

Autor: Dipl.-Phys. Reimar Schmidt

## **Zusammenfassung der Dissertation: Einfluss von Dimensionalität und Struktur auf den Grundzustand und die Thermodynamik von Quantenspinsystemen**

In der Arbeit wurden zu Beginn nulldimensionale Quantenspinsysteme (magnetische Moleküle) untersucht, die durch den Heisenberg-Antiferromagneten, dem noch der Zeeman-Term zugefügt wurde, beschrieben werden können. Die Variation der Spinquantenzahl und die Berechnung thermodynamischer Eigenschaften ermöglichen es, Aussagen über die Rolle der Quantenfluktuationen bei den nulldimensionalen Systemen zu machen.

Des Weiteren wurde der Übergang des XY-Modells von einer Dimension zu zwei Dimensionen für Systeme mit der Spinquantenzahl  $s = \frac{1}{2}$  im Grundzustand ( $T = 0$ ) betrachtet. Im Unterschied zum isotropen Heisenberg-Antiferromagnet ist die Wirkung der Quantenfluktuationen beim XY-Modell geringer.

Die Untersuchungen von zweidimensionalen Systemen umfassten ebenfalls Systeme, die durch den Heisenberg-Antiferromagneten mit  $s = \frac{1}{2}$  im Grundzustand beschrieben werden können. Es wurde der Übergang von zwei Archimedischen Gittern, dem Bounce- und dem Maple-Leaf-Gitter, studiert.

Abschließend wurde in drei Dimensionen das kanonische  $J_1$ - $J_2$ -Modell auf dem kubisch raumzentrierten Gitter bei  $T = 0$  im Vergleich zum zweidimensionalen Quadratgitter für die Spinquantenzahl  $s = \frac{1}{2}$  diskutiert.

Bei den Untersuchungen stand das Zusammenspiel von Quantenfluktuationen, frustrierenden Strukturen und Dimensionalität im Mittelpunkt.

Die verwendeten Methoden, die exakte Diagonalisierung und die lineare Spinwellentheorie, erwiesen sich als effiziente Verfahren zur Betrachtung solcher Fragestellungen.

Die Ergebnisse bestätigen, dass der Einfluss der Quantenfluktuationen mit zunehmender Dimensionalität abnimmt. Frustration erhöht den Einfluss der Quantenfluktuationen und führt z.B. bei dem untersuchten nulldimensionalen Kuboktaeder bei einem von außen angelegten magnetischen Feld zu besonders großen Plateaus in der Grundzustandsmagnetisierung und einem doppelt so hohen Sprung zur vollen Magnetisierung. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Kuboktaeders lassen im Grundzustand einen klaren Unterschied zwischen halb- und ganzzahligen Spinquantenzahlen erkennen. Bemerkenswert sind ebenso Tieftemperatur-Maxima in der spezifischen Wärme, die auf niedrig liegende Singulett zurückzuführen sind.

Die Resultate der linearen Spinwellentheorie weisen beim Übergang des XY-Modells von einer Dimension zu zwei Dimensionen darauf hin, dass eine unendlich kleine Bindung in die zweite Raumrichtung zur Etablierung der Fernordnung genügt. Im Gegensatz dazu deuten die Ergebnisse der exakten Diagonalisierung auf eine endliche Bindungsstärke, die für die Einleitung des Quantenphasenübergangs, der in die ferngeordnete Phase führt, nötig ist.

Die beim Übergang vom Bounce-Gitter zum Maple-Leaf-Gitter zusätzlich ins System gebrachte Frustration verringert die Untergittermagnetisierung. Nach dem Quantenphasenübergang erster Ordnung befindet sich das System in einem aus Singulett bestehenden Produktzustand.

Beim kubisch raumzentrierten Gitter ist der Einfluss der Quantenfluktuationen nicht ausreichend, um eine ungeordnete Phase, wie man sie beim Quadratgitter findet, zu erzeugen.