

Zusammenfassung der Dissertation: "Anwendung der Coupled-Cluster-Methode zur Untersuchung frustrierter quasi-eindimensionaler und zweidimensionaler Quantenspinsysteme".

Im Rahmen der Dissertation wurde die Coupled-Cluster-Methode (CCM) zur Untersuchung von unfrustrierten und frustrierten eindimensionalen (1d) und zweidimensionalen (2d) Quantenspinsystemen auf der Grundlage des Heisenberg-Modells verwendet. Im Vordergrund stand hierbei die Verwendung und Weiterentwicklung eines numerischen Programmpaketes zur Berechnung hoher Näherungsstufen auf Multiprozessor-Computern.

Zur Validierung der Ergebnisse des Programms wurden in Kapitel 3 zunächst bereits bestimmte CCM-Resultate reproduziert und dann Berechnungen bis zu hohen Näherungsstufen $SUBn - n$ durchgeführt. Hierzu wurden der Heisenberg-Antiferromagnet (HAFM) auf der linearen Kette und auf dem isotropen Quadratgitter gewählt, zu denen exakte Resultate bzw. sehr genaue Resultate alternativer Methoden vorliegen. Tabellarisch wurden so *state-of-the-art*-CCM-Resultate dargestellt, extrapoliert und mit Literaturwerten verglichen.

Im Kapitel 4 wurde ein quasi-1d frustriertes Heisenberg-Modell aus gekoppelten J_1 - J_2 -Ketten betrachtet. Im Vordergrund stand die Untersuchung des Einflusses von Quantenfluktuationen, Frustration und der Zwischenkettenkopplung auf den Spiralwinkel und den Phasenübergangspunkt zwischen einem Grundzustand mit kollinearen, kommensurablen Spin-Spin-Korrelationen zu einem Grundzustand mit spiralartigen, inkommensurablen Spin-Spin-Korrelationen. Eine Beeinflussung durch eine Zwischenkettenkopplung wurde bisher nicht mit alternativen Methoden untersucht.

Darauf folgend wurde das Übergangsverhalten von einem ungeordneten 1d Grundzustand zu einem geordneten 2d Grundzustand an zwei unfrustrierten Gittern (Spin $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$) untersucht. Insbesondere wurde der vermutete Unterschied zwischen Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen und Spin-1-Systemen in Bezug auf die Frage nach der Existenz einer ungeordneten Phase diskutiert. Nach Hinzunahme einer frustrierenden übernächsten-Nachbar-Wechselwirkung zum betrachteten quasi-1d Spin- $\frac{1}{2}$ -System, wurde ebenfalls der Einfluss einer Zwischenkettenkopplung untersucht. Insgesamt zeigten diese Untersuchungen, dass bei gaplosem 1d Grundzustand magnetische Fernordnung bei infinitesimaler Zwischenkettenkopplung auftritt, während es für einen 1d Grundzustand mit einem Spingap einer endlichen Zwischenkettenkopplung für Fernordnung bedarf.

Im Kapitel 5 wurde beschrieben, wie die CCM zur Untersuchung von Quantenspinsystemen in Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes verwendet werden kann. Als Modellsysteme wurden der HAFM auf dem isotropen Quadratgitter und auf dem isotropen Dreiecksgitter gewählt. Für beide Modelle konnten genaue Werte für die Grundzustandsenergie, die Magnetisierung und für die Suszeptibilität ermittelt werden. Die Ergebnisse für das Quadratgitter stimmen gut mit den Ergebnissen alternativer Methoden überein. Die Zahl methodischer Alternativen ist wegen der Frustration im Falle des Dreiecksgitters kleiner. Im Vergleich konnten mittels der CCM gute Werte für die angegebenen Größen, sowie für das $M/M_s = \frac{1}{3}$ -Plateau bestimmt werden. Bisher in der Literatur nicht zu finden, waren hierbei die Ergebnisse für die Magnetisierungen der einzelnen Untergitter, die Suszeptibilität in Abhängigkeit vom Feld und die entsprechenden Feldabhängigkeiten der Winkel.

Im Kapitel 6 wurde demonstriert, dass mit dem vorliegenden Programmpaket exakte dimer- und plakettenartige Valence-Bond Grundzustände gefunden werden können. Hierzu wurden HAFMs auf der J_1 - J_2 -Kette, dem Shastry-Sutherland-Modell und auf dem CAVO-Modell untersucht, welche jeweils in verschiedenen Parameterregionen lokalisierte Dimere oder Plaketten ausbilden. Ein Vergleich der bestimmten Resultate mit Ergebnissen alternativer Methoden zeigt erneut gute Übereinstimmung.

Als Fazit dieser Dissertation soll festgehalten werden, dass die CCM auf der Grundlage des numerischen Programmpaketes und der Auswertung hoher Näherungsstufen die Physik der hier untersuchten Systeme gut beschreibt.

Summary of the thesis: "Application of the Coupled-Cluster Method to study frustrated quasi-one-dimensional and two-dimensional quantum spin systems".

In this thesis the coupled-cluster-method (CCM) was used to study unfrustrated and frustrated one-dimensional (1D) and two-dimensional (2D) quantum spin systems based on the Heisenberg model. The main aim was to use and to improve a numerical program for calculating and solving high orders of approximation ($\text{SUB}n - n$) implemented on massive parallel computