durch eine Art konstruktive Interferenz zwischen verschiedenen Wegen im Pfadintegral zu verhindern, daß die Kopplung g nach unendlich fließt.

Für die dimerisierte Kette gibt es im Fall $s = 1/2$ nur die Fixpunkte $\delta^* = 0, 1$. Startet man mit einer nackten Kopplung $\delta_0 \neq 0$, so treibt der Renormierungsgruppenfluß diese Kopplung zum Fixpunkt $\delta^* = 1$. Damit gehören alle Spin-1/2 Ketten mit gegebener Dimerisierung $\delta \in (0, 1]$, zur selben Universalitätsklasse. Diese zeichnet sich durch einen dimerisierten Grundzustand aus.

Für $s > 1/2$ gibt es - für s ganzzahlig und für s halbzahlig - immer Fixpunkte δ^*, an denen die Kette kritisch ist, und andere Fixpunkte δ^*, an denen ein Gap vorhanden ist.

7.3.2 Das nlσ-Modell in zwei Dimensionen

Die wichtigste Frage ist, ob auch in $d = 2 + 1$ der topologische Term (7.40) zur Zustandssumme beiträgt. Man erwartet einen Beitrag für jede Reihe des Gitters, der äquivalent zum Beitrag im eindimensionalen Fall ist. Falls sich das Modell in einem néelartigen Zustand befindet, so sind aber wegen der antiferromagnetischen Kopplung benachbarte Reihen entgegengesetzt ausgerichtet. Damit heben sich wenigstens lokal die Beiträge der Reihen zum topologischen Term gegenseitig auf. Nun ist noch nicht klar, ob das lokale Verschwinden des topologischen Terms ausreicht, damit dieser auch global verschwindet. So könnte z.B. durch Randeffekte oder auch dadurch, daß sich die Konfiguration ein wenig ändert und sich damit die Beiträge zweier Reihen nicht vollständig kompensieren, insgesamt doch noch ein topologischer Term übrigbleiben. Alle weitergehenden Untersuchungen [48, 13] deuten aber darauf hin, daß das hier angegebene sehr einfache Argument tatsächlich gültig bleibt und damit in $d = 2+1$ **kein topologischer Term** vorhanden ist! Dieses Resultat scheint mittlerweile allgemein akzeptiert zu sein, auch wenn ein wirklich klarer Beweis noch aussteht. Auch wir setzen dies im Folgenden voraus. Damit ist es leider auch nicht mehr möglich aus Symmetriebetrachtungen (Parität) für den topologischen Term, Rückschlüsse auf die möglichen Fixpunktwerte von δ zu ziehen.

Betrachtet man die Wirkung (7.43), so zeigt sich, daß diese in $d = 2$ nicht diagonal ist. Dafür verantwortlich ist die 2×2-Matrix γ, die die Form

$$\gamma = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\delta^2}{d-\delta^2} \\ -\frac{\delta^2}{d-\delta^2} & 1 \end{pmatrix} \tag{7.64}$$

hat. Diese Matrix ist symmetrisch und läßt sich durch eine Drehung um 45^0 diagonalisieren. Die Drehung wird beschrieben durch die Matrix

$$O = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} . \tag{7.65}$$

Die diagonalisierte Matrix $\tilde{\gamma}$ ist dann durch

$$\tilde{\gamma} = O^T \gamma O = \begin{pmatrix} 1 + \frac{\delta^2}{d-\delta^2} & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\delta^2}{d-\delta^2} \end{pmatrix} \tag{7.66}$$

gegeben. Eine räumliche Drehung läßt die Form der Wirkung (7.43) unverändert. Definiert man jetzt

$$\rho_s^a := \rho_s \cdot \tilde{\gamma}^{aa}, \tag{7.67}$$

so erhält man unterschiedliche Spinsteifigkeiten in die beiden Raumrichtungen.

$$\rho_s^1 = Js^2 = \rho_s \cdot \frac{2}{2-\delta^2} \quad ; \quad \rho_s^2 = Js^2 \cdot (1-\delta^2) = \rho_s \cdot \frac{2-2\delta^2}{2-\delta^2} \tag{7.68}$$

Für $\boldsymbol{B} = 0$ und mit $x_0 = v_s \cdot t$, $\rho_s^0 = \rho_s$ ergibt sich die Wirkung in den neuen, um 45^0 gedrehten Koordinaten zu

$$S_{eff}[\boldsymbol{m}] = \frac{1}{2} \int_\Omega d^3x \frac{\rho_s^a}{v_s} (\partial_a \boldsymbol{m})^2 . \tag{7.69}$$

Hier sieht man nun, daß für $\delta \neq 0$ die Spinwellengeschwindigkeit von der Raumrichtung abhängt. Bei üblicher Definition sind die beiden Geschwindigkeiten durch

$$v_s^1 = \sqrt{\rho_s^1 \chi_x} = v_s \sqrt{\frac{2}{2-\delta^2}} \quad ; \quad v_s^2 = \sqrt{\rho_s^2 \chi_x} = v_s \sqrt{\frac{2-2\delta^2}{2-\delta^2}} \tag{7.70}$$

gegeben. Die beiden Spinwellengeschwindigkeiten sind für $\delta \in [0,1]$ immer reell und somit physikalisch. D.h., die angewendete Transformation ist für das hier betrachtete Modell immer möglich!

Um jetzt die Standardwirkung des nlσ-Modells zu erhalten, ist es notwendig, die beiden Raumachsen unterschiedlich zu skalieren. Dadurch wird das räumliche Volumen verzerrt. Hatte man vorher ein kreisförmiges Volumen, so geht dieses jetzt in eine Ellipse über. Die Koordinaten sind dabei wie folgt zu transformieren:

$$\sqrt{\frac{2}{2-\delta^2}} x_1 \to x_1 \quad ; \quad \sqrt{\frac{2-2\delta^2}{2-\delta^2}} x_2 \to x_2 \tag{7.71}$$

Damit ergibt sich eine nackte Kopplung von

$$g_0 = \frac{v_s}{\rho_s}\frac{1}{2}\frac{2-\delta^2}{\sqrt{1-\delta^2}} = \frac{2\sqrt{2}a_0}{s}\sqrt{\frac{1-\frac{\delta^2}{2}}{1-\delta^2}} \tag{7.72}$$

in der Standardwirkung

$$S_\sigma[\boldsymbol{m}] = \frac{1}{2g_0}\int_\Omega d^3x(\partial_\mu \boldsymbol{m})(\partial^\mu \boldsymbol{m}) \tag{7.73}$$

des nlσ-Modells. In dem Abschnitt über das nlσ-Modell in einer Dimension hatten wir schon die β-Funktion in ϵ-Entwicklung berechnet. Setzt man in (7.62) $\epsilon = 1$, so erhält man

$$\boxed{\beta(\tilde{g}) = \tilde{g} - \frac{\tilde{g}^2}{2\pi}} \tag{7.74}$$

Ein Fixpunkt des Renormierungsgruppenflusses zeichnet sich durch $\beta(\tilde{g}) = 0$ aus, so daß hier im Rahmen der ϵ-Entwicklung in Ein-Loop Ordnung drei Fixpunkte vorhanden sind. Dies sind zum einen die trivialen Fixpunkte $\tilde{g} = 0\,,\,\infty$ und zum anderen der Punkt $\tilde{g}^* := 2\pi$. Wie an obiger β-Funktion abzulesen, fließt die effektive Kopplung für $\tilde{g} < \tilde{g}^*$ wieder zu Null zurück, und wir erhalten einen Néelzustand mit schwach gekoppelten Spinwellen. Ist $\tilde{g} > \tilde{g}^*$, dann fließt die effektive Kopplung zum Hochtemperaturfixpunkt $\tilde{g}^* = \infty$. Dies bedeutet, daß das Modell für diese Kopplungswerte ungeordnet ist und eine endliche Korrelationlänge besitzt. Damit besteht natürlich auch wieder eine Anregungslücke $\Delta \propto \frac{1}{\xi}$. D.h., das nl$\sigma$-Modell in $d = 2+1$ zeigt zwei Phasen:

1) Eine Néelphase für $\tilde{g} < \tilde{g}^*$ mit Spinwellen als Anregungen, wobei natürlich keine Lücke vorhanden ist.
2) Eine ungeordnete Phase für $\tilde{g} > \tilde{g}^*$ mit endlicher Korrelationslänge und einer Anregungslücke. Wie genau diese Phase aussieht [5], kann im Rahmen dieses Zugangs nicht geklärt werden.

Für $\tilde{g} = \tilde{g}^*$ befindet sich das Modell an seinem kritischen Punkt. D.h., hier zerfallen die Korrelationsfunktionen algebraisch. Nimmt man den sich ergebenden Fixpunkt bei $\tilde{g}^* = 2\pi$ ernst, so befindet sich das Modell selbst für $s = 1/2$, was $g = 4$ enspricht, in der geordneten Phase. Die β-Funktion ist aber mittlerweile sogar bis zur 4-Loop Ordnung berechnet worden [34]:

$$\beta(g) = g - \frac{g^2}{2\pi}[1 + g + \frac{5}{8\pi}g^2 + \frac{23}{12(2\pi)^2}g^3] + \mathcal{O}(g^6) \tag{7.75}$$

Hieraus ergibt sich ein Fixpunkt bei $g^* \approx 1.74$, und damit würde sich das s=1/2 Modell nicht mehr in der Néelphase befinden. Der Zahlenwert für den "Fixpunkt" ist also von der berechneten Loop Ordnung abhängig. Dies ist auch

[5] Das Wahrscheinlichste ist wohl eine Phase mit Spin-Peierls Ordnung [44].

nicht weiter erstaunlich, da man die β-Funktion in Form einer formalen Taylorreihe berechnet. Aus einer Nullstelle des Taylorpolynoms in N-ter Ordnung den Fixpunktwert zu bestimmen, ist deshalb sinnlos. Streng genommen ist noch nicht einmal klar, ob ein solcher überhaupt existiert. Es bleibt letztlich festzuhalten, daß die RG zusammen mit der ϵ-Entwicklung zwar geeignet ist, um ein Phasendiagramm zu erhalten und kritische Exponenten zu berechnen, daß man hiermit aber den kritischen Wert selber nicht bestimmen kann. Chakravarty, Halperin und Nelson [24] haben deshalb für den zweidimensionalen Spin-1/2 Heisenbergantiferromagneten einen Zusammenhang zwischen g_0/g_c und der transversalen magnetischen Suszeptibilität hergestellt und für diese das bekannte Ergebnis aus linearer Spinwellentheorie eingesetzt. Damit ergibt sich

$$\boxed{\frac{g_0}{g_c} = 0.685} \ , \tag{7.76}$$

woraus man wieder schließt, daß der Grundzustand dieses Modells néelartig ist.

Durch die Dimerisierung δ wird die nackte Kopplung g_0 gemäß (7.72) erhöht. D.h., dreht man δ auf, so nähert man sich immer mehr dem Fixpunkt $\tilde{g}^*$ und überschreitet den Fixpunktwert schließlich. Damit gibt es ein kritisches δ^*, so daß gilt:

- Für $\delta < \delta^*$ befindet sich das Modell in der Néelphase.
- Für $\delta > \delta^*$ hat es einen ungeordneten Grundzustand.

Plottet man die nackte Kopplung in Abhängigkeit der Dimerisierung (Abb. 7.3), so zeigt sich, daß diese über einen weiten Bereich nur sehr langsam mit zunehmender Dimerisierung ansteigt. Erst ab einem Bereich von $\delta \approx 0.8 - 0.9$ wächst $g(\delta)$ stärker an, um dann für $\delta \to 1$ gegen unendlich zu divergieren. Nimmt man den von Chakravarty, Halperin und Nelson für das isotrope Modell bestimmten Wert von $g_c \approx 5.84$ als Anhaltspunkt, so sollte das Modell noch bis zu hohen Dimerisierungen in der Néelphase bleiben und erst oberhalb einer kritischen Dimerisierung von $\delta_c \approx 0.8$ in eine ungeordnete Phase übergehen. Sicher ist, daß es einen solchen Phasenübergang geben muß, da $g(\delta) \to \infty$ für $\delta \to 1$. Daß der Wert für die kritische Dimerisierung innerhalb der RG letztlich unbestimmt bleibt, ist einer der Gründe, weshalb wir später auch noch lineare Spinwellentheorie auf dieses Modell anwenden werden.

7.4 Abbildung des J_x/J_y-Modells auf ein nlσ-Modell

Wir wollen nun zunächst das J_x/J_y-Modell betrachten, weil für dieses Modell der gleiche Ansatz wie zuvor verwendet werden kann, während er für die anderen beiden Modelle abgewandelt werden muß.

Wir beschränken uns auf den Fall $d = 2$ und beginnen mit dem Hamiltonian

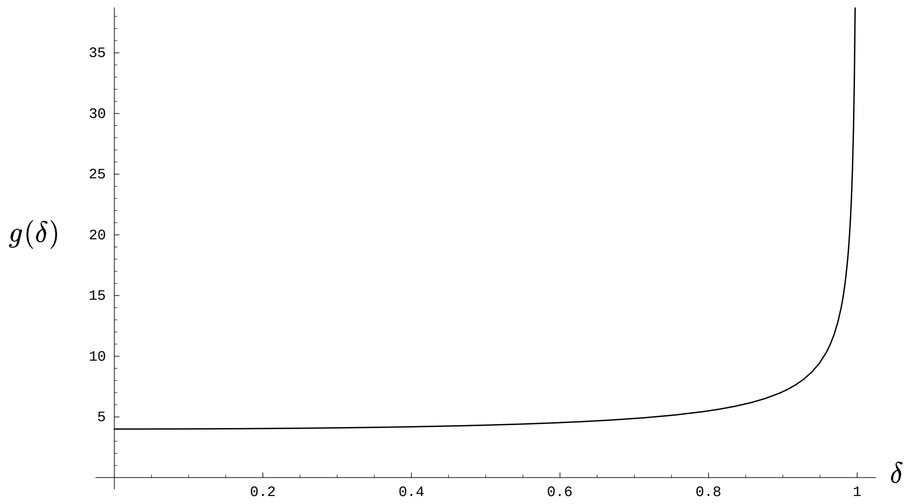

Abbildung 7.3: Abhängigkeit der Kopplung g_0 von der Dimerisierung δ

des Modells:

$$\begin{aligned} H &= J_x \sum_{i,j} \boldsymbol{S}_{i,j}\boldsymbol{S}_{i,j+1} + J_y \sum_{i,j} \boldsymbol{S}_{i,j}\boldsymbol{S}_{i+1,j} \\ &= \sum_{i\in G} \{J_x \boldsymbol{S}(i)\boldsymbol{S}(i+a_0\boldsymbol{e}^x) + J_y \boldsymbol{S}(i)\boldsymbol{S}(i+a_0\boldsymbol{e}^y)\} \end{aligned} \tag{7.77}$$

Definiert man das Verhältnis der Kopplungsstärken als $R = \frac{J_y}{J_x}$, so liest man aus (7.18) die euklidische Wirkung

$$\begin{aligned} S_E[\boldsymbol{n}] &= -\mathrm{i}s\, S_{WZ}[\boldsymbol{n}] \\ &\quad + J_x s^2 \sum_{i\in G} \int_0^\beta dt\, \{\boldsymbol{n}(i)\boldsymbol{n}(i+a_0\boldsymbol{e}^x) + R\,\boldsymbol{n}(i)\boldsymbol{n}(i+a_0\boldsymbol{e}^y)\} \end{aligned} \tag{7.78}$$

ab. Verwendet man nun wieder den Ansatz (7.24), so kann man diesen in völliger Analogie zum Treppenmodell wieder in den Wess-Zumino Term und in den kinetischen Teil der Wirkung einsetzen. Von dem Wess-Zumino Term bleibt dann in zwei Dimensionen nur der vorher mit S_2 bezeichnete Ausdruck übrig. Der topologische Term verschwindet. Auch der kinetische Anteil läßt sich mit Hilfe von (7.27a) leicht ablesen. Insgesamt erhält man:

$$S_E[\boldsymbol{n}] = \frac{J_x s^2}{2} \int_V d^2x \int_0^\beta dt \left\{(\partial_x \boldsymbol{m})^2 + R(\partial_y \boldsymbol{m})^2 + 4a_0^2(1+R)\boldsymbol{l}^2 - \mathrm{i}s\, \boldsymbol{l}(\boldsymbol{m}\times\partial_t\boldsymbol{m})\right\} \tag{7.79}$$

Das Funktionalintegral in der Zustandssumme über das $\boldsymbol{l}$-Feld ist nun wieder ein einfaches Gauß-Integral, das sich ausführen läßt. Nach dieser Integration ist die Zustandssumme gegeben durch

$$Z = \int D\boldsymbol{m}\, \delta(\boldsymbol{m}^2 - 1)\, \mathrm{e}^{-S_{eff}[\boldsymbol{m}]} \tag{7.80}$$

mit der effektiven Wirkung:

$$S_{eff}[\boldsymbol{m}] = \int_V d^2x \int_0^\beta dt \left\{ \frac{\rho_s}{2} \left[(\partial_x \boldsymbol{m})^2 + R(\partial_y \boldsymbol{m})^2 \right] + \frac{1}{v_s^2} (\partial_t \boldsymbol{m})^2 \right\} \tag{7.81}$$

Die Spinsteifigkeit, transversale magnetische Suszeptibilität und Spinwellengeschwindigkeit sind dabei durch

$$\begin{aligned} \rho_s &= J_x s^2 \\ \chi_\perp &= 4 J_x a_0^2 (1+R) \\ v_s &= \sqrt{\rho_s \chi_\perp} \end{aligned} \tag{7.82}$$

gegeben. Durch die Variablentransformation

$$x_0 = v_s \cdot t \quad \text{und} \quad \tilde{y} = \frac{1}{\sqrt{R}} \cdot y$$

geht die Wirkung (7.81) in

$$\begin{aligned} S_{nl\sigma}[\boldsymbol{m}] &= \frac{\sqrt{R}\rho_s}{2v_s} \int d^3x \, (\partial_\mu \boldsymbol{m})(\partial^\mu \boldsymbol{m}) \\ &= \frac{1}{2g} \int d^3x \, (\partial_\mu \boldsymbol{m})(\partial^\mu \boldsymbol{m}) \end{aligned} \tag{7.83}$$

über. Die Kopplung g liest nun zu

$$\boxed{g = \frac{2a_0}{s} \sqrt{\frac{1+R}{R}}} \tag{7.84}$$

ab. Führt man statt des Kopplungsverhältnisses R wieder die Dimerisierung δ als Parameter ein, so ergibt sich wegen $R = \frac{1-\delta}{1+\delta}$:

$$\boxed{g = \frac{2\sqrt{2}a_0}{s} \frac{1}{\sqrt{1-\delta}}} \tag{7.85}$$

Da wir wieder ein nlσ-Modell in Standardform erhalten haben, bleibt die zuvor schon berechnete RG natürlich gültig. Insbesondere beschreibt immer noch die β-Funktion (7.74) den Fluß der Kopplungskonstanten g. Einzig und allein die Abhängigkeit der nackten Kopplung von der Dimerisierung ist gegenüber dem Treppenmodell verändert. Allerdings gilt auch hier, daß $g(\delta)$ mit zunehmender Dimerisierung wächst und schließlich für $\delta \to 1$ divergiert. Deshalb verändert sich die Interpretation auch nicht, da im Rahmen der Renormierungsgruppe sowieso nur qualitative Aussagen zum Phasendiagramm möglich sind. Es gibt auch für dieses Modell eine kritische Dimerisierung δ_c, so daß für $\delta < \delta_c$ ein geordneter und für $\delta > \delta_c$ ein ungeordneter Zustand vorliegt. Um den Wert dieser kritischen Kopplung zu bestimmen, sind wieder andere Verfahren wie z.B. LSWT nötig.

7.5 Mapping des Plakettenmodells auf ein nlσ-Modell

Ausgangspunkt ist wieder der Hamiltonoperator des Systems. Dieser lautet hier:

$$H = J\sum_{i,j}\left\{\left[1+(-1)^i\delta\right]\boldsymbol{S}_{i,j}\boldsymbol{S}_{i+1,j}+\left[1+(-1)^j\delta\right]\boldsymbol{S}_{i,j}\boldsymbol{S}_{i,j+1}\right\} \tag{7.86}$$

Mit Hilfe der spinkohärenten Zustände und der Definitionen

$$p_x(i) = (-1)^{i_x} \qquad ; \qquad p_y(i) = (-1)^{i_y} \tag{7.87}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} <\boldsymbol{n}|H|\boldsymbol{n}> &= Js^2\sum_{i\in G}\left[1+p_x(i)\delta\right]\boldsymbol{n}(i)\boldsymbol{n}(i+a_0\boldsymbol{e}^x) \\ &+ Js^2\sum_{i\in G}\left[1+p_y(i)\delta\right]\boldsymbol{n}(i)\boldsymbol{n}(i+a_0\boldsymbol{e}^y) \end{aligned} \tag{7.88}$$

Setzt man nun wieder den gewöhnlichen Ansatz (7.24) an, so stellt man fest, daß der δ-Term nicht an das Fluktuationsfeld koppelt bzw. nur in höherer als hier betrachteter Ordnung! Dies sieht man, wenn man sich noch einmal die Entwicklung von $\boldsymbol{n}(i)\cdot\boldsymbol{n}(i+a_0\boldsymbol{e}^a)$ in (7.27a) anschaut. Der Term linear in $\boldsymbol{l}$ alterniert mit $p(i)$, während der δ-Term des Hamiltonians mit $p_x(i)$ oder $p_y(i)$ alterniert. Damit bleibt der sich ergebende Term proportional zu $\delta\cdot\boldsymbol{l}$ alternierend und verschwindet daher in erster Ordnung.

Um dies zu vermeiden und als Ergebnis wieder ein nlσ-Modell in Standardform zu erhalten, verallgemeinern wir (7.24) und führen drei Fluktuationsfelder $\boldsymbol{l}_0$, $\boldsymbol{l}_x$, $\boldsymbol{l}_y$ in folgender Weise ein:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{n}(i) &= p(i)\boldsymbol{m}(i)\sqrt{1-a_0^{2d}\left[\boldsymbol{l}_0(i)+p_x(i)\boldsymbol{l}_x(i)+p_y(i)\boldsymbol{l}_y(i)\right]^2} \\ &\quad +a_0^d\left[\boldsymbol{l}_0(i)+p_x(i)\boldsymbol{l}_x(i)+p_y(i)\boldsymbol{l}_y(i)\right] \end{aligned} \tag{7.89}$$

Damit die Bedingung $\boldsymbol{n}^2 = 1$ erfüllt ist, müssen dann die Relationen

$$\boldsymbol{m}^2 = 1 \quad ; \quad \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{l}_0 = 0 \quad ; \quad \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{l}_x = 0 \quad ; \quad \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{l}_y = 0 \tag{7.90}$$

gelten. Die Wurzel in (7.89) wird nun wieder entwickelt und alle Terme bis zu quadratischer Ordnung in den Fluktuationsfeldern werden mitgenommen. Nun ist wieder wie in (7.27a) in das Produkt $\boldsymbol{n}(i)\cdot\boldsymbol{n}(i+a_0\boldsymbol{e}^a)$ obiger Ansatz einzusetzen. Berücksichtigt man, daß $p(i)\cdot p_x(i) = p_y(i)$, $p(i)\cdot p_y(i) = p_x(i)$ und vernachlässigt die Terme proportional zu $\delta\cdot\boldsymbol{l}_i\boldsymbol{l}_j$ [6], so findet man:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{n}(i)\cdot\boldsymbol{n}(i+a_0\boldsymbol{e}^x) &= \frac{a_0^2}{2}(\partial_x\boldsymbol{m})^2+2a_0^4(\boldsymbol{l}_0^2+\boldsymbol{l}_y^2) \\ &\quad -2a_0^3\left[p(i)(\partial_x\boldsymbol{m})\cdot\boldsymbol{l}_0+p_x(i)(\partial_x\boldsymbol{m})\cdot\boldsymbol{l}_y\right] \end{aligned} \tag{7.91}$$

[6] Dies ist gerechtfertigt, da sowohl δ als auch $\boldsymbol{l}_i$ klein sein sollen und deshalb nur Terme proportional zu $\delta\cdot\boldsymbol{l}_i$ in der Entwicklung mitgenommen werden.

Tauscht man $x \leftrightarrow y$, so kann man direkt den Ausdruck für $\boldsymbol{n}(i) \cdot \boldsymbol{n}(i + a_0 \boldsymbol{e}^{\,y})$ ablesen. Für den kinetischen Teil der Wirkung erhält man dann:

$$\begin{aligned}
S_{kin}[\boldsymbol{m}, \boldsymbol{l}_0, \boldsymbol{l}_x, \boldsymbol{l}_y] &= \frac{1}{a_0^2} \int d^2x \int_0^\beta dt < \boldsymbol{n}|H|\boldsymbol{n} > \\
&= \frac{Js^2}{2} \int d^2x \int dt \left\{ (\partial_x \boldsymbol{m})^2 + (\partial_x \boldsymbol{m})^2 + 8a_0^2 \boldsymbol{l}_0^2 + 4a_0^2 (\boldsymbol{l}_x^2 + \boldsymbol{l}_y^2) \right\} \\
&- 2Js^2 a_0 \delta \int d^2x \int dt \left\{ (\partial_x \boldsymbol{m}) \cdot \boldsymbol{l}_y + (\partial_y \boldsymbol{m}) \cdot \boldsymbol{l}_x \right\}
\end{aligned} \tag{7.92}$$

Da der topologische Term wieder verschwindet, bleibt aus dem Wess-Zumino Term nur

$$S_2 = -\mathrm{i}s \int d^2x \int dt \, \boldsymbol{l}_0 \cdot (\boldsymbol{m} \times \partial_t \boldsymbol{m}) \tag{7.93}$$

übrig. In der Zustandssumme kann man jetzt die Funktionalintegrale über die Fluktuationsfelder wieder ausführen, da diese einfache Gaußintegrale sind. Das Ergebnis ist wieder eine Zustandssumme in der Form (7.80) mit der durch (7.81) gegebenen effektiven Wirkung. Die Parameter des Modells sind hier durch

$$\begin{aligned}
\rho_s &= Js^2(1 - \delta^2) \\
\chi_\perp &= 8Ja_0^2 \\
v_s &= \sqrt{\rho_s \chi_\perp}
\end{aligned} \tag{7.94}$$

gegeben. Durch die übliche Transformation $x_0 = v_s \cdot t$ erhält man die Standardform des nlσ-Modells mit einer Kopplung g, die in folgender Weise von der Dimerisierung abhängt:

$$\boxed{g = \frac{2\sqrt{2}a_0}{s} \frac{1}{\sqrt{1 - \delta^2}}} \tag{7.95}$$

Damit divergiert auch für dieses Modell $g(\delta)$, wenn $\delta \to 1$ geht. Das Phasendiagramm ist qualitativ also wieder analog zu dem des Treppenmodells. D.h., obwohl sich dieses Modell für große Dimerisierungen deutlich von den anderen betrachteten Modellen unterscheidet, da es in Plaketten statt in Spinketten zerfällt, liefert das nlσ-Modell und die zugehörige RG qualitativ das gleiche Bild. Dies ist ein typisches Beispiel dafür, daß vielfach die mikroskopische Struktur der Kopplungen unwesentlich ist und das Verhalten vor allem durch die Dimension und Symmetrie des Modells bestimmt wird (**Universalität**). Allerdings werden wir noch feststellen, daß dieses Bild der hier betrachteten Modelle teilweise zu universell ist und es doch bedeutende Unterschiede gibt.

7.6 Das nlσ-Modell für das Mäandermodell

Dieses Modell wird durch den Hamiltonian

$$H = J \sum_{i,j} \left\{ \left[1 + (-1)^i \delta \right] \boldsymbol{S}_{i,j} \boldsymbol{S}_{i+1,j} + \left[1 + (-1)^{i+j} \delta \right] \boldsymbol{S}_{i,j} \boldsymbol{S}_{i,j+1} \right\} \tag{7.96}$$

beschrieben. Benutzen wir wieder den gleichen Ansatz (7.89) wie beim Plakettenmodell und die dortigen Definitionen, so ergibt sich hier ein kinetischer Anteil der Wirkung von

$$\begin{aligned} S_{kin}[\boldsymbol{m},\boldsymbol{l}_0,\boldsymbol{l}_x,\boldsymbol{l}_y] &= \frac{Js^2}{2}\int d^2x \int dt\,\{(\partial_x \boldsymbol{m})^2 + (\partial_x \boldsymbol{m})^2 + 8a_0^2\boldsymbol{l}_0^2 + 4a_0^2(\boldsymbol{l}_x^2 + \boldsymbol{l}_y^2)\} \\ &- 2Js^2 a_0\delta \int d^2x \int dt\,\{(\partial_x \boldsymbol{m})\cdot \boldsymbol{l}_0 + (\partial_y \boldsymbol{m})\cdot \boldsymbol{l}_x\}\ . \end{aligned} \tag{7.97}$$

Der einzige Unterschied in dieser Wirkung zu der des Plakettenmodells ist, daß hier das $\boldsymbol{l}_0$-Feld an den zu $\delta\cdot(\partial_x \boldsymbol{m})$ proportionalen Term koppelt und nicht das $\boldsymbol{l}_y$-Feld. Aus dem Wess-Zumino Term erhält man wieder den Term S_2 (7.93). Integriert man nun in der Zustandssumme über die $\boldsymbol{l}$-Felder aus, so zeigt sich, daß das Funktionalintegral über das $\boldsymbol{l}_y$-Feld nur eine Konstante liefert. Die anderen beiden Integrale liefern wieder Beiträge zur effektiven Wirkung, die sich damit zu

$$S_{eff}[\boldsymbol{m}] = \int_V d^2x \int_0^\beta dt \left\{ \frac{\rho_s}{2}\left[(1-\frac{\delta^2}{2})(\partial_x \boldsymbol{m})^2 + (1-\delta^2)(\partial_y \boldsymbol{m})^2 + \frac{1}{v_s^2}(\partial_t \boldsymbol{m})^2 \right] \right\} \tag{7.98}$$

ergibt. Für die üblichen Parameter gilt bei diesem Modell:

$$\begin{aligned} \rho_s &= Js^2 \\ \chi_\perp &= 8Ja_0^2 \\ v_s &= \sqrt{\rho_s \chi_\perp} \end{aligned} \tag{7.99}$$

Dies bedeutet, daß wieder wie beim Treppenmodell unterschiedliche Spinsteifigkeiten in die beiden Raumrichtungen vorliegen. Durch entsprechende Skalierung der Raumachsen

$$x_0 = v_s \cdot t \qquad ; \qquad \tilde{x} = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{\delta^2}{2}}} \qquad ; \qquad \tilde{y} = \frac{1}{\sqrt{1-\delta^2}} \tag{7.100}$$

kann man diese Anisotropie beseitigen und das nlσ-Modell auf Standardform bringen. Der Kopplungsparameter g lautet dann für dieses Modell:

$$\boxed{g = \frac{2\sqrt{2}a_0}{s}\frac{1}{\sqrt{(1-\delta^2)(1-\frac{\delta^2}{2})}}} \tag{7.101}$$

Damit wächst auch für dieses Modell die Kopplung g mit zunehmender Dimerisierung und divergiert, falls δ gegen Eins geht. Das universelle Bild für das Phasendiagramm hat also auch für dieses Modell Bestand. Um die Vorhersagen der RG zu überprüfen und um konkrete Werte für die kritischen Kopplungen δ_c der Modelle anzugeben, werden wir im folgenden Kapitel LSWT anwenden.

Kapitel 8

Lineare Spinwellentheorie

Das Hauptproblem bei der Untersuchung von Spinsystemen ist, daß es sich bei Spins weder um Bosonen noch um Fermionen handelt. Es gelten vielmehr folgende Relationen:

$$[S^a(i), S^b(j)] = 0 \quad \text{für } i \neq j \tag{8.1a}$$

$$[S^a(i), S^b(i)] = \mathrm{i}\epsilon^{ab}_c S^c(i) \tag{8.1b}$$

Deshalb versucht man häufig, die Spinoperatoren durch Bose- oder Fermioperatoren auszudrücken. Eine der ältesten dieser Methoden ist die *Bosonisierung* von Holstein und Primakoff [17]. Dabei werden die Spinoperatoren auf folgende Weise durch Boseoperatoren ausgedrückt:

$$S^z = s - a^+ a, \quad S^- = \sqrt{2s}\, a^+ \sqrt{1 - \frac{a^+ a}{2s}} \tag{8.2}$$

Es ist leicht nachzurechnen, daß hiermit die Kommutatorrelationen (8.1a , 8.1b) und die Zwangsbedingung $\boldsymbol{S}^2 = s(s+1)$ erfüllt sind. Die Hauptschwierigkeit bei Verwendung der Holstein-Primakoff Transformation liegt in der in (8.2) auftretenden Wurzel. Um handhabbare Größen zu erhalten, bleibt nur die Entwicklung der Wurzel in Potenzen von 1/s. Nimmt man von der Wurzel nur die Eins mit, so erhält man die sogenannte *lineare Spinwellentheorie* (LSWT).

Wir wollen nun zuerst diese Entwicklung im Sinne einer Renormierungsgruppe betrachten. Dazu nehmen wir die Greensche Funktion im wechselwirkungsfreien Fall und berechnen den zugehörigen ersten Selbstenergiegraphen. Aufsummation gemäß der Dyson-Gleichung zeigt dann, daß man es nur für $d = 3 + 1$ mit einer renormierbaren Theorie zu tun hat. Für $d < 4$ erhält man hingegen Potenzdivergenzen in der Greenschen Funktion, die nicht handhabbar sind. Es bleibt dann nur eine ϵ-Entwicklung um $d = 4 - \epsilon$ und - für den uns interessierenden Fall $d = 2 + 1$ - anschließende Auswertung bei $\epsilon = 1$.
Dies ist sehr ähnlich zur RG des nlσ-Modells, wobei dieser Zugang gegenüber dem nlσ-Modell noch ein zusätzliches Problem aufweist. Durch die Entwicklung

der Wurzel ist nämlich die Zwangsbedingung $\boldsymbol{S}^2 = s(s+1)$ verletzt. D.h., nach der Entwicklung befindet man sich in einem größeren Hilbertraum, der auch unphysikalische Zustände enthält. Falls diese Zustände wesentlich beitragen, hat das errechnete Verhalten nichts mehr mit der Realität zu tun! Ausgangspunkt der LSWT für ein antiferromagnetisches Heisenbergmodell ist genau wie beim nlσ-Modell der klassische Néelzustand, so daß die LSWT auch in dieser Hinsicht keinerlei Vorteile bietet.

Warum beschäftigt man sich also überhaupt noch mit Spinwellentheorie?
Die Rechtfertigung liegt in den Resultaten. So stimmt z.B. die Untergittermagnetisierung, die man in linearer Ordnung durch Spinwellentheorie erhält, in $d = 2, 3$ hervorragend mit experimentellen und numerischen Ergebnissen überein. In einer Dimension versagt diese Theorie hingegen völlig.

Fazit: In $d = 2, 3$ kann LSWT erste Hinweise auf das Verhalten der betrachteten Modelle liefern. Man sollte sich aber immer - besonders bei unerwarteten Ergebnissen - der oben angesprochenen Probleme bewußt sein. Da bisher kein besserer analytischer Zugang bekannt ist, mit dem sich auch quantitative Resultate erzielen lassen [1], bleibt einem vorerst nichts anderes übrig, als sich mit diesen Mängeln abzufinden.

8.1 LSWT für das Treppenmodell und allgemeinere Überlegungen

Wir gehen wieder wie im vorherigen Kapitel von einer auf d Dimensionen verallgemeinerten Version des Treppenmodells aus. Dies eröffnet die Möglichkeit, zusätzlich zu den konkreten Ergebnissen für den hier interessierenden Fall $d = 2$, die Spinwellentheorie etwas allgemeiner zu beleuchten.

Da das Gitter bipartit ist, läßt es sich als $G = A \oplus B$ schreiben. Außerdem gilt für ein Quadratgitter mit einatomiger Basis, daß die Koordinationszahl $z = 2\,d$ beträgt, d.h., jeder Gitterplatz hat $2d$ Nachbarn. Wir schreiben jetzt den Hamiltonoperator in der Form

$$H = \sum_{i\in A}\sum_{a=1}^{d}[J(1+\delta)\boldsymbol{S}(i)\boldsymbol{S}(i+a_0\boldsymbol{e}^a) + J(1-\delta)\boldsymbol{S}(i)\boldsymbol{S}(i-a_0\boldsymbol{e}^a)]\,, \qquad (8.3)$$

die für die LSWT geeigneter ist als die im vorherigen Kapitel benutzte (7.22). Dabei ist die Kopplung wie immer antiferromagnetisch ($J > 0$), und da $i \in A$ ist, sind $i \pm \boldsymbol{e}^a \in B$ für $a = 1, 2, ..., d$. Ferner gilt $S^+ = S_x + \mathrm{i}S_y$, $S^- = S_x - \mathrm{i}S_y$

[1] Wie wir im vorherigen Abschnitt festgestellt haben, liefert die RG immer nur qualitative Aussagen; eine Berechnung von kritischen Kopplungen etc. ist damit nicht möglich.

und damit:

$$\begin{aligned} H \ &= \sum_{i\in A}\sum_{a=1}^{d} \ \Big\{ J(1+\delta)\Big[\frac{1}{2}\big(S^+(i)S^-(i+a_0\boldsymbol{e}^a)+S^-(i)S^+(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\big) \\ &\qquad +S^z(i)S^z(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\Big] \\ &\qquad +J(1-\delta)\Big[\frac{1}{2}\big(S^+(i)S^-(i-a_0\boldsymbol{e}^a)+S^-(i)S^+(i-a_0\boldsymbol{e}^a)\big) \\ &\qquad +S^z(i)S^z(i-a_0\boldsymbol{e}^a)\Big]\Big\} \end{aligned} \tag{8.4}$$

Ausgangspunkt der Entwicklung ist jetzt wieder wie für das nlσ-Modell der klassische Néelzustand. Da das Gitter bipartit ist, bedeutet dies, daß eines der Untergitter mit Spin ups und das andere mit Spin downs besetzt ist. Für die Spinwellentheorie ist es deshalb notwendig, auf den Untergittern A, B unabhängig voneinander jeweils eine Holstein-Primakoff Transformation durchzuführen.

$$x\in A:\ S^z(x)=s-a^+(x)a(x)\ ;\ S^-(x)=\sqrt{2s}\,a^+(x)\sqrt{1-\frac{a^+(x)a(x)}{2s}} \tag{8.5a}$$

$$x\in B:\ S^z(x)=-s+b^+(x)b(x)\ ;\ S^-(x)=\sqrt{2s}\sqrt{1-\frac{b^+(x)b(x)}{2s}}b(x) \tag{8.5b}$$

Das Problem ist nun, daß die bosonischen Besetzungszahloperatoren a^+a und b^+b unter einer Wurzel stehen und die Wirkungsweise eines solchen "Wurzeloperators" nur durch seine Entwicklung definiert werden kann. Eine systematische Entwicklung ist möglich, falls man annimmt, daß $1/s \ll 1$ ist [2]. Die führenden Terme sind dann durch

$$x\in A:\quad S^-(x)=\sqrt{2s}\,a^+(x)\left[1-\frac{1}{4s}a^+(x)a(x)\right]+\mathcal{O}\left(\frac{1}{s^2}\right) \tag{8.6a}$$

$$x\in B:\quad S^-(y)=\sqrt{2s}\left[1-\frac{1}{4s}b^+(x)b(x)\right]b(y)+\mathcal{O}\left(\frac{1}{s^2}\right) \tag{8.6b}$$

gegeben. Lineare Spinwellentheorie erhält man nun, wenn man nur den ersten Term der Entwicklung berücksichtigt. Der Hamiltonoperator (8.4) wird dann bilinear und nimmt die Form

$$\begin{aligned} H_{bil} \ &= \sum_{i\in A}\sum_{a=1}^{d} \ \big\{ J(1+\delta)\big[sa(i)b(i+a_0\boldsymbol{e}^a)+sa^+(i)b^+(i+a_0\boldsymbol{e}^a) \\ &\qquad -s^2+sa^+(i)a(i)+sb^+(i+a_0\boldsymbol{e}^a)b(i+a_0\boldsymbol{e}^a)\big] \\ &\qquad +J(1-\delta)\big[sa(i)b(i-a_0\boldsymbol{e}^a)+sa^+(i)b^+(i-a_0\boldsymbol{e}^a) \\ &\qquad -s^2+sa^+(i)a(i)+sb^+(i-a_0\boldsymbol{e}^a)b(i-a_0\boldsymbol{e}^a)\big]\big\} \end{aligned} \tag{8.7}$$

[2] Die Ergebnisse sind also wie beim nlσ-Modell erst einmal nur für große s gültig.

an. Wesentlich einfacher sieht dieser Operator aus, wenn wir durch die Fouriertransformation

$$a(i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}(i)} a_{\boldsymbol{k}} \quad ; \quad a_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}(i)} a(i) \tag{8.8a}$$

$$b(i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}(i)} b_{\boldsymbol{k}} \quad ; \quad b_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}(i)} b(i) \tag{8.8b}$$

zum Impulsraum übergehen. Wir erhalten dann nämlich

$$\begin{aligned} H &= -NJs^2 d \\ &\quad + Jsz \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ a^+_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}} + b^+_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}} + \gamma_{\boldsymbol{k}} \left(a_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}} + a^+_{\boldsymbol{k}} b^+_{\boldsymbol{k}} \right) + \delta\beta_{\boldsymbol{k}} \left(a_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}} - a^+_{\boldsymbol{k}} b^+_{\boldsymbol{k}} \right) \right\} , \end{aligned} \tag{8.9}$$

wobei folgende Größen neu definiert worden sind:

$$\gamma_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{z} \sum_{a=1}^{d} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}a_0\boldsymbol{e}^a} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}a_0\boldsymbol{e}^a} \right) = \frac{1}{d} \sum_{l=1}^{d} \cos(k_l a_0) \tag{8.10a}$$

$$\beta_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{z} \sum_{a=1}^{d} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}a_0\boldsymbol{e}^a} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}a_0\boldsymbol{e}^a} \right) = \frac{\mathrm{i}}{d} \sum_{m=1}^{d} \sin(k_m a_0) \tag{8.10b}$$

Weiter vereinfachen läßt sich (8.9), wenn man eine neue Größe

$$A = \gamma_{\boldsymbol{k}} + \delta\beta_{\boldsymbol{k}} \tag{8.11}$$

definiert. Da $\gamma_{\boldsymbol{k}} \in \mathcal{R}$ und $\beta_{\boldsymbol{k}} \in \mathcal{C} \setminus \mathcal{R}$ ist das komplex Konjugierte durch $A^* = \gamma_{\boldsymbol{k}} - \delta\beta_{\boldsymbol{k}}$ gegeben. Mit der neuen Definition schreibt sich der Hamiltonian nun als:

$$\boxed{H = -NJs^2 d + Jsz \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ a^+_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}} + b^+_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}} + A a_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}} + A^* a^+_{\boldsymbol{k}} b^+_{\boldsymbol{k}} \right\}} \tag{8.12}$$

Ein solcher bilinearer Operator läßt sich immer diagonalisieren [3]! Da hier nur zwei verschiedene Bosonen vorhanden sind, läßt sich die Diagonalisierung noch leicht "von Hand" mit Hilfe einer sog. *Bogoliubov-Transformation* durchführen. Dazu führt man zwei neue Operatoren

$$a_{\boldsymbol{k}} = u^*_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} d^+_{\boldsymbol{k}} \quad ; \quad b_{\boldsymbol{k}} = u^*_{\boldsymbol{k}} d_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} c^+_{\boldsymbol{k}} \tag{8.13}$$

ein. Diese neuen Operatoren $c_{\boldsymbol{k}}$, $d_{\boldsymbol{k}}$ sollen ebenso wie die alten $a_{\boldsymbol{k}}$, $b_{\boldsymbol{k}}$ wieder bosonische Vertauschungsrelationen erfüllen, d.h. $[c_{\boldsymbol{k}}, c^+_{\boldsymbol{k}}] = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}}$ und $[d_{\boldsymbol{k}}, d^+_{\boldsymbol{k}}] =$

[3] Der interessantere bosonische Fall findet sich ausführlich in Anhang A.

$\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}}$. Daraus ergibt sich dann folgende Bedingung für die komplexen Zahlen $u_{\boldsymbol{k}}, v_{\boldsymbol{k}}$:

$$[a_{\boldsymbol{k}}, a_{\boldsymbol{k}}^+] = |u_{\boldsymbol{k}}|^2[c_{\boldsymbol{k}}, c_{\boldsymbol{k}}^+] + |v_{\boldsymbol{k}}|^2[d_{\boldsymbol{k}}^+, d_{\boldsymbol{k}}] = 1$$
$$[b_{\boldsymbol{k}}, b_{\boldsymbol{k}}^+] = |u_{\boldsymbol{k}}|^2[d_{\boldsymbol{k}}, d_{\boldsymbol{k}}^+] + |v_{\boldsymbol{k}}|^2[c_{\boldsymbol{k}}^+, c_{\boldsymbol{k}}] = 1$$

$$\Longrightarrow \boxed{|u_{\boldsymbol{k}}|^2 - |v_{\boldsymbol{k}}|^2 = 1} \tag{8.14}$$

Nun muß die Bogoliubov-Transformation (8.13) in den Hamiltonian (8.12) eingesetzt werden, wodurch sich

$$\begin{aligned} H = \quad & -NJs^2d \quad +Jsz\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{|u_{\boldsymbol{k}}|^2 + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 + Au^*v + A^*uv^* - 1\right\} \\ & +Jsz\sum_{\boldsymbol{k}} \quad \Big\{ \left(|u_{\boldsymbol{k}}|^2 + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 + Au^*v + A^*uv^*\right) c_{\boldsymbol{k}}^+ c_{\boldsymbol{k}} \\ & \qquad + \left(|u_{\boldsymbol{k}}|^2 + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 + Au^*v + A^*uv^*\right) d_{\boldsymbol{k}}^+ d_{\boldsymbol{k}} \\ & \qquad + \left(2uv + Av^2 + A^*u^2\right) c_{\boldsymbol{k}}^+ d_{\boldsymbol{k}}^+ \\ & \qquad + \left(2u^*v^* + A(u^*)^2 + A^*(v^*)^2\right) c_{\boldsymbol{k}} d_{\boldsymbol{k}}\Big\} \end{aligned} \tag{8.15}$$

ergibt. Die Bedingung für das Verschwinden der Nichtdiagonalelemente lautet somit:

$$\boxed{2uv + Av^2 + A^*u^2 = 0} \tag{8.16}$$

Die komplexen Zahlen u, v müssen also sowohl der Bedingung (8.14) genügen, damit wieder bosonische Vertauschungsrelationen gelten, als auch der Bedingung (8.16), damit der Hamiltonoperator diagonal wird. Die erste wird automatisch erfüllt, wenn man die Unbekannten wie folgt ansetzt:

$$\begin{aligned} u &= \cosh(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \\ v &= \sinh(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \\ A &= A_0\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \end{aligned} \tag{8.17}$$

Teilt man die Gleichung (8.16) in Real- und Imaginärteil auf, so erhält man aus der Gleichung für den Imaginärteil, daß $\alpha = \frac{\phi}{2}$, $\beta = -\frac{\phi}{2}$ und damit $\alpha = -\beta$ gelten muß. Nun kann man auch noch den Realteil auswerten und erhält daraus:

$$x = \frac{1}{4}\ln\left(\frac{1 - A_0}{1 + A_0}\right) \tag{8.18}$$

Setzt man dieses nun in (8.15) ein, so verschwinden die Diagonalelemente wie gewünscht, und der Hamiltonian wird diagonal in den neuen Operatoren.

$$\boxed{H = -NJds(s+1) + Jsz\sum_{\boldsymbol{k}}\sqrt{1 - \left(\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - \delta^2\beta_{\boldsymbol{k}}^2\right)}\left(c_{\boldsymbol{k}}^+c_{\boldsymbol{k}} + d_{\boldsymbol{k}}^+d_{\boldsymbol{k}} + 1\right) \quad (8.19)}$$

8.1.1 Korrelationsfunktionen und Grundzustandsenergie

Da wir nun den Hamiltonoperator in diagonaler Form kennen, lassen sich sehr einfach Korrelationsfunktionen und Grundzustandsenergien für verschiedene Dimensionen d und Dimerisierungen δ berechnen.

Untergittermagnetisierung für $T = 0$: Um die Untergittermagnetisierung zu erhalten, muß die Größe $< S_A^z >$ berechnet werden. Wäre der Grundzustand dieses Modells der klassische Néelzustand, so müßte die Untergittermagnetisierung pro Gitterplatz $\frac{<S_A^z>}{N/2} = s$ sein. Da wir es aber hier mit einem quantenmechanischen Modell zu tun haben, erwartet man, daß selbst bei einem néelartigen Zustand die Untergittermagnetisierung durch Fluktuationen wesentlich reduziert wird. Falls der Grundzustand sogar ungeordnet seien sollte, so erwartet man, daß die Untergittermagnetisierung vollständig verschwindet.

Mit Hilfe von Gleichung (8.2) folgt:

$$< S_A^z >= \sum_{x\in A} < S_x^z >= \sum_{x\in A} < s - a_x^+ a_x >= \frac{N}{2} s - \sum_{\boldsymbol{k}} < a_{\boldsymbol{k}}^+ a_{\boldsymbol{k}} > \tag{8.20a}$$

Geht man jetzt wieder gemäß (8.13) zu den neuen Operatoren $c_{\boldsymbol{k}}$, $d_{\boldsymbol{k}}$ über, so folgt weiter:

$$\begin{aligned} \sum_{\boldsymbol{k}} < a_{\boldsymbol{k}}^+ a_{\boldsymbol{k}} > &= \sum_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}^2 = \sum_{\boldsymbol{k}} \sinh^2(x_{\boldsymbol{k}}) = \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \{\cosh(2x_{\boldsymbol{k}}) - 1\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 - (\gamma_{\boldsymbol{k}}^2 - \delta^2 \beta_{\boldsymbol{k}}^2)}} - 1 \right\} \end{aligned} \tag{8.20b}$$

Die diskrete Summe läßt sich durch ein Integral ersetzen. Damit ergibt sich eine Untergittermagnetisierung pro Gitterplatz von

$$\boxed{\begin{aligned} < S_x^z > &= s + \frac{1}{2} \qquad\qquad (8.20\text{c}) \\ &- \frac{1}{2(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_1 \cdots dk_d}{\sqrt{1 - \frac{1}{d^2} \left[\left(\sum_{l=1}^d \cos(k_l) \right)^2 + \delta^2 \left(\sum_{m=1}^d \sin(k_m) \right)^2 \right]}} \end{aligned}}$$

Untergittermagnetisierung für eine Dimension ohne Dimerisierung Zuerst soll nun die Untergittermagnetisierung für die homogene, antiferromagnetische Heisenbergkette in linearer Spinwellentheorie berechnet werden. Hierbei reduziert sich (8.20c) zu

$$< S_x^z >= s + \frac{1}{2} - \underbrace{\frac{1}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{1}{|\sin(k)|}}_{\to\infty} = -\infty \,. \tag{8.21}$$

Die Korrekturen der Untergittermagnetisierung sind also in einer Dimension divergent für kleine Wellenzahlen k. Dies ist nicht weiter erstaunlich, denn Ausgangspunkt der Spinwellentheorie ist der klassische Néelzustand, der die kontinuierliche SU(2)-Symmetrie spontan bricht. Das aus der Feldtheorie bekannte Theorem von Coleman [49] besagt aber, daß spontane Symmetriebrechung in $d = 1+1$ nicht möglich ist wegen der mit den Goldstone-Bosonen verbundenen Infrarotdivergenzen. Den Goldstone-Bosonen entsprechen hier gerade die Spinwellen mit kleinen Wellenzahlen k, so daß die Divergenz in (8.21) nichts anderes ist als die Infrarotdivergenz nach dem Colemanschen Theorem. Die auftretenden Goldstone-Moden kann man sich bildlich als langsamen Verdrillungen der Spinkette vorstellen [4](Abb. 8.1).

