**Zusammenfassung der von Dipl.-Phys. Rachid Darradi vorgelegten Dissertationsschrift zum Thema "Quantenphasenübergänge in magnetischen Systemen: Anwendung der Coupled-Cluster-Methode"**


In dieser Arbeit haben wir numerische und analytische Untersuchungen von Grundzustandseigenschaften verschiedener niedrigdimensionaler Quantenspinsysteme durchgeführt, verwendet werden hier die Coupled-Cluster-Methode (CCM) für hohe Näherungsstufen, die exakte Diagonalisierung (ED) und die Variationsrechnung (MFA). Wir diskutieren den Einfluss von starken Quantenfluktuationen und Frustration auf Phasenübergänge bei $T = 0$ und studieren die Konkurrenz magnetischer Bindungen in Systemen mit und ohne Frustration.

Nach einer Einführung in Kapitel 1 präsentieren wir in Kapitel 2 neue Ergebnisse der CCM für die Grundzustandsenergie und die Untergittermagnetisierung des Spin-1/2-Heisenberg-Antiferromagneten auf dem Quadratgitter und dem einfach kubischen Gitter, die in exzellenter Übereinstimmung mit anderen präzisen Methoden sind.

In Kapitel 3 untersuchen wir Quantenphasenübergänge in unfrustrierten Systemen mittels der CCM, der ED und der MFA. Wir betrachten den Spin-1/2-XXZ-Heisenberg-Antiferromagneten auf dem Quadratgitter mit zwei unterschiedlichen Nächste-Nachbar-Kopplungen $J$ und $J'$. Im Parameterbereich $J' > J$ zeigt das Modell im Grenzfall des isotropen Heisenberg-Modells einen Phasenübergang zweiter Ordnung von der semi-klassischen, Néel-geordneten Phase zu einer quanten-paramagnetischen Phase mit verstärkten lokalen Dimer-Korrelationen der $J'$-Bindungen bei ungefähr $J'_c \sim 2.5 \ldots 3J$. Dieser Übergang wird durch die Quantenkonkurrenz zwischen $J'$ und $J$ auf dem Quadratgitter herbeigeführt. Wir studieren den Einfluss des Ising-Anisotropie-Parameters $\Delta$ und der Spinquantenzahl $s$ auf diesen Phasenübergang. Durch Vergrößern des Anisotropie-Parameters $\Delta > 1$ und der Quantenzahl $s > 1/2$ verringern wir den Einfluss der Quantenfluktuationen und somit den Grad der Konkurrenz. Als Folge verschiebt sich der Übergangspunkt $J'_c$ zu größeren Werten. Wir stellen fest, dass der kritische Wert $J'_c$ mit zunehmendem $\Delta$ und $s$ nach $J'_c(\Delta) \propto \alpha\Delta$ $(\Delta \geq 1)$ mit $\alpha \sim 2.3 \ldots 3.0$ und $J'_c \propto s(s+1)$ steigt, d.h. der Übergang verschwindet im Ising-Grenzfall $\Delta \to \infty$ und im Grenzfall $s \to \infty$.

In Kapitel 4 studieren wir den Grundzustand und den Magnetisierungsprozess des zweidimensionalen Spin-1/2-Shastry-Sutherland-Antiferromagneten. Es zeigt sich, dass dieses Modell mehrere Grundzustandsphasen (Néel-geordnete Phase, magnetisch ungeordnete Phase, orthogonale Dimer-Phase) besitzt. Insbesondere finden wir, dass der orthogonale Dimer-Zustand bei $J_2^d/J_1 \sim 1.477$ zum Grundzustand wird. Für den kritischen Punkt $J_2^c/J_1$, bei dem die semi-klassische, Néel-geordnete Phase verschwindet, erhalten wir mit $J_2^c/J_1 \approx 1.14 \ldots 1.39$ einen signifikant kleineren Wert als $J_2^d/J_1$. Wir kommen zu dem Schluss, dass eine Zwischenphase zwischen der Néel-geordneten und der Dimer-Phase existiert. Eine Analyse der Energie der konkurrierenden Spiral-Phase führt zu dem Beweis, dass die Spiral-Phase für keinen Wert von $J_2$ zum Grundzustand wird. Wir können des Weiteren aus den CCM-Daten schlussfolgern, dass eine Valence-Bond-Phase zwischen der Néel-geordneten und der orthogonalen Dimer-Phase existiert.

In Kapitel 5 präsentieren wir eine Methode für die direkte Berechnung der Spin-Steifigkeit mittels der CCM. Für den Spin-1/2-Heisenberg-Antiferromagneten auf dem Quadratgitter, dem Dreiecksgitter und dem einfach kubischen Gitter berechnen wir die Steifigkeit in hohen Näherungsstufen der CCM. Unsere Ergebnisse für das Quadratgitter und das einfach kubische Gitter sind in guter Übereinstimmung mit den genauesten Ergebnissen in der Literatur. Für das Dreiecksgitter sind unsere Resultate genauer als alle anderen bis jetzt durch andere Methoden erhaltenen Ergebnisse.

In Kapitel 6 untersuchen wir das Phasendiagramm eines frustrierten Heisenberg-Antiferromagneten, das $J_1$–$J_2$-Modell in zwei Dimensionen. Wir finden, dass die quantenkritischen Punkte für beide, die Néel-geordnete und die kollineare Phase $J_2^{c1} \approx 0.44 \ldots 0.45 J_1$ beziehungsweise $J_2^{c2} \approx 0.58 \ldots 0.59 J_1$ in guter Übereinstimmung mit Ergebnissen anderer Approximationen sind. Wir nutzen die CCM und die ED zur Analyse der verallgemeinerten Suszeptibilitäten. Dabei finden wir, dass der Phasenübergang vom Néel-geordneten zum paramagnetischen Zustand bei $J_2^{c1}$ von zweiter Ordnung ist. Dieses Ergebnis stimmt mit dem 'deconfined-critical-point'-Szenario, welches durch Senthil *et al.*,[1, 2] vorgeschlagen wurde, überein, widerspricht jedoch der Schlussfolgerung von Ref. [3].

In Kapitel 7 diskutieren wir den Einfluss der Zwischenschicht-Kopplung ($J_\perp$) auf die quantenparamagnetische Grundzustandsphase. Wir zeigen, dass mit wachsender Zwischenschicht-Kopplung $J_\perp > 0$ die Parameter-Region dieser Phase verkleinert wird und die paramagnetische Phase für sehr kleine $J_\perp \sim 0.2 - 0.3 J_1$ schließlich verschwindet.

In Kapitel 8 nutzen wir die CCM, um das Grundzustands-Phasendiagramm des 2D $J_1$–$J_1'$–$J_2$-Spin-1/2- und Spin-1-Heisenberg-Modells, bei dem die Nächste-Nachbar-Bindungen verschiedene Stärken $J_1$ (in $x$-Richtung, Inner-Ketten-Wechselwirkung) und $J_1'$ (in $y$-Richtung, Zwischen-Ketten-Wechselwirkung) haben, zu untersuchen. Insbesondere studieren wir den Effekt der Kopplung $J_1'$ auf den Néel-geordneten und den Streifen-Zustand. Wir finden für den Spin-1/2-Fall, dass ein Quanten-Triplepunkt (QTP) existiert, unterhalb dessen es einen Phasenübergang zweiter Ordnung zwischen der quasi-klassischen, Néel-geordneten und der Streifen-Phase gibt, wohingegen oberhalb des Punktes diese beiden Phasen durch eine magnetisch ungeordnete Zwischenphase separiert sind, die auch im Spin-1/2-$J_1$–$J_2$-Modell ($J_1' = J_1$) zu sehen ist. Der QTP liegt bei $J_1'/J_1 \approx 0.60 \pm 0.03$, $J_2/J_1 \approx 0.33 \pm 0.02$. Die Zwischen-Phase kann auch verschwinden, wenn die Spinquantenzahl $s$ beim $J_1$–$J_2$-Modell auf dem zweidimensionalen Quadratgitter erhöht wird, denn im Gegensatz zum $s = 1/2$-Fall finden wir bei $s = 1$ keinen Beweis für einen magnetisch ungeordneten Zustand zwischen dem Néel-geordneten und dem Streifen-Zustand. Allerdings fanden wir im Fall von $s = 1$ überzeugende Beweise für einen QTP bei $J_1'/J_1 = 0.66 \pm 0.03$, $J_2/J_1 = 0.35 \pm 0.02$, bei dem eine Linie von Phasenübergängen zweiter Order zwischen der quasi-klassischen, Néel-geordneten und der kollinearen Phase (für $J_1'/J_1 \lesssim 0.66$) auf eine Linie von Phasenübergängen erster Ordnung zwischen den selben zwei Phasen (für $J_1'/J_1 \gtrsim 0.66$) trifft.

In Kapitel 9 diskutieren wir den Einfluss der Austausch-Anisotropie $\Delta$ auf die Phasenübergänge des frustrierten Spin-1/2- und Spin-1-$J_1$–$J_2$-XXZ-Antiferromagneten auf dem Quadratgitter bei $T = 0$. Wir stellen fest, dass für den Spin-1/2-Fall überzeugende Beweise für zwei QTPe bei ($\Delta^c = -0.10 \pm 0.15$, $J_2^c/J_1 = 0.505 \pm 0.015$) und ($\Delta^c = 2.05 \pm 0.15$, $J_2^c/J_1 = 0.530 \pm 0.015$) existieren, zwischen welchen eine magnetisch ungeordnete Phase liegt, die die quasi-klassische, Néel-geordnete Phase von der kollinearen Phase separiert. Oberhalb des größeren QTPes ($\Delta \gtrsim 2.0$) finden wir einen direkten Phasenübergang erster Ordnung zwischen der Néel-geordneten und der kollinearen Phase vor, exakt wie im klassischen Fall. Die in $z$-Richtung ausgerichtete und in die komplanare $xy$-Richtung ausgerichteten Phasen treffen genau bei $\Delta = 1$ aufeinander, wie auch im klassischen Fall. Für alle Werte des Anisotropie-Parameters zwischen den beiden QTPen existiert ein schmales Gebiet von Werten für $J_2/J_1$, $\alpha^{c_1}(\Delta) < J_2/J_1 < \alpha^{c_2}(\Delta)$, die sich in der Nähe des Punktes der stärksten klassischen Frustration befinden, $J_2/J_1 = \frac{1}{2}$, für welche eine Zwischen-Phase existiert. Dieser Bereich ist exakt am isotropen Punkt $\Delta = 1$ am Größten, die Parameter $\alpha^{c_{1,2}}(1)$ haben hier die Werte $\alpha^{c_1}(1) = 0.44 \pm 0.01$ und $\alpha^{c_2}(1) = 0.59 \pm 0.01$. Die beiden QTPe sind durch die Werte $\Delta = \Delta^c$ charakterisiert, bei welchen $\alpha^{c_1}(\Delta^c) = \alpha^{c_2}(\Delta^c)$ ist.