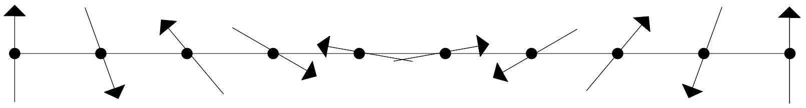

Abbildung 8.1: langsame Verdrillung des Néelzustandes der antiferromagnetischen Kette

Wir halten also fest, daß die LSWT in einer Dimension aufgrund der auftretenden Infrarotdivergenzen versagt!

Untergittermagnetisierung für $d = 2$ mit Dimerisierung Gehen wir wiederum von (8.20c) aus und setzen ferner $s = 1/2$, so ergibt sich für diesen Fall folgender Ausdruck für die Untergittermagnetisierung:

$$< S_x^z >= 1 - \frac{1}{2(2\pi)^2}\int\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_1\, dk_2}{\sqrt{1-\frac{1}{4}\left\{[\cos(k_1)+\cos(k_2)]^2 + \delta^2\,[\sin(k_1)+\sin(k_2)]^2\right\}}} \tag{8.22}$$

Dieses Integral kann nun numerisch berechnet werden. Man erhält folgende Werte für die Untergittermagnetisierung in Abhängigkeit von der Dimerisierung δ:

[4]Da es in einer Dimension noch nicht einmal einen néelartigen Zustand gibt, ist diese Darstellung natürlich etwas fraglich.

Dimerisierung δ	Untergittermagnetisierung $< S^z >$
0	0.3034
0.1	0.3010
0.2	0.2936
0.3	0.2807
0.4	0.2610
0.5	0.2328
0.6	0.1925
0.7	0.1330
0.8	0.0385
0.9	-0.1435
1.0	$-\infty$

Für den isotropen zweidimensionalen Heisenbergantiferromagneten ergibt sich eine Untergittermagnetisierung, die durch Fluktuationen vom klassischen Wert 0.5 auf 0.3 reduziert worden ist. Mit zunehmender Dimerisierung nimmt dann, wie erwartet, die Tendenz zur Unordnung zu; die Untergittermagnetisierung nimmt immer weiter ab. Da das zweidimensionale Modell für $\delta = 1$ in ungekoppelte Spinketten zerfällt, erhält man natürlich für diesen Fall wieder die gleichen Infrarotdivergenzen wie zuvor. Diese machen sich aber auch schon bemerkbar, wenn die Ketten noch schwach gekoppelt sind, und sorgen dafür, daß die Untergittermagnetisierung negativ wird. Trotzdem kann als Indiz für den Zusammenbruch des néelartigen Zustands dienen, wenn die Korrektur der Untergittermagnetisierung durch Quantenfluktuationen die Größenordnung der klassischen Untergittermagnetisierung erreicht. Die Frage ist also, für welche Dimerisierung δ_c die Untergittermagnetisierung verschwindet. Wie an obiger Tabelle ersichtlich muß δ_c zwischen 0.8 und 0.9 liegen. Errechnet man deshalb noch einige weitere Werte für diesen Bereich und interpoliert, so erhält man:

$$\boxed{\delta_c = 0.8286} \tag{8.23}$$

Dies entspricht einem kritischen Verhältnis von schwacher zu starker Kopplung von

$$\boxed{R_c = \frac{1-\delta}{1+\delta} = 0.094}\,. \tag{8.24}$$

Die LSWT sagt also einen néelartigen Grundzustand voraus, der sehr stabil gegenüber einer Störung durch Dimerisierung ist. Erst wenn die schwache Kopplung weniger als 10% der starken Kopplung ausmacht, wird diese langreichweitige Ordnung zerstört! Dies entspricht dem Bild, das wir durch die RG des nlσ-Modells gewonnen hatten, wo die Kopplung g auch erst bei sehr hohen Dimerisierungen merklich anwuchs. Die Werte für die Untergittermagnetisierung in Abhängigkeit von der Dimerisierung sind noch einmal graphisch in Abb. (8.2) dargestellt.

Um nun zu überprüfen, inwieweit die LSWT gültig ist, wollen wir die Fluktuation der Abweichung des Spins von seinem klassischen Wert pro Gitterplatz

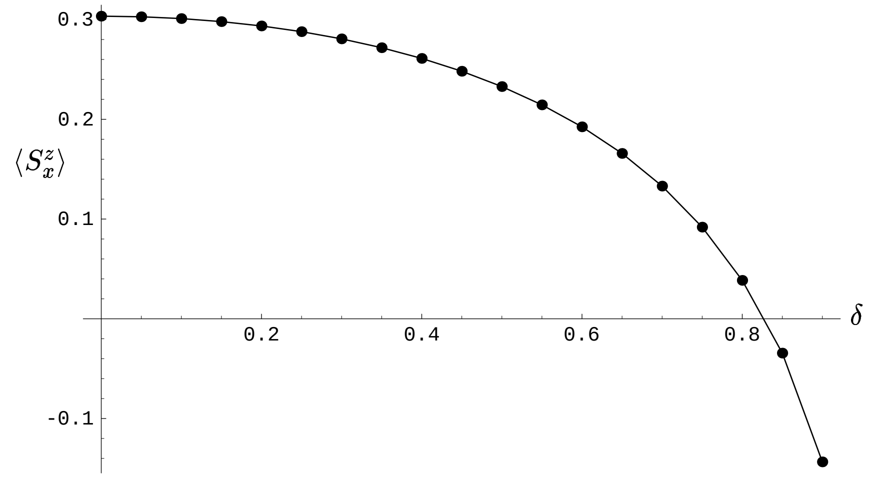

Abbildung 8.2: Untergittermagnetisierung in Abhängigkeit von δ

berechnen. Diese ist als

$$\Delta n_x = \sqrt{\langle n_x^2 \rangle - \langle n_x \rangle^2} \tag{8.25}$$

definiert, wobei n_x die Abweichung des Spins von seinem klassischen Wert beschreibt. Diese Abweichung kann für das ursprüngliche Spinsystem nicht beliebig groß werden, da S^z nur die diskreten Werte $-s, -s+1, \cdots, s$ annimmt. Damit gilt die Zwangsbedingung

$$n_x \leq 2s\,. \tag{8.26}$$

Durch die Holstein-Primakoff Transformation wird diese Abweichung gemäß der Relation $S_x^z = s - a_x^+ a_x$ als Boson behandelt. Für den bosonischen Besetzungszahloperator gibt es aber nach Entwicklung der Wurzel in (8.2) keine obere Schranke mehr, da der constraint $\boldsymbol{S}^2 = s(s+1)$ und damit dann auch die Bedingung (8.26) verletzt ist! Das bedeutet, daß man innerhalb der Spinwellentheorie auch unphysikalische Zustände mit $n_x > 2s$ erhält. Da mit zunehmender Dimerisierung die Untergittermagnetisierung immer weiter sinkt, also der Erwartungswert des bosonischen Besetzungszahloperators $\langle a_x^+ a_x \rangle$ wächst, nimmt auch der Einfluß dieser unphysikalischen Zustände auf den errechneten Grundzustand zu. Eine möglicherweise brauchbare Bedingung, um den Gültigkeitsbereich der Spinwellennäherung abzuschätzen, ist dann durch

$$\langle n_x \rangle + \Delta n_x < 2s \tag{8.27a}$$

gegeben [29], was äquivalent zu

$$\langle S_x^z \rangle - \Delta n_x > -s \tag{8.27b}$$

ist. Δn_x läßt sich einfach berechnen, indem man die alten Operatoren wieder durch die neuen ersetzt. In einer zur Untergittermagnetisierung analogen Rechnung findet man dann:

$$\Delta n_x = \frac{1}{2(2\pi)^2} \int\!\!\int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{1}{4}\left\{ \left(\sum_{i=1}^{2} \cos(k_i)\right)^2 + \delta^2 \left(\sum_{i=1}^{2} \sin(k_i)\right)^2 \right\}} - 1} \tag{8.28}$$

In der Abb. (8.3) ist jetzt die Funktion $\frac{1}{2} + \langle S_x^z \rangle - \Delta n_x$ in Abhängigkeit von der Dimerisierung dargestellt. Nach Gleichung (8.27b) ist die Spinwellennäherung gültig, solange diese Funktion größer Null ist. Wie man am Graphen abliest, sollte also LSWT bis zu einer Dimerisierung von

$$\boxed{\delta = 0.694} \tag{8.29}$$

brauchbar sein.

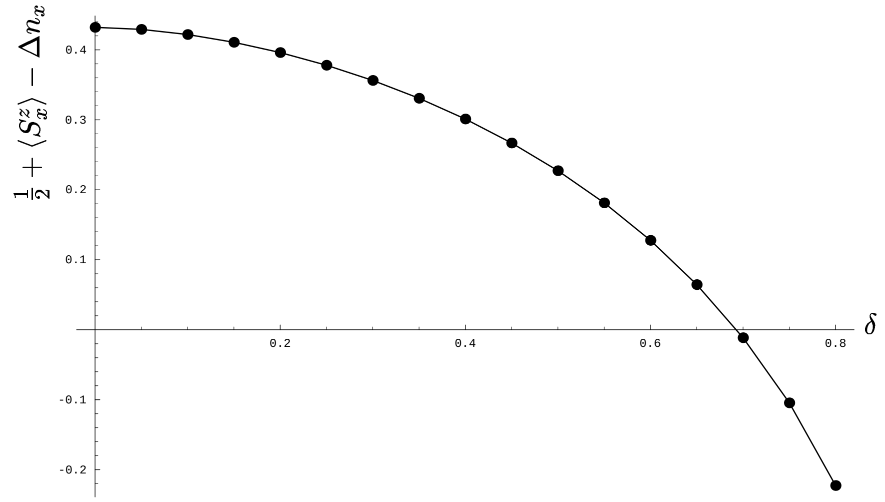

Abbildung 8.3: Graph zur Gültigkeit der LSWT gemäß Glg. (8.27b)

Das Resultat (8.23), das wir für die kritische Dimerisierung erhalten haben, liegt also in einem Bereich, in dem die LSWT wohl schon nicht mehr glaubwürdig ist! Deshalb können wir innerhalb der LSWT auch nur schließen, daß die kritische Dimerisierung, an der die langreichweitige Ordnung verschwindet, größer als $\delta \approx 0.7$ sein muß.

Grundzustandsenergie in zwei Dimensionen Als nächstes wollen wir die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von der Dimerisierung berechnen, um daraus eine Bedingung für einen strukturellen Phasenübergang des Gitters zu erhalten. Da die Besetzungszahloperatoren $c_{\boldsymbol{k}}^{+} c_{\boldsymbol{k}}$ und $d_{\boldsymbol{k}}^{+} d_{\boldsymbol{k}}$ für den Grundzustand jeweils Null ergeben, liest man aus dem Hamiltonoperator (8.19) die GZ-Energie zu

$$E_0 = -2NJs\big(s + \beta(\delta)\big) \tag{8.30}$$

ab. Dabei ist die Funktion $\beta(\delta)$ als

$$\beta(\delta) = 1 - \frac{1}{(2\pi)^2} \int\!\!\int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \sqrt{1 - \frac{1}{4}\left\{\left(\sum_{l=1}^{2} \cos(k_l)\right)^2 + \delta^2 \left(\sum_{m=1}^{2} \sin(k_m)\right)^2\right\}} \tag{8.31}$$

gegeben. Numerische Integration liefert dann folgende Werte:

Dimerisierung δ	$\beta(\delta)$
0	0.579
0.1	0.580
0.2	0.584
0.3	0.591
0.4	0.601
0.5	0.613
0.6	0.630
0.7	0.651
0.8	0.677
0.9	0.712

Die Dimerisierung senkt also die GZ-Energie des magnetischen Systems immer weiter ab! Dem entgegen wirkt die elastische Energie, die aufgewendet werden muß, um die Atome aus ihren Ruhepositionen auszulenken. Für alle vier Modelle gilt dabei, daß von den vier Nachbarn eines jeden Gitterplatzes zwei ihren Abstand zu diesem Platz verkürzen, während der Abstand zu den anderen beiden Plätzen größer wird. Da δ proportional zur Auslenkung ist, ergibt sich für alle Modelle in harmonischer Näherung eine elastische Energie pro Gitterplatz von $E_{elast} = \frac{K}{2}\delta^2$, wobei $K > 0$ eine Konstante ist [5]. Bei einem Gitter mit N Plätzen gibt es somit insgesamt eine elastische Energie von

$$E_{elast} = \frac{NK}{2}\delta^2 \,. \tag{8.32}$$

Das Gitter wird sich also selbsttätig verzerren, falls der Gewinn an magnetischer Energie größer ist als der Verlust an elastischer. Wir betrachten deshalb die Gesamtenergie des Systems und führen eine Taylorentwicklung um $\delta^2 = 0$ durch:

$$E_{ges}(\delta^2) = E_{ges}(\delta^2 = 0) + \left.\frac{\partial E_{ges}}{\partial \delta^2}\right|_{\delta^2=0} \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^4) \tag{8.33}$$

[5]Damit das quadratische Gitter stabil ist, sind eigentlich auch noch die "elastischen Kopplungen" auf den Diagonalen zu berücksichtigen. Durch die treppenartige Verzerrung bleibt aber der Diagonalabstand unverändert, so daß hierdurch kein Beitrag zur elastischen Energie entsteht.

Die Bedingung für einen Phasenübergang zwischen verzerrtem und unverzerrtem Gitter lautet dann in erster Ordnung

$$\left.\frac{\partial E_{ges}}{\partial \delta^2}\right|_{\delta^2=0} = \frac{NK}{2} - \frac{NJs}{16\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \frac{\left(\sum_{m=1}^{2}\sin(k_m)\right)^2}{\sqrt{1-\frac{1}{4}\left(\sum_{l=1}^{2}\cos(k_l)\right)^2}} = 0\,. \tag{8.34}$$

Wertet man das Integral numerisch aus, so folgt die Bedingung

$$\boxed{\frac{K}{Js} = 0.5222}\,. \tag{8.35}$$

Falls also $0 \leq \frac{K}{Js} < 0.522$, so wird mehr magnetische Energie gewonnen als elastische verloren, und das Gitter verzerrt sich. Ist hingegen $\frac{K}{Js} > 0.522$, so wird mehr elastische Energie verloren als magnetische gewonnen, und damit ändert das Gitter seine Struktur nicht. Hier erkennt man einen wesentlichen Unterschied zum Spin-Peierls Übergang in einer Dimension: **Während sich die Heisenbergkette unabhängig von der Größe der elastischen Energie immer verzerrt, gibt es in zwei Dimensionen einen solchen Phasenübergang nur unter bestimmten Bedingungen!** Dies liegt daran, daß für die Kette ohne Frustration die magnetische Energie mit $E \propto \delta^{4/3}$ skaliert, während sie sich für dieses zweidimensionale Modell wie $E \propto \delta^2$ verhält. Da in beiden Fällen $E_{elast} \propto \delta^2$ gilt, gewinnt in einer Dimension die magnetische Energie immer, während hier ein Phasenübergang nur unter obiger Bedingung eintritt. Die hergeleitete Bedingung (8.35) sollte dabei auch quantitativ brauchbar sein, da die LSWT für das homogene Modell hervorragende Resultate liefert und wir hier um $\delta = 0$ entwickelt haben.

8.2 Das J_x/J_y-Modell

Genauso wie für das Treppenmodell läßt sich die Holstein-Primakoff Transformation auch für das J_x/J_y-Modell durchführen. Da die Rechnung weitgehend analog verläuft, soll sie hier nur kurz wiedergegeben werden. Außerdem beschränken wir uns direkt auf den zweidimensionalen Fall.

Das J_x/J_y-Modell wird durch den Hamiltonian

$$\begin{aligned} H &= J_1 \sum_{i\in A} \boldsymbol{S}(i)\left(\boldsymbol{S}(i+a_0\boldsymbol{e}^1) + \boldsymbol{S}(i-a_0\boldsymbol{e}^1)\right) \\ &+ J_2 \sum_{i\in A} \boldsymbol{S}(i)\left(\boldsymbol{S}(i+a_0\boldsymbol{e}^2) + \boldsymbol{S}(i-a_0\boldsymbol{e}^2)\right) \end{aligned} \tag{8.36}$$

beschrieben. Führt man Auf- und Absteigeoperatoren ein, so kann man diesen als

$$
\begin{aligned}
H \;=& \sum_{a=1}^{2}\sum_{i\in A} \quad \left\{ \frac{J_a}{2}\left[S^+(i)\left(S^-(i+a_0\boldsymbol{e}^a)+S^-(i-a_0\boldsymbol{e}^a)\right)\right.\right. \\
& \qquad\qquad \left. +S^-(i)\left(S^+(i+a_0\boldsymbol{e}^a)+S^+(i-a_0\boldsymbol{e}^a)\right)\right] \\
& \qquad\qquad \left. +S^z(i)\left(S^z(i+a_0\boldsymbol{e}^a)+S^z(i-a_0\boldsymbol{e}^a)\right)\right\} \qquad (8.37)
\end{aligned}
$$

schreiben. Nun werden wieder per Holstein-Primakoff Transformation Boseoperatoren $a_{\boldsymbol{k}}$, $b_{\boldsymbol{k}}$ eingeführt (8.5a ; 8.5b), mit denen man dann in linearer Spinwellentheorie

$$
\begin{aligned}
H \;=& -(J_1+J_2)Ns^2 \\
& +\sum_{i\in A}\sum_{a=1}^{2} J_a s \left\{ a(i)\big(b(i+a_0\boldsymbol{e}^a)+b(i-a_0\boldsymbol{e}^a)\big)+2a^+(i)a(i) \right. \\
& \qquad +b^+(i+a_0\boldsymbol{e}^a)b(i+a_0\boldsymbol{e}^a)+b^+(i-a_0\boldsymbol{e}^a)b(i-a_0\boldsymbol{e}^a) \\
& \qquad \left. +a^+(i)\big(b^+(i+a_0\boldsymbol{e}^a)+b^+(i-a_0\boldsymbol{e}^a)\big)\right\} \qquad (8.38)
\end{aligned}
$$

erhält. Durch Fouriertransformation wie in (8.8a ; 8.8b) erhält man den einfacher zu behandelnden Hamiltonian im Impulsraum:

$$
H = -(J_1+J_2)Ns^2 + 2s\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{a=1}^{2} J_a\left[\gamma_{\boldsymbol{k}}^a(a_{\boldsymbol{k}}b_{\boldsymbol{k}}+a_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}}^+)+a_{\boldsymbol{k}}^+a_{\boldsymbol{k}}+b_{\boldsymbol{k}}^+b_{\boldsymbol{k}}\right] \qquad (8.39)
$$

Dabei ist $\gamma_{\boldsymbol{k}}^a$ als

$$
\gamma_{\boldsymbol{k}}^a = \cos(a_0\boldsymbol{k}\boldsymbol{e}^a) \qquad (8.40)
$$

gegeben. Durch die Bogoliubov-Transformation (8.13) läßt sich dieser bilineare Hamiltonoperator wieder diagonalisieren, und man erhält:

$$
\boxed{
\begin{aligned}
H =& -N(J_x+J_y)s(s+1) \qquad (8.41) \\
& +2sJ_x(1+R)\sum_{\boldsymbol{k}}\sqrt{1-\left(\frac{1}{1+R}\right)^2(\cos(k_x)+R\cos(k_y))^2}\,\left(c_{\boldsymbol{k}}^+c_{\boldsymbol{k}}+d_{\boldsymbol{k}}^+d_{\boldsymbol{k}}+1\right)
\end{aligned}
}
$$

Dabei ist $R = \frac{J_y}{J_x}$ und gibt damit das Verhältnis der Kopplungsstärke in y-Richtung zur Kopplungsstärke in x-Richtung an. Es soll vorausgesetzt werden, daß $J_y \leq J_x$ und damit $R \leq 1$.

Wir haben das Modell hier mit dem Verhältnis der Kopplungsstärken als Parameter beschrieben, da dies die Schreibweise ist, wie man sie auch in der Literatur [26] findet. Um dieses Modell mit den anderen besser vergleichen zu können, setzen wir $J_y = (1-\delta)J$, $J_x = (1+\delta)J$, wobei J konstant gewählt wird und der Parameter δ jetzt wieder die Dimerisierung kontrolliert. Mit diesen Größen wird (8.41) zu

$$\boxed{\begin{aligned} H &= -2NJs(s+1) \qquad (8.42)\\ &+ 4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\sqrt{1-\frac{1}{4}\{(1+\delta)\cos(k_x)+(1-\delta)\cos(k_y)\}^2}(c^+_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}}+d^+_{\boldsymbol{k}}d_{\boldsymbol{k}}+1)\,. \end{aligned}}$$

Korrelationsfunktionen und Grundzustandsenergie Wir wollen jetzt zum einen wieder die Untergittermagnetisierung berechnen, die uns wie beim Treppenmodell einen kritischen Wert geben wird, an dem der néelartige Zustand zerstört wird und das Modell in eine ungeordnete Phase übergeht. Zum anderen werden wir wieder aus der Abhängigkeit der Grundzustandsenergie von der Dimerisierung eine Bedingung für den Spin-Peierls Übergang herleiten.

Untergittermagnetisierung für $T = 0$: Beginnen wollen wir mit der Untergittermagnetisierung, die wir, wie in der Literatur üblich, in Abhängigkeit vom Kopplungsverhältnis R berechnen werden. Dabei entspricht die Vorgehensweise der beim Treppenmodell. D.h., wir drücken den Operator S^z gemäß der Holstein-Primakoff Transformation durch Bosonen aus, ersetzen diese durch die neuen Bosonen aus der Bogoliubov-Transformation und gehen dann von der Summe zum Integral über [6]. Dann gilt:

$$< S^z_x >= 1 - \frac{1}{2(2\pi)^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}dk_1dk_2\frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{1}{1+R}\right)^2(\cos(k_1)+\cos(k_2))^2}} \qquad (8.43)$$

Auch dieses Integral läßt sich wieder numerisch berechnen. Nimmt man dann den Wert R_c, an dem die erste Korrektur genauso groß wie die klassische Untergittermagnetisierung ist, als den Punkt, wo die Néelordnung zusammenbricht, so ergibt sich aus einem Fit ein kritisches Verhältnis der Kopplungsstärken von

$$\boxed{R_c = 0.03366}\,. \qquad (8.44)$$

Dies stimmt mit dem Wert, wie er auch in einem Artikel von Affleck, Gelfand und Singh [26] errechnet wurde, überein.

Auch hier gilt natürlich wie beim Treppenmodell, daß mit zunehmender Inhomogenität der Beitrag der unphysikalischen Zustände in der Spinwellennäherung immer größer wird. Nimmt man wieder die Bedingung (8.27b) als Maß für den Gültigkeitsbereich der LSWT, so ergibt sich ein Wert von $R \approx 0.1$, bis zu dem man dieser Näherung vertrauen kann [29].

Wir können aus der LSWT also nur schließen, daß R_c wohl kleiner als 0.1 sein muß. Das Modell bleibt also auf jeden Fall bis zu recht kleinem R in einer

[6] vgl. die Gleichungen (8.20a - 8.20c)

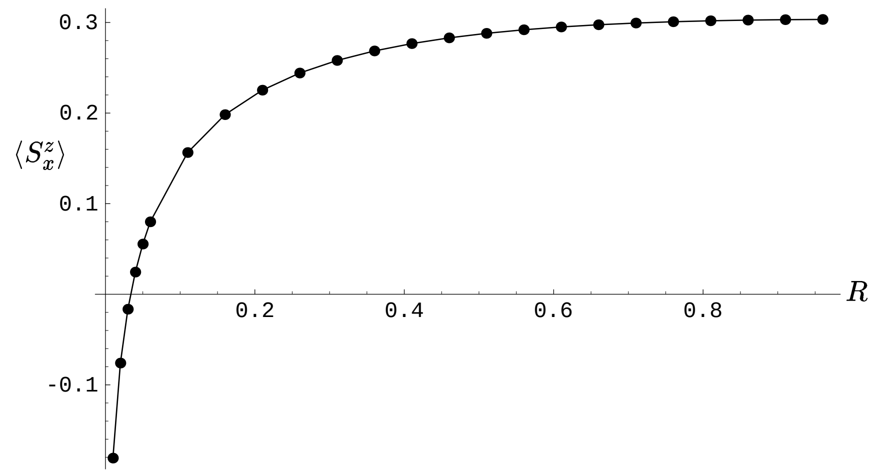

Abbildung 8.4: Untergittermagnetisierung in Abhängigkeit von R

geordneten Phase. Um den genauen Wert der kritischen Kopplung festzustellen, ist die LSWT leider nicht geeignet. Verschiedene Reihenentwicklungen deuten darauf hin, daß sogar $R_c = 0$ gilt [26]! Dies würde bedeuten, daß sich schon bei infinitesimaler Zwischenkettenkopplung ein néelartiger Zustand ergibt.

Grundzustandsenergie Zur Errechnung der Grundzustandsenergie und der Bedingung für den strukturellen Phasenübergang benutzen wir die Schreibweise (8.42) mit dem Dimerisierungsparameter δ. Die Grundzustandsenergie des magnetischen Systems läßt sich daraus einfach als

$$E_0 = -2NJs(s+1) + 4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\sqrt{1-\frac{1}{4}\left\{(1+\delta)\cos(k_x)+(1-\delta)\cos(k_y)\right\}^2} \tag{8.45}$$

ablesen. Ersetzt man die Summe durch ein Integral, so läßt sich dies mit der Funktion $\beta(\delta)$ wieder in der Form

$$\begin{aligned} E_0 &= -2NJs(s+\beta(\delta)) \quad \text{mit} && (8.46)\\ \beta(\delta) &= 1-\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2\sqrt{1-\frac{1}{4}\left\{(1+\delta)\cos(k_x)+(1-\delta)\cos(k_y)\right\}^2} \end{aligned}$$

schreiben. Die elastische Energie ist wieder durch (8.32) gegeben, wobei die Konstante K die gleiche wie beim Treppenmodell ist [7]! Entwickelt man die gesamte Energie des Systems jetzt um $\delta = 0$, so muß der Term linear in δ wegen

[7] Da auch bei dieser Verzerrung der Diagonalabstand zwischen den Gitterplätzen unverändert bleibt, liefern die elastischen Kopplungen auf den Diagonalen wieder keinen Beitrag.

der Symmetrie des Modells unter der Transformation $\delta \to -\delta$ verschwinden. Die zweite Ableitung nach δ ist dann durch

$$\left.\frac{\partial^2 E}{\partial \delta^2}\right|_{\delta^2=0} = \frac{NK}{2} - \frac{NJs}{(2\pi)^2} \iint_{-\pi}^{\pi} \frac{[\cos(k_x) - \cos(k_y)]^2 \, dk_x \, dk_y}{\left[-4 + (\cos(k_x) + \cos(k_y))^2\right] \sqrt{1 - \frac{1}{4}\left(\cos(k_x) + \cos(k_y)\right)^2}} \tag{8.47}$$

gegeben. Setzt man (8.47) gleich Null und berechnet das Integral numerisch, so ergibt sich als Bedingung für den strukturellen Phasenübergang

$$\boxed{\frac{K}{Js} = 0.2909}\,. \tag{8.48}$$

8.3 Das Plakettenmodell

Auch bei diesem Modell gehen wir von einem néelartigen Grundzustand aus und drücken dann die Spinoperatoren mittels Holstein-Primakoff Transformation wieder als Bosonen aus. Betrachten wir nun die Plätze, die mit einem Spin up besetzt sind, so fällt auf, daß es zwei Arten gibt, die sich durch die Ankopplung an die Nachbarplätze unterscheiden. Das Gleiche gilt auch für das Untergitter, das mit Spin downs besetzt ist. Hieraus ergibt sich die Notwendigkeit, auf jedem der beiden Untergitter zwei Arten von Bosonen einzuführen, so daß insgesamt vier verschiedene Bosonen zur Beschreibung des Systems notwendig sind! Außerdem wollen wir zusätzlich ein fiktives, "antiferromagnetisches" Feld $B_A^z > 0$ einführen, das in die z-Richtung zeigt. Dieses Feld soll die Tendenz haben, die Spins auf dem einen Untergitter in die +z-Richtung und auf dem anderen in die -z-Richtung auszurichten. Es dient hier nur als Hilfsfeld und ermöglicht es, im Grundzustand die Untergittermagnetisierung pro Gitterplatz einfach als $\frac{1}{N}\left\langle \frac{\partial H}{\partial B_A^z}\right\rangle\big|_{B_A^z=0}$ zu errechnen. Somit kann später die Untergittermagnetisierung direkt aus dem diagonalisierten Hamiltonian bestimmt werden, ohne die entsprechenden Transformationsmatrizen zu kennen [8].

Wir wollen nun den Hamiltonian des Systems (4.4) mit dem hinzugefügten fiktiven Magnetfeld entsprechend der Untergitterstruktur aufteilen:

$$\begin{aligned} H = \sum_{i,j=1}^{\sqrt{N}/2} \Big\{ & J(1+\delta)\boldsymbol{S}_{2i,2j}\left[\boldsymbol{S}_{2i,2j+1} + \boldsymbol{S}_{2i+1,2j}\right] \\ & + J(1-\delta)\boldsymbol{S}_{2i,2j}\left[\boldsymbol{S}_{2i,2j-1} + \boldsymbol{S}_{2i-1,2j}\right] \\ & + J(1+\delta)\boldsymbol{S}_{2i+1,2j+1}\left[\boldsymbol{S}_{2i+1,2j} + \boldsymbol{S}_{2i,2j+1}\right] \\ & + J(1-\delta)\boldsymbol{S}_{2i+1,2j+1}\left[\boldsymbol{S}_{2i+1,2j+2} + \boldsymbol{S}_{2i+2,2j+1}\right] \\ & - B_A^z\left[S_{2i,2j}^z + S_{2i+1,2j+1}^z\right] + B_A^z\left[S_{2i,2j+1}^z + S_{2i+1,2j}^z\right] \Big\} \end{aligned} \tag{8.49}$$

[8] Dies ist hier sehr nützlich, da für dieses Modell und für das Mäandermodell die Transformationsmatrizen nur äußerst schwer zu bestimmen sind.

Die Bosonen in linearer Spinwellentheorie werden nun wie folgt eingeführt:

A-Gitter: $r \in (2i, 2j) \quad ; \quad S^z = s - a_r^+ a_r \quad ; \quad S^- = \sqrt{2s}\, a_r^+$

B-Gitter: $r \in (2i+1, 2j+1) \quad ; \quad S^z = s - b_r^+ b_r \quad ; \quad S^- = \sqrt{2s}\, b_r^+$

C-Gitter: $r \in (2i, 2j+1) \quad ; \quad S^z = -s + c_r^+ c_r \quad ; \quad S^- = \sqrt{2s}\, c_r$

D-Gitter: $r \in (2i+1, 2j) \quad ; \quad S^z = -s + d_r^+ d_r \quad ; \quad S^- = \sqrt{2s}\, d_r$

Nachdem man (8.49) durch obige Bosonenoperatoren ausgedrückt hat, ist es wieder geschickt, durch Fouriertransformation in den Impulsraum überzugehen. Dies wird durch

$$
\begin{aligned}
a_{\boldsymbol{r}} &= \sqrt{\frac{4}{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} a_{\boldsymbol{k}} \quad ; \quad b_{\boldsymbol{r}} = \sqrt{\frac{4}{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} b_{\boldsymbol{k}} \\
c_{\boldsymbol{r}} &= \sqrt{\frac{4}{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} c_{\boldsymbol{k}} \quad ; \quad d_{\boldsymbol{r}} = \sqrt{\frac{4}{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} d_{\boldsymbol{k}}
\end{aligned}
\tag{8.50}
$$

erreicht. Definiert man wieder die Größen

$$
\begin{aligned}
\gamma_{\boldsymbol{k}}^a &= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}a_0\boldsymbol{e}^a} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}a_0\boldsymbol{e}^a}}{4} \quad ; \quad \beta_{\boldsymbol{k}}^a = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}a_0\boldsymbol{e}^a} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}a_0\boldsymbol{e}^a}}{4} \\
A_{\boldsymbol{k}}^a &= \gamma_{\boldsymbol{k}}^a + \delta\beta_{\boldsymbol{k}}^a \quad ; \quad (A_{\boldsymbol{k}}^a)^* = \gamma_{\boldsymbol{k}}^a - \delta\beta_{\boldsymbol{k}}^a \ ,
\end{aligned}
\tag{8.51}
$$

so ergibt sich der Hamiltonian im Impulsraum zu

$$
\begin{aligned}
H \;=\; & -2NJs^2 - NB_A^z s + 4Js \sum_{\boldsymbol{k}} \Big\{ a_{\boldsymbol{k}}^+ a_{\boldsymbol{k}} + b_{\boldsymbol{k}}^+ b_{\boldsymbol{k}} + c_{\boldsymbol{k}}^+ c_{\boldsymbol{k}} + d_{\boldsymbol{k}}^+ d_{\boldsymbol{k}} \\
& + A_{\boldsymbol{k}}^x \left[a_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}} + b_{\boldsymbol{k}}^+ d_{\boldsymbol{k}}^+ \right] + (A_{\boldsymbol{k}}^x)^* \left[a_{\boldsymbol{k}}^+ c_{\boldsymbol{k}}^+ + b_{\boldsymbol{k}} d_{\boldsymbol{k}} \right] + A_{\boldsymbol{k}}^y \left[a_{\boldsymbol{k}} d_{\boldsymbol{k}} + b_{\boldsymbol{k}}^+ c_{\boldsymbol{k}}^+ \right] \\
& + (A_{\boldsymbol{k}}^y)^* \left[a_{\boldsymbol{k}}^+ d_{\boldsymbol{k}}^+ + b_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}} \right] + \frac{B_A^z}{4Js} \left[a_{\boldsymbol{k}}^+ a_{\boldsymbol{k}} + b_{\boldsymbol{k}}^+ b_{\boldsymbol{k}} + c_{\boldsymbol{k}}^+ c_{\boldsymbol{k}} + d_{\boldsymbol{k}}^+ d_{\boldsymbol{k}} \right] \Big\}
\end{aligned}
\tag{8.52}
$$

Mit der Definition $\tilde{B}_A^z = \frac{B_A^z}{4Js}$ und unter Hinzufügung von Korrekturfaktoren entsprechend der bosonischen Vertauschungsrelationen läßt sich dies auf folgende Weise in Matrixform schreiben:

$$H = -2NJs^2 - NB_A^z s - 2NJs - \frac{N}{2}B_A^z \tag{8.53}$$

$$+4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\begin{pmatrix} a_{\boldsymbol{k}} \\ b_{\boldsymbol{k}} \\ c_{\boldsymbol{k}}^+ \\ d_{\boldsymbol{k}}^+ \end{pmatrix}^T \underbrace{\begin{pmatrix} 1+\tilde{B}_A^z & 0 & A_{\boldsymbol{k}}^x & A_{\boldsymbol{k}}^y \\ 0 & 1+\tilde{B}_A^z & (A_{\boldsymbol{k}}^y)^* & (A_{\boldsymbol{k}}^x)^* \\ (A_{\boldsymbol{k}}^x)^* & A_{\boldsymbol{k}}^y & 1+\tilde{B}_A^z & 0 \\ (A_{\boldsymbol{k}}^y)^* & A_{\boldsymbol{k}}^x & 0 & 1+\tilde{B}_A^z \end{pmatrix}}_{\mathcal{H}} \begin{pmatrix} a_{\boldsymbol{k}}^+ \\ b_{\boldsymbol{k}}^+ \\ c_{\boldsymbol{k}} \\ d_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix}\right\}$$

Eine Diagonalisierung des Hamiltonians ist jetzt unter der Nebenbedingung durchzuführen, daß auch die neuen Operatoren wieder bosonischen Vertauschungsregeln genügen. Bezeichnet man mit $\mathcal{H}_D$ die Matrix, die das diagonalisierte Problem beschreibt, so sind folgende Gleichungen zu erfüllen:

$$\text{(I)} \quad T^{-1}\mathcal{H}JT = \mathcal{H}_D J \tag{8.54a}$$

$$\text{(II)} \quad T^+JTJ = 1 \tag{8.54b}$$

Dabei ist die Matrix J durch

$$J = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8.54c}$$

gegeben [9]. Gleichung (II) bedeutet, daß die Transformationsmatrix ein Element der pseudounitären Gruppe $U(2,2)$ ist. Da $U(2,2)$ eine 16-parametrige Gruppe ist, ist es sehr kompliziert, die konkreten Transformationsmatrizen zu bestimmen. Da wir aber an den Zuständen des Problems - zu deren Konstruktion eine Kenntnis der Transformationsmatrix notwendig wäre - nicht interessiert sind, genügt es, die durch die Gleichung (I) bestimmten Diagonalelemente der Matrix $\mathcal{H}_D$ zu errechnen. Dazu ist die Eigenwertgleichung

$$det(\mathcal{H}J - \lambda_i 1) = 0 \tag{8.55}$$

zu lösen. Die gesuchten Energieeigenwerte sind dann durch $|\lambda_i|$ gegeben. In den neuen Boseoperatoren $\mathcal{A}$,$\mathcal{B}$,$\mathcal{C}$,$\mathcal{D}$ nimmt der Hamiltonoperator die Diagonalgestalt

$$H = -2NJs(s+1) - NB_A^z(s+\frac{1}{2}) \tag{8.56a}$$

$$+4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\begin{pmatrix} \mathcal{A}_{\boldsymbol{k}} \\ \mathcal{B}_{\boldsymbol{k}} \\ \mathcal{C}_{\boldsymbol{k}}^+ \\ \mathcal{D}_{\boldsymbol{k}}^+ \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{\boldsymbol{k}}^+ \\ \mathcal{B}_{\boldsymbol{k}}^+ \\ \mathcal{C}_{\boldsymbol{k}} \\ \mathcal{D}_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix}\right\}$$

[9] Die allgemeine Diagonalisierung eines bilinearen, bosonischen Hamiltonians ist in Anhang A erläutert.

an, wobei die Eigenwerte durch

$$\lambda_1 = \sqrt{(1+\tilde{B}_A^z)^2 - (|A_{\boldsymbol{k}}^x| + |A_{\boldsymbol{k}}^y|)^2} \tag{8.56b}$$

$$\lambda_2 = \sqrt{(1+\tilde{B}_A^z)^2 - (|A_{\boldsymbol{k}}^x| - |A_{\boldsymbol{k}}^y|)^2} \tag{8.56c}$$

gegeben sind. Schreibt man (8.56a) aus und nutzt die Kommutatorrelationen, so ergibt sich als Ergebnis der diagonalisierte Hamiltonian des Plakettenmodells in LSWT:

$$\boxed{\begin{aligned} H &= -2NJs(s+1) - NB_A^z(s+\frac{1}{2}) \\ &\quad +4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\sqrt{\left(1+\tilde{B}_A^z\right)^2 - \left(|A_{\boldsymbol{k}}^x| + |A_{\boldsymbol{k}}^y|\right)^2}\,\left[\mathcal{A}_{\boldsymbol{k}}^+\mathcal{A}_{\boldsymbol{k}} + \mathcal{C}_{\boldsymbol{k}}^+\mathcal{C}_{\boldsymbol{k}} + 1\right]\right. \\ &\quad \left. +\sqrt{\left(1+\tilde{B}_A^z\right)^2 - \left(|A_{\boldsymbol{k}}^x| - |A_{\boldsymbol{k}}^y|\right)^2}\,\left[\mathcal{B}_{\boldsymbol{k}}^+\mathcal{B}_{\boldsymbol{k}} + \mathcal{D}_{\boldsymbol{k}}^+\mathcal{D}_{\boldsymbol{k}} + 1\right]\right\} \qquad (8.57) \end{aligned}}$$

8.3.1 Korrelationsfunktionen und Grundzustandsenergie

Da wir ein magnetisches Hilfsfeld in den Hamiltonian eingebaut und auch alle entstehenden konstanten Terme berücksichtigt haben, ist es möglich, die uns interessierenden Größen Untergittermagnetisierung und Grundzustandsenergie jeweils in Abhängigkeit von der Dimerisierung direkt aus dem Hamiltonian (8.57) zu errechnen, ohne die Transformationsmatrizen zwischen den alten und neuen Bosonen zu kennen.

Untergittermagnetisierung Die Untergittermagnetisierung im Grundzustand pro Gitterplatz läßt sich einfach als $\frac{1}{N}\left\langle\frac{\partial H}{\partial B_A^z}\right\rangle\big|_{B_A^z=0}$ berechnen, wobei $\langle\cdots\rangle$ den Erwartungswert im Grundzustand bezeichne. Bezüglich der neuen Bosonen ist dieser aber gerade durch $\big|0\,0\,0\,0\big\rangle$ gegeben. Für $s=1/2$ ergibt sich damit eine Untergittermagnetisierung pro Platz von

$$< S^z >= 1 - \frac{1}{2\pi^2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\left\{\frac{1}{\sqrt{1-\left(|A_{\boldsymbol{k}}^x| + |A_{\boldsymbol{k}}^y|\right)^2}} + \frac{1}{\sqrt{1-\left(|A_{\boldsymbol{k}}^x| - |A_{\boldsymbol{k}}^y|\right)^2}}\right\}, \tag{8.58}$$

wobei $|A_{\boldsymbol{k}}^x| = \sqrt{\cos^2\boldsymbol{k}_x + \delta^2\sin^2\boldsymbol{k}_x}$ und $|A_{\boldsymbol{k}}^y| = \sqrt{\cos^2\boldsymbol{k}_y + \delta^2\sin^2\boldsymbol{k}_y}$ gilt.

Das Integral läßt sich wie üblich numerisch auswerten. Man sieht dann, daß die Untergittermagnetisierung wie schon bei den zuvor betrachteten Modellen mit zunehmender Dimerisierung abnimmt. Der kritische Wert δ_c, an dem die Untergittermagnetisierung verschwindet, ist hier durch

$$\boxed{\delta_c = 0.7982} \tag{8.59}$$

gegeben. Auf das Verhältnis der beiden Kopplungen bezogen, bedeutet das:

$$\boxed{R_c = \frac{1-\delta}{1+\delta} = 0.1122} \tag{8.60}$$

Dargestellt ist der Verlauf der Untergittermagnetisierung in Abbildung (8.5).

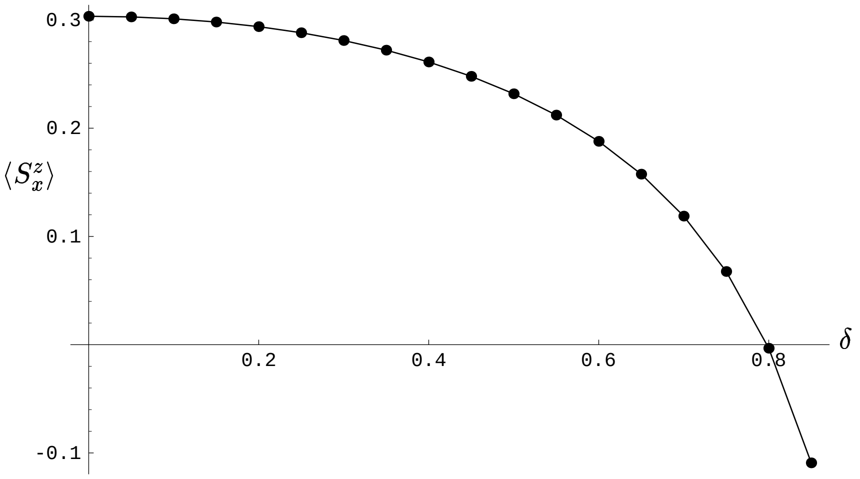

Abbildung 8.5: Untergittermagnetisierung in Abhängigkeit von δ

Der hier errechnete Wert für δ_c stimmt mit dem von Koga, Kumada und Kawakami [31] angegebenen überein. Die gleichen Autoren haben die Plakettenstruktur auch mittels einer Reihenentwicklung untersucht [32], die von isolierten Plaketten aus startet. Die hieraus bestimmte kritische Dimerisierung ist wesentlich kleiner und beträgt nur $\delta_c \approx 0.3$! Da dies auch mit Ergebnissen aus Monte-Carlo Simulationen in guter Übereinstimmung ist, scheint dieser Wert glaubwürdiger als das Ergebnis in Spinwellentheorie. Auch hier bleibt nur zu konstatieren, daß anscheinend LSWT für solche dimerisierten Modelle keine guten Ergebnisse mehr liefert, da der Einfluß der unphysikalischen Zustände zu groß ist.

Grundzustandsenergie Setzen wir das Hilfsmagnetfeld B_A^z gleich Null und berücksichtigen die mit der Verzerrung verbundene elastische Energie [10], so ist

[10] Durch die plakettenartige Verzerrung werden auch die Diagonalen des Gitters gestreckt bzw. gestaucht, so daß eigentlich ein zusätzlicher Beitrag zur elastischen Energie auftritt. Dieser wird hier in erster Näherung vernachlässigt.

die Grundzustandsenergie durch

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{NK}{2}\delta^2 - 2NJs(s+1) \\ &+4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\sqrt{1-\left(|A^x_{\boldsymbol{k}}|+|A^y_{\boldsymbol{k}}|\right)^2}+\sqrt{1-\left(|A^x_{\boldsymbol{k}}|-|A^y_{\boldsymbol{k}}|\right)^2}\right\} \quad (8.61) \end{aligned}$$

gegeben. Führt man wieder die β-Funktion ein, so erhält man

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{NK}{2}\delta^2 - 2NJs(s+\beta(\delta)) \quad \text{, wobei} \qquad (8.62) \\ \beta(\delta) &= 1-\frac{1}{\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}dk_1dk_2\left\{\sqrt{1-\left(|A^x_{\boldsymbol{k}}|+|A^y_{\boldsymbol{k}}|\right)^2}+\sqrt{1-\left(|A^x_{\boldsymbol{k}}|-|A^y_{\boldsymbol{k}}|\right)^2}\right\} \end{aligned}$$

gilt. Die Taylorentwicklung um $\delta^2 = 0$ verläuft analog wie zuvor. Setzt man den Term erster Ordnung wieder gleich Null, so folgt

$$\boxed{\frac{K}{Js} = 0.3472} \qquad (8.63)$$

als Bedingung für den strukturellen Phasenübergang.

8.4 Das Mäandermodell

Auch bei diesem Modell ist es wie beim Plakettenmodell notwendig, vier Arten von Bosonen einzuführen. Entsprechend der Untergitterstruktur zerlegen wir wieder den Hamiltonian (4.2) des Systems:

$$\begin{aligned} H = \sum_{i,j=1}^{\sqrt{N}/2} &\Big\{J(1+\delta)\boldsymbol{S}_{2i,2j}\left[\boldsymbol{S}_{2i,2j+1}+\boldsymbol{S}_{2i+1,2j}\right] \\ &+J(1-\delta)\boldsymbol{S}_{2i,2j}\left[\boldsymbol{S}_{2i,2j-1}+\boldsymbol{S}_{2i-1,2j}\right] \\ &+J(1+\delta)\boldsymbol{S}_{2i+1,2j+1}\left[\boldsymbol{S}_{2i+1,2j+2}+\boldsymbol{S}_{2i,2j+1}\right] \\ &+J(1-\delta)\boldsymbol{S}_{2i+1,2j+1}\left[\boldsymbol{S}_{2i+1,2j}+\boldsymbol{S}_{2i+2,2j+1}\right] \\ &-B^z_A\left[S^z_{2i,2j}+S^z_{2i+1,2j+1}\right]+B^z_A\left[S^z_{2i,2j+1}+S^z_{2i+1,2j}\right]\Big\} \quad (8.64) \end{aligned}$$

Dies ist fast die gleiche Zerlegung wie zuvor beim Plakettenmodell. Nur ein Bindungspaar stark-schwach wurde "umgeklappt". Die Einführung der Bosonen und die anschließende Fouriertransformation erfolgen völlig analog zu den Schritten beim Plakettenmodell. Mit den gleichen Definitionen wie in (8.51) lautet der Hamiltonoperator in LSWT für das Mäandermodell

$$\begin{aligned} H &= -2NJs^2 - NB^z_As + 4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\Big\{a^+_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}+b^+_{\boldsymbol{k}}b_{\boldsymbol{k}}+c^+_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}}+d^+_{\boldsymbol{k}}d_{\boldsymbol{k}} \\ &+A^x_{\boldsymbol{k}}\left[a_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}}+b_{\boldsymbol{k}}d_{\boldsymbol{k}}\right]+(A^x_{\boldsymbol{k}})^*\left[a^+_{\boldsymbol{k}}c^+_{\boldsymbol{k}}+b^+_{\boldsymbol{k}}d^+_{\boldsymbol{k}}\right]+A^y_{\boldsymbol{k}}\left[a_{\boldsymbol{k}}d_{\boldsymbol{k}}+b_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}}\right] \\ &+(A^y_{\boldsymbol{k}})^*\left[a^+_{\boldsymbol{k}}d^+_{\boldsymbol{k}}+b^+_{\boldsymbol{k}}c^+_{\boldsymbol{k}}\right]+\frac{B^z_A}{4Js}\left[a^+_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}+b^+_{\boldsymbol{k}}b_{\boldsymbol{k}}+c^+_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}}+d^+_{\boldsymbol{k}}d_{\boldsymbol{k}}\right]\Big\}. \quad (8.65) \end{aligned}$$

Um die Energieeigenwerte zu bestimmen, schreiben wir dies wieder in Matrixform:

$$H = -2NJs^2 - NB_A^z s - 2NJs - \frac{N}{2}B_A^z \tag{8.66}$$

$$+4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\begin{pmatrix} a_{\boldsymbol{k}} \\ b_{\boldsymbol{k}} \\ c_{\boldsymbol{k}}^+ \\ d_{\boldsymbol{k}}^+ \end{pmatrix}^T \underbrace{\begin{pmatrix} 1+\tilde{B}_A^z & 0 & A_{\boldsymbol{k}}^x & A_{\boldsymbol{k}}^y \\ 0 & 1+\tilde{B}_A^z & A_{\boldsymbol{k}}^y & A_{\boldsymbol{k}}^x \\ (A_{\boldsymbol{k}}^x)^* & (A_{\boldsymbol{k}}^y)^* & 1+\tilde{B}_A^z & 0 \\ (A_{\boldsymbol{k}}^y)^* & (A_{\boldsymbol{k}}^x)^* & 0 & 1+\tilde{B}_A^z \end{pmatrix}}_{\mathcal{H}} \begin{pmatrix} a_{\boldsymbol{k}}^+ \\ b_{\boldsymbol{k}}^+ \\ c_{\boldsymbol{k}} \\ d_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix}\right\}$$

Wenn man die Eigenwertgleichung (8.55) löst, erhält man einen Hamiltonoperator in Diagonalgestalt, der genauso wie (8.56a) aussieht, wobei aber jetzt die Eigenwerte durch

$$\lambda_1 = \sqrt{\left(1+\tilde{B}_A^z\right)^2 - |A_{\boldsymbol{k}}^x + A_{\boldsymbol{k}}^y|^2} \tag{8.67}$$

$$\lambda_2 = \sqrt{\left(1+\tilde{B}_A^z\right)^2 - |A_{\boldsymbol{k}}^x - A_{\boldsymbol{k}}^y|^2} \tag{8.68}$$

gegeben sind. Benutzt man wiederum die Kommutatorrelationen für die neuen bosonischen Operatoren, so erhält man als endgültiges Resultat:

$$\boxed{\begin{aligned} H &= -2NJs(s+1) - NB_A^z\left(s+\frac{1}{2}\right) \\ &\quad +4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\sqrt{\left(1+\tilde{B}_A^z\right)^2 - |A_{\boldsymbol{k}}^x + A_{\boldsymbol{k}}^y|^2}\,\left[\mathcal{A}_{\boldsymbol{k}}^+\mathcal{A}_{\boldsymbol{k}} + \mathcal{C}_{\boldsymbol{k}}^+\mathcal{C}_{\boldsymbol{k}} + 1\right]\right. \\ &\quad \left. +\sqrt{\left(1+\tilde{B}_A^z\right)^2 - |A_{\boldsymbol{k}}^x - A_{\boldsymbol{k}}^y|^2}\,\left[\mathcal{B}_{\boldsymbol{k}}^+\mathcal{B}_{\boldsymbol{k}} + \mathcal{D}_{\boldsymbol{k}}^+\mathcal{D}_{\boldsymbol{k}} + 1\right]\right\} \qquad (8.69)\end{aligned}}$$

Korrelationsfunktionen und Grundzustandsenergie Auch hier verläuft alles völlig analog zum vorhergehenden Modell. Deshalb sollen nur kurz die Ergebnisse angegeben werden.

Untergittermagnetisierung

$$< S^z >= 1 - \frac{1}{2\pi^2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\left\{\frac{1}{\sqrt{1-|A_{\boldsymbol{k}}^x + A_{\boldsymbol{k}}^y|^2}} + \frac{1}{\sqrt{1-|A_{\boldsymbol{k}}^x - A_{\boldsymbol{k}}^y|^2}}\right\} \tag{8.70}$$

Dabei sind $|A_{\boldsymbol{k}}^x| = \sqrt{\cos^2 \boldsymbol{k}_x + \delta^2 \sin^2 \boldsymbol{k}_x}$ und $|A_{\boldsymbol{k}}^y| = \sqrt{\cos^2 \boldsymbol{k}_y + \delta^2 \sin^2 \boldsymbol{k}_y}$ genau wie zuvor definiert. Auch dieses Integral läßt sich numerisch berechnen.

Der sich ergebende Verlauf der Untergittermagnetisierung in Abhängigkeit von δ ist in Abb. (8.6) dargestellt. Als kritischer Wert für das Verschwinden der Magnetisierung ergibt sich hieraus

$$\boxed{\delta_c = 0.8711}\,. \tag{8.71}$$

Das kritische Kopplungsverhältnis ist damit durch

$$\boxed{R_c = \frac{1-\delta}{1+\delta} = 0.0689} \tag{8.72}$$

gegeben.

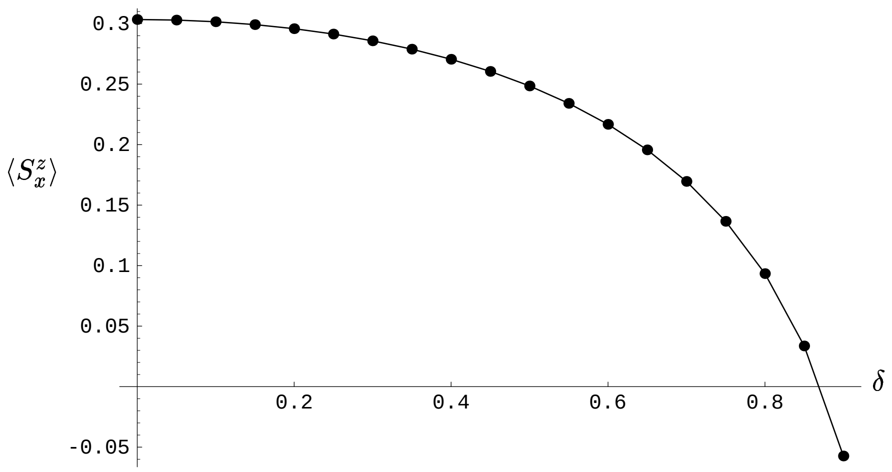

Abbildung 8.6: Untergittermagnetisierung in Abhängigkeit von δ

Grundzustandsenergie Für $B_A^z = 0$ lesen wir aus (8.69)

$$E_0 = \frac{NK}{2}\delta^2 - 2NJs(s+1) + 4Js\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\sqrt{1-|A_{\boldsymbol{k}}^x + A_{\boldsymbol{k}}^y|^2} + \sqrt{1-|A_{\boldsymbol{k}}^x - A_{\boldsymbol{k}}^y|^2}\right\} \tag{8.73}$$

ab [11], was sich wieder als

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{NK}{2}\delta^2 - 2NJs\,(s+\beta(\delta)) \quad \text{mit} & (8.74)\\ \beta(\delta) &= 1 - \frac{1}{\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \left\{\sqrt{1-\left|A_{\boldsymbol{k}}^x + A_{\boldsymbol{k}}^y\right|^2} + \sqrt{1-\left|A_{\boldsymbol{k}}^x - A_{\boldsymbol{k}}^y\right|^2}\right\} \end{aligned}$$

[11]Durch diese Form der Verzerrung werden auch die diagonalen Abstände verändert, was eigentlich zu einem zusätzlichen Beitrag zur elastischen Energie führt. Wie beim Plakettenmodell wird dieser aber in erster Näherung vernachlässigt.

schreiben läßt. Eine Entwicklung der Grundzustandsenergie um $\delta^2 = 0$ liefert dann wie üblich die Bedingung für den strukturellen Phasenübergang. Diese ist hier durch

$$\boxed{\frac{K}{Js} = 0.315} \tag{8.75}$$

gegeben.

Bei allen vier hier betrachteten Modellen skaliert also die magnetische Energie wie δ^2. Deshalb findet ein Spin-Peierls Übergang nur unter bestimmten Bedingungen statt. Dieses Resultat ist anscheinend unabhängig von der Struktur der Dimerisierung und stellt einen qualitativen Unterschied zwischen dem Spin-Peierls Übergang in zwei Dimensionen zu dem in einer dar! Da außerdem bei allen betrachteten Modellen die aufzuwendende elastische Energie gleich ist [12] - also insbesondere die Konstante K bei allen gleich ist - lassen sich die Bedingungen für einen Phasenübergang vergleichen. **Bevorzugt wird demnach eine Verzerrung zur Struktur des Treppenmodells hin!** An nächster Stelle folgt dann die Plaketten- gefolgt von der Mäanderstruktur. Das "Schlußlicht" bildet die J_x/J_y-Struktur. Dieses Resultat steht im Widerspruch zu einem Artikel von Tang und Hirsch [50]. Diese haben neben zwei anderen Modellen auch das Treppen- und das Plakettenmodell untersucht. Durch die exakte Diagonalisierung eines 4×4-Gitters kommen sie zu dem Ergebnis, daß die Plakettenstruktur bevorzugt wird! Allerdings ist dieses Ergebnis nicht besonders aussagekräftig für das unendlich große Gitter, da zum einen ein 4×4-Gitter sehr klein ist und zum anderen keine weiteren endlichen Gitter untersucht worden sind, was ein *finite-size scaling* ermöglicht hätte. Daher erscheinen die Ergebnisse, die hier mit LSWT erzielt worden sind, glaubwürdiger.

[12] Dies ist innerhalb der beschriebenen Näherung korrekt. Berücksichtigt man auch die elastischen Kopplungen längs der Diagonalen des Quadratgitters, so ist die für eine plaketten- oder mäanderartige Verzerrung aufzuwendende elastische Energie höher als für die anderen beiden Verzerrungstypen.

Kapitel 9

Zusammenfassung, Diskussion und Ausblick

Diese Arbeit hat sich mit zweidimensionalen Spin-1/2-Heisenbergmodellen beschäftigt, die eine alternierende Kopplungsstärke zwischen den Spins aufweisen. Insbesondere sind Modelle auf dem Quadratgitter betrachtet worden, bei denen entlang jeder Achse die Kopplungsstärke immer zwischen $J \cdot (1 + \delta)$ und $J \cdot (1 - \delta)$ wechselt. Wie sich zeigte, gibt es drei topologisch verschiedene Möglichkeiten die starken und schwachen Bonds anzuordnen. Diese sind in der Arbeit als Treppen-, Mäander- bzw. Plakettenmodell bezeichnet worden. Außerdem ist noch das sogenannte J_x/J_y-Modell untersucht worden, bei dem die starken Kopplungen entlang einer Raumachse und die schwachen entlang der anderen verlaufen. Während das letztgenannte und das Plakettenmodell schon unter verschiedenen Aspekten in der Literatur untersucht worden sind, gibt es anscheinend nur einen Artikel [50], in dem die Treppenstruktur vorkommt. Die Mäanderstruktur scheint sogar völlig neu zu sein.

Dem J_x/J_y-, Treppen- und Mäandermodell ist gemeinsam, daß sie für $\delta = 1$ in ungekoppelte Spinketten zerfallen. Es stellte sich deshalb die Frage, ob diese Modelle auch schon für große Dimerisierungen δ nahe Eins, d.h. für kleine Kopplungen zwischen den Ketten, ein eindimensionales Verhalten zeigen. Um diese Frage zu untersuchen, sind jeweils zwei Spinketten mit der entsprechenden schwachen Zwischenkettenkopplung aus dem Modell herausgegriffen und die Energie-Energie Korrelationsfunktion für die Zwischenkettenkopplung berechnet worden. Einfache Skalenargumente haben dann gezeigt, daß die Kopplung zwischen den Ketten einen relevanten Operator darstellt, der sowohl für das Treppen- als auch für das J_x/J_y- und das Mäandermodell die Skalendimension $x = 1$ hat. Dies bedeutet, daß der Grundzustand der drei Modelle nur für $\delta = 1$ eindimensionaler Natur ist; sobald es eine schwache Zwischenkettenkopplung gibt, ist der Grundzustand zweidimensional!

Außerdem war es möglich mit Hilfe der Skalenargumente, Aussagen über die Eigenschaften der der Struktur der Modelle entsprechenden Spinleiter zu treffen. Die dem J_x/J_y-Modell entsprechende Spinleiter besteht aus zwei gewöhnlichen

Heisenbergketten und einer sprossenartigen Zwischenkettenkopplung. Aus der Relevanz der Zwischenkettenkopplung konnte geschlossen werden, daß die Spinleiter ein System mit Anregungslücke ist. Dies stimmt mit dem Resultat von White, Noack und Scalapino [27] überein, die diese Spinleiter mittels DMRG betrachtet haben. Die gleichen Autoren haben auch untersucht, was passiert, wenn man weitere Spinketten in gleicher Weise hinzufügt. Dabei stellte sich interessanterweise heraus, daß ein System mit einer ungeraden Zahl von Ketten immer kritisch ist, während für eine ungerade Zahl ein Gap auftritt!

Auch die dem Treppenmodell entsprechende Spinleiter besteht aus gewöhnlichen Heisenbergketten. Die Zwischenkettenkopplung hat aber eine andere Struktur als die des J_x/J_y-Modells. Trotzdem ist die Skalendimension der Zwischenkettenkopplung wieder Eins, so daß diese Spinleiter ebenfalls ein Gap aufweist. Spinleiter mit dieser Art der Kopplung zwischen den Ketten scheinen bisher noch nicht untersucht worden zu sein, so daß dieses Resultat neu ist. Für die Zukunft wäre es deshalb interessant wie in [27], das Verhalten von drei, vier oder mehr gekoppelten Ketten zu untersuchen.

Die Spinleiter des Mäandermodells besteht aus Heisenbergketten, in denen zusätzlich zur gewöhnlichen NN-Kopplung auch noch eine schwache NNNN-Kopplung auftritt. Diese stellt eine relevante Störung dar, wobei anfangs unklar blieb, was Relevanz in diesem Fall bedeutet. Mit Hilfe numerischer Berechnungen (DMRG) konnte gezeigt werden, daß die Kette mit NNNN-Kopplung ein Gap hat. Dieses scheint ebenfalls neu zu sein. Zusätzlich wurde auch wieder die zugehörige Spinleiter betrachtet, bei der allerdings unklar blieb, ob ein Gap vorhanden ist oder nicht. Auch hier würde sich eine weitergehende Untersuchung anbieten [1].

Im Mittelpunkt der Arbeit stand jedoch die Frage, ob der Grundzustand der Modelle eine langreichweitige Ordnung aufweist oder ungeordnet ist. Falls $\delta = 0$ ist, so erhält man in allen Fällen den isotropen zweidimensionalen Spin-1/2-Heisenbergantiferromagneten, für den aufgrund von LSWT und einer Vielzahl numerischer Ergebnisse ein néelartiger Zustand - allerdings mit einer durch Quantenfluktuationen wesentlich reduzierten Untergittermagnetisierung - als gesichert gelten kann. Eine Dimerisierung $\delta \neq 0$ verstärkt die Fluktuationen und damit die Tendenz zur Unordnung. Wegen des Mermin-Wagner Theorems ist außerdem klar, daß spätestens für $\delta = 1$ die langreichweitige Ordnung beim J_x/J_y-, Treppen- und Mäandermodell zerstört wird [2].

Für das gewöhnliche isotrope Modell ist schon seit langem bekannt, daß das O(3) nlσ-Modell eine effektive Theorie für die Fluktuationen um den Néelzustand darstellt. In der Arbeit wurde gezeigt, daß auch die dimerisierten Modelle auf ein nlσ-Modell abgebildet werden können. Dabei mußte der aus der

[1] Allerdings wäre durch die NNNN-Kopplung der numerische Aufwand weit höher als bei den beiden vorherigen Modellen, so daß man wohl zur Zeit maximal ein System mit zwei solchen Ketten untersuchen könnte.

[2] Für das Plakettenmodell ist dies sowieso klar, da es für $\delta = 1$ in unzusammenhängende Plaketten zerfällt.

Literatur bekannte Ansatz für das Plaketten- und das Mäandermodell abgewandelt werden. Die durch die Abbildung entstandenen nlσ-Modelle hatten immer Standardform und unterschieden sich nur durch die Abhängigkeit der nackten Kopplung g von der Dimerisierung. Die zur Untersuchung möglicher Phasenübergänge angewendete Renormierungsgruppe blieb deshalb bei allen Modellen unverändert. Aus der RG konnte geschlossen werden, daß für alle Modelle eine kritische Dimerisierung δ_c existiert, so daß der Grundzustand für $\delta < \delta_c$ langreichweitige Ordnung besitzt, während er für $\delta > \delta_c$ ungeordnet ist. Da innerhalb einer RG keine Werte für die kritischen Kopplungen bestimmt werden können, war das Resultat dieser Untersuchung ein universelles, für alle Modelle gleiches Phasendiagramm.

Dieses sehr universelle Bild war eines der Gründe, auch lineare Spinwellentheorie auf die Modelle anzuwenden. Trotz einiger offensichtlicher Mängel liefert die LSWT für das isotrope zweidimensionale Heisenbergmodell auch quantitativ hervorragende Ergebnisse, so daß man hoffen konnte, die Phasengrenzen der dimerisierten Modelle genauer zu bestimmen. Auch hier war es für das Plakettenund das Mäandermodell nötig, die bekannte Holstein-Primakoff Transformation im antiferromagnetischen Fall zu verallgemeinern und statt der üblichen zwei, vier verschiedene Bosonen einzuführen. Die durch die Holstein-Primakoff Transformation entstandenen bilinearen Hamiltonians wurden für alle vier Modelle diagonalisiert, wobei sich dies im Falle des Plaketten- und des Mäandermodells als besonders schwierig herausstellte. Anschließend wurde jeweils die Untergittermagnetisierung in Abhängigkeit von der Dimerisierung bestimmt. Es zeigte sich, daß der néelartige Zustand sehr stabil ist und erst bei hohen Dimerisierungen zusammenbricht. Im einzelnen wurden folgende Werte für die kritische Dimerisierung δ_c gefunden:

Modell	δ_c
J_x/J_y-Modell	0.935
Mäandermodell	0.871
Treppenmodell	0.829
Plakettenmodell	0.798

Den stabilsten Néelzustand zeigt also das J_x/J_y-Modell, während das Plakettenmodell am schnellsten in einen ungeordneten Zustand übergeht. Für diese beiden Modelle sind auch Reihenentwicklungen durchgeführt worden, die für das J_x/J_y-Modell sogar $\delta_c = 1$ [26] und für das Plakettenmodell $\delta_c \approx 0.3$ [32] voraussagen. Es ist deshalb auch überprüft worden, inwieweit obige Ergebnisse glaubwürdig sind. Ein Grund an der LSWT zu zweifeln, ist, daß der Hilbertraum durch die Spinwellennäherung auch unphysikalische Zustände enthält. Wie ein einfaches Argument gezeigt hat, tragen diese leider für solch hohe Dimerisierungen wie oben wesentlich zum Grundzustand bei, so daß man den Werten nicht mehr uneingeschränkt vertrauen kann. Es konnte allerdings auch gezeigt werden, daß die kritische Dimerisierung für das Treppenmodell größer als 0.7 und für das J_x/J_y-Modell sogar größer als 0.82 sein muß.

Die dritte Frage, die in dieser Arbeit behandelt wurde, war, ob sich die Modelle selbsttätig in dieser Form verzerren können, und wenn ja, welches der Muster energetisch begünstigt ist. Dazu wurde bei allen Modellen mittels des diagonalisierten Hamiltonians in LSWT die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von der Dimerisierung berechnet. Es zeigte sich, daß die Dimerisierung immer zu einem Gewinn an magnetischer Energie und einem Verlust an elastischer Energie führt. Da bei allen Modellen sowohl die magnetische als auch die elastische Energie in führender Ordnung wie δ^2 skalieren, kommt es nur unter bestimmten Bedingungen zum Phasenübergang! Dies ist ein wesentlicher Unterschied zu einer Dimension, wo es immer einen Spin-Peierls Übergang gibt. Im Einzelnen wurden folgende Bedingungen für den strukturellen Phasenübergang gefunden:

Modell	K/Js
Treppenmodell	0.522
Plakettenmodell	0.347
Mäandermodell	0.315
J_x/J_y-Modell	0.291

LSWT sagt also voraus, daß eine strukturelle Verzerrung in Treppenform bevorzugt wird [3]. Da es hierbei um kleine Dimerisierungen geht und deshalb der Einfluß der unphysikalischen Zustände klein ist, sollten diese Resultate im Gegensatz zu den Ergebnissen für die kritischen Dimerisierungen auch quantitativ glaubwürdig sein. Allerdings stehen die Ergebnisse hier im Widerspruch zu Tang & Hirsch [50], die das Treppen- und das Plakettenmodell auf einem 4×4-Gitter exakt diagonalisiert und dabei herausgefunden haben, daß eine Verzerrung in Form von Plaketten bevorzugt wird. Da ein 4×4-Gitter sehr klein ist und auch kein finite-size scaling vorgenommen wurde, ist dieses Ergebnis aber für das unendlich große Gitter wenig aussagekräftig. Hier sollten die Resultate dieser Arbeit eine wesentliche Verbesserung darstellen.

[3] Berücksichtigt man, daß die elastische Energie für die plaketten- und die mäanderartige Verzerrung, wegen der zusätzlichen Beiträge durch die Streckungen und Stauchungen längs der Diagonalen, eigentlich größer ist als hier in erster Näherung angenommen, so wird diese Präferenz sogar noch deutlicher!

Anhang A

Diagonalisierung eines bilinearen, bosonischen Hamiltonians

Untersucht man Systeme, die aus vielen Bosonen oder Fermionen mit einer bilinearen Wechselwirkung bestehen, so tritt immer wieder das Problem der Diagonalisierung des entsprechenden Hamiltonians auf. Unter Diagonalisierung versteht man dabei den Übergang zu neuen nichtwechselwirkenden Bosonen oder Fermionen. Wie schon Bogoliubov [51] Ende der 40er Jahre erkannte, ist eine solche Transformation für einen bilinearen Hamiltonoperator immer möglich. Besonders einfach ist dies im fermionischen Fall, da dann die Transformationsmatrix zwischen alten und neuen Fermionen unitär ist. Die Lösung des gewöhnlichen Eigenwertproblems für den Hamiltonian führt also zum Erfolg. Anders sieht dies bei einem bosonischen Problem aus. Die Kommutatorrelationen führen in diesem Fall dazu, daß die Transformationsmatrix *pseudounitär* sein muß. Da eine Standarddiagonalisierung immer eine unitäre Transformation darstellt, ist ein bilinearer bosonischer Hamiltonian erheblich schwieriger zu behandeln. Bei nur zwei verschiedenen Bosonen kann man die Diagonalisierung noch per Hand mittels der *Bogoliubov-Transformation* durchführen. Dieses Verfahren wurde in dem Kapitel über LSWT für das Treppen- und für das J_x/J_y-Modell angewendet. Da die pseudounitäre Gruppe $U(P, m-P)$ m^2 Parameter hat, ist dieser Weg allerdings bei einer höheren Anzahl verschiedener Bosonen zum Scheitern verurteilt. Eine nähere Betrachtung dieses Problems ist also lohnend und geschah 1977 durch C. Tsallis [52] und J.H.P. Colpa [53]. Hier soll davon eine kurze Zusammenfassung gegeben werden, wobei hauptsächlich die Arbeit von Tsallis als Orientierungspunkt dienen soll.

Beginnen wir also mit einem System von N bilinear wechselwirkenden Bosonen. Der allgemeinste Hamiltonian, der die Teilchenzahl nicht erhalten muß, hat dann wegen der Kommutatorrelationen die Form:

$$H = \sum_{i,j}^{N} \left\{ \alpha_{i,j} b_i^+ b_j + \alpha_{i,j}^* b_i b_j^+ + \beta_{i,j} b_i^+ b_j^+ + \beta_{i,j}^* b_i b_j \right\} \tag{A.1}$$

Dies läßt sich in der Form

$$H = \langle b \,|\mathcal{H}|\, b \rangle \tag{A.2}$$

schreiben, wenn man

$$|b\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ b_N \\ b_1^+ \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ b_N^+ \end{pmatrix} \qquad \langle b| = |b\rangle^+ = (b_1^+, \cdots, b_N^+, b_1, \cdots, b_N) \tag{A.3}$$

und

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \tag{A.4}$$

definiert. Die bosonischen Kommutatorrelationen sind dann in dieser Schreibweise durch

$$|b\rangle \langle b| - \left(\left|b^+\right\rangle \left\langle b^+\right|\right)^T = J = \begin{pmatrix} 1_N & 0_N \\ 0_N & -1_N \end{pmatrix} \tag{A.5}$$

gegeben. Dies ist der entscheidende Unterschied zu einem fermionischen Problem, wo man auf der rechten Seite einfach die Einheitsmatrix erhalten würde, wenn man auf der linken das Minus durch ein Plus ersetzt! Es läßt sich nun einfach zeigen, daß die Form von J pseudounitäre Transformationsmatrizen impliziert. Sei dazu die Transformation zwischen alten und neuen Operatoren durch

$$\langle B| = \langle b| \; T \qquad\qquad |B\rangle = T^+ \; |b\rangle \tag{A.6}$$

gegeben, wobei B die neuen Boseoperatoren und T eine $2N \times 2N$ Matrix bezeichne. Da die neuen Operatoren wieder Bosonen sein sollen, muß auch für sie Gleichung (A.5) gelten. Setzt man (A.6) darin ein, so ergibt sich als Bedingung für die Transformationsmatrizen:

$$\boxed{T^+ J T J = 1_N} \tag{A.7}$$

Dies besagt aber nichts anderes, als daß die Matrizen Elemente der pseudounitären Gruppe $U(N,N)$ sind!

Damit sind die Vorbereitungen soweit abgeschlossen, daß wir uns nun mit der eigentlichen Diagonalisierung beschäftigen können. Den Ausgangspunkt bilden dabei die Bewegungsgleichungen

$$[H, b_i] = \sum_j \left\{ \alpha_{i,j} b_j + 2\beta_{i,j} b_j^+ \right\} \; . \tag{A.8}$$

Falls der Hamiltonoperator in den neuen Bosonen diagonal sein soll mit $H = \langle B| \mathcal{H}_D |B\rangle$, so müssen diese nämlich in

$$[H, |B>] = -J\mathcal{H}_D \; |B\rangle \tag{A.9}$$

übergehen. Hieraus liest man sofort die Diagonalisierungsvorschrift

$$\boxed{T^{-1}(\mathcal{H}J)T = \mathcal{H}_D J} \tag{A.10}$$

ab. D.h., um die Diagonalelemente der Matrix $\mathcal{H}_D$ zu erhalten, genügt es, die Eigenwertgleichung

$$\boxed{\det(\mathcal{H}J - t \cdot 1_N) = 0} \tag{A.11}$$

zu lösen. Wie sich zeigen läßt, ergibt diese Gleichung ein Polynom N-ten Grades in t^2. Die gesuchten Diagonalelemente der Matrix $\mathcal{H}_D$ sind dann durch $|t_i|$ gegeben. Die Lösung dieser Eigenwertgleichung ist auch für komplizierte Systeme problemlos möglich, so daß man den diagonalisierten Hamiltonian leicht angegeben kann. Ist man nicht explizit an den zugehörigen Eigenzuständen interessiert, so ist dies auch ausreichend, da über die Zustandssumme alle physikalischen Größen zugänglich sind. Ein großes Problem stellt hingegen in vielen Fällen die praktische Bestimmung der Transformationsmatrix dar. Diese ist zwar prinzipiell durch die Matrix T gegeben, die die Gleichung (A.10) und die Nebenbedingung (A.7) erfüllt, in der Praxis ist es aber häufig nicht oder nur mit großen Mühen möglich dieses Gleichungssystem zu lösen. Häufig versucht man daher, in mehreren Schritten zu einer Lösung zu gelangen. Einige dieser Methoden sind in [52] dargestellt.

Beschäftigt man sich mit LSWT, so kann man sich diese Mühe sparen, da die Eigenzustände meist uninteressant sind. Diese haben nämlich vor allem für $T \neq 0$ nichts mit den wahren Eigenzuständen des Systems zu tun, da man bei der Entwicklung der Wurzel in der Holstein-Primakoff Transformation die Zwangsbedingung verletzt hat und deshalb die Anzahl der Bosonen pro Gitterplatz nicht mehr beschränkt ist.

Literaturverzeichnis

[1] M.C. Cross und D.S. Fisher, Phys. Rev. B 19, 402 (1978)

[2] J.A. Bednorz und K.A. Muller, Z. Phys. B 64, 189 (1986)

[3] H. Bethe, Z. Phys. 71, 205 (1931)

[4] P. Jordan und E.P. Wigner, Z. Phys. 47, 631 (1928)

[5] F.D.M. Haldane, Phys. Lett. A 93, 464 (1983)

[6] P.W. Anderson, Science 235, 1196 (1987)

[7] F. Dyson, E.H. Lieb und B. Simon, J. Stat. Phys. 18, 335 (1978)

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

[9] B.B. Beard, R.J. Birgeneau, M. Greven und U.-J. Wiese, cond-mat/9709110v2 (1997)

[10] T. Barnes, Int. Journ. of Mod. Phys. C 2, 659 (1991)

[11] N. Ashcroft und I. Mermin: *Solid State Physics*, International Edition, Saunders College Publishing (1976)

[12] Charles Kittel: *Einführung in die Festkörperphysik*, 11. Auflage, Oldenbourg Verlag (1996)

[13] Eduardo Fradkin: *Field Theory of Condensed Matter Systems*, Addison-Wesley Publishing Company (1991)

[14] A. Luther und I. Peschel, Phys. Rev. B 12, 3908 (1975)

[15] A.O. Gogolin, A.A. Nersesyan, A.M. Tsvelik: *Bosonization and strongly correlated Systems*, Cambridge University Press (1998)

[16] L.D. Faddev und L.A. Takhtajan, Phys. Lett. 85 A, 375 (1981)

[17] T. Holstein und H. Primakoff, Phys. Rev. 58, 1098 (1940)

[18] M. Hase, Phys. Rev. Lett. 70, 3651 (1993)

[19] K. Fabricius, A. Klümper, U. Löw, B. Büchner, T. Lorenz, G. Dhalenne und A. Revcolevschi, Phys. Rev. B 57, 1102 (1998)

[20] G. Bouzerar, Ö. Legeza, T. Ziman, cond-mat/9909375 (1999)

[21] Q. Yuan, Y. Zhang, H. Chen, cond-mat/9911119 (1999)

[22] A. Lopez, A.G. Rojo und E. Fradkin, hep-th/9401156 (1994)

[23] M. Takahashi, Phys. Rev. B 40, 2494 (1989)

[24] S. Chakravarty, B. Halperin, D.R. Nelson, Phys. Rev. Lett. 60, 1057 (1988)

[25] A.M. Polyakov, Phys. Lett. 1, 79 (1975)

[26] I. Affleck, M.P. Gelfand und R. Singh, cond-mat/9408062 (1994)

[27] S.R.White, R.M.Noack und D.J.Scalapino cond-mat/9403042v2

[28] Rainer Raupach, Dissertation an der Universität zu Köln (2000)

[29] T. Sakai und M. Takahashi, J. Phys. Soc. Jap. 58, 3131 (1989)

[30] D. Ihle, C. Schindelin, A. Weiße und H. Fehske, Phys. Rev. B 60, 9240 (1999)

[31] A. Koga, S. Kumada, N. Kawakami, cond-mat/9810414 (1998)

[32] A. Koga, S. Kumada, N. Kawakami, cond-mat/9906240 (1999)

[33] K.G. Wilson und J. Kogut, Phys. Reports 12, 75-200 (1974)

[34] J. Zinn-Justin: *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford University Press (1989)

[35] S.R. White und I. Affleck, Phys. Rev. B 54, 9862 (1996)

[36] D. Allen und D. Sénéchal, Phys. Rev. B 55, 299 (1997)

[37] A. Nersesyan, A. Gogolin und F.H.L. Eßler, Phys. Rev. Lett. 81, 910 (1998)

[38] D.C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, Eur. Phys. J. B 13, 55 (2000)

[39] P. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. 60, 821 (1988)

[40] E. Fradkin und M. Stone, Phys. Rev. B 38, 7215 (1988)

[41] A. Perelomov: *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer (1986)

[42] J. Klauder, Phys. Rev. D 19, 2349 (1979)

[43] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 50, 1153 (1983)

[44] N. Read und S. Sachdev, Phys. Rev. B 42, 4568 (1990)

[45] D.P. Arovas und A. Auerbach, Phys. Rev. B 38, 316 (1988)

[46] Jochen Gruneberg, Notizen zu antiferromagnetischen Spinsystemen (priv. Aufzeichnungen)

[47] Y. Kato und A. Tanaka, J. of Phys. Soc. of Jap. 63, 1277 (1994)

[48] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 61, 1029 (1988)

[49] S. Coleman, Comm. Math. Phys. 31, 259 (1973)

[50] S. Tang und J.E. Hirsch, Phys. Rev. B 37, 9546 (1987)

[51] N.N. Bogoliubov, J.Phys. 11, 23 (1947)

[52] C. Tsallis, J. Math. Phys. 19, 277 (1978)

[53] J.H.P. Colpa, Physica 93A, 327 (1978)

Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle noch einmal ausdrücklich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt dabei

- Prof. Dr. A. Klümper für die Vergabe dieser interessanten Diplomarbeit und seine Bereitschaft, sich jederzeit Gedanken über meine zahlreichen Fragen zu machen,
- Prof. Dr. W. Neuwirth, der freundlicherweise schnell und unkompliziert das Zweitgutachten übernommen hat,
- Jochen Gruneberg, der mir in den ersten Monaten viel Wissen über Spinsysteme und vor allem über die Renormierungsgruppe vermittelt hat,
- Rainer Raupach, der sein DMRG-Programm abwandelte und so die Untersuchung der Kette mit NNNN-Kopplung ermöglichte und mir auch sonst bei Fragen behilflich war,
- Rainer Merkt, Thorsten Knetter und Gerd Schröder für die freundliche Arbeitsatmosphäre und für einige Tips, die Kunst des LaTeXens betreffend,
- Kai Klauck, der die ersten Kapitel der Arbeit auf Fehler überprüft hat,

und nicht zuletzt meiner Mutter, die die gesamte Arbeit noch einmal korrigiert hat.

Erklärung

Hiermit versichere ich, daß ich die von mir vorgelegte Diplomarbeit selbständig angefertigt, alle benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben und die Stellen, die anderen Werken entnommen sind, entsprechend kenntlich gemacht habe. Außerdem versichere ich, daß diese Diplomarbeit noch keiner anderen Fakultät oder Universität zur Prüfung vorgelegt worden ist.