Für Spin-1-Systeme sagen wir voraus, dass es für beliebige Werte $J_2/J_1$ keine ungeordnete Zwischenphase zwischen der Néel-geordneten und der kollinearen Phase gibt, weder für in

$z$-Richtung ausgerichtete ($\Delta > 1$) noch für komplanare, in $xy$-Richtung ausgerichtete ($0 \leq \Delta < 1$) Zustände. Der Quantenphasenübergang ist für alle Werte von $J_2/J_1$ und $\Delta$ von erster Ordnung. Die Position der Phasengrenze $J_2^c(\Delta)$ wurde genau bestimmt. Die Beobachtungen zeigen, dass er von seiner klassischen Position $J_2^c = \frac{1}{2}$ (gilt für alle Werte von $\Delta > 0$) am isotropen Heisenberg-Punkt ($\Delta = 1$) abweicht, wobei $J_2^c(1) = 0.55 \pm 0.01$. Im Gegensatz dazu finden wir beim $XY$ isotropen Punkt ($\Delta = 0$) $J_2^c(0) = 0.50 \pm 0.01$. Im Grenzfall des Ising-Modells ($\Delta \to \infty$) gilt wie erwartet $J_2^c \to 0.5$.

In dieser Arbeit sind mehrere interessante Ergebnisse vorgestellt worden, welche zu einem besseren Verständnis über Quantenphasenübergänge in magnetischen Systemen beitragen. Die CCM ist ein universelles Werkzeug der mikroskopischen Quanten-Vielteilchen-Theorie und der Physik der kondensierten Materie. Vor einigen Jahren wurde eine spezielle Variante der CCM zur Berechnung von Grundzustands-Eigenschaften von Quanten-Magneten entwickelt. Neuere Untersuchungen von Quantenmagneten haben demonstriert, dass die CCM fähig ist, verschiedene $T = 0$-Phasen von Quantenspinsystemen mit konkurrierenden Wechselwirkungen und die diese Phasen ineinander überführenden Quantenphasenübergänge genau zu beschreiben. Im Gegensatz zur Quanten-Monte-Carlo-Technik leidet die CCM nicht unter dem Minus-Zeichen-Problem und kann demnach auch für das anspruchsvolle Problem von hoch frustrierten Quantenmagneten und für Gitter von beliebiger räumlicher Dimensionalität verwendet werden.

Um generell physikalische Größen im Grundzustand, wie z.B. die Grundzustandsenergie, die magnetischen Ordnungsparameter, die Spin-Steifigkeit und die verallgemeinerten Suszeptibiltäten, zu berechnen, ist ein Satz von gekoppelten nichtlinearen Gleichungen für die ket- und die bra-Zustände in einer bestimmten Näherungsstufe $n$ der Approximation zu finden und zu lösen. Die Anzahl dieser Gleichungen (d.h. die technische Komplexität des nummerischen Problems) erhöht sich mit $n$. Da die Qualität und die Genauigkeit der Ergebnisse umso besser ist, desto höher die Näherungsstufe der Approximation $n$ ist, sollte man $n$ soweit wie möglich erhöhen. In Zusammenarbeit mit einer Arbeitsgruppe in Manchester hat die Magdeburger Arbeitsgruppe vor kurzem ein frei verfügbares Programm-Paket, mit dem Namen CCCM [4] entwickelt. Es ist in der Programmiersprache C++ geschrieben und verwendet die MPI-Bibliothek zur Parallelisierung. Mit diesem CCCM Paket können wir nun eine große Anzahl von CCM-Gleichungen in einer hohen Näherungsstufe $n$ lösen. Wir können auch Anregungsenergien von Spins mit verschiedenen Spinquantenzahlen $s$ berechnen. Eine weitere neue Anwendung der CCM durch das CCCM-Paket ist das Studium von frustrierten Systemen im magnetischen Feld. In der Zukunft planen wir, die CCM auf Quantenspinsysteme bei endlichen Temperaturen anzuwenden.

# Literatur


[1] T. Senthil, A. Vishwanath, L. Balents, S. Sachdev, and M. P. A. Fisher, Science **303**, 1490 (2004).

[2] T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **70**, 144407 (2004).

[3] J. Sirker, Z. Weihong, O. P. Sushkov, and J. Oitmaa, Phys. Rev. B **73**, 184420 (2006).

[4] For the numerical calculation we use the program package *CCCM* (D.J.J. Farnell and J. Schulenburg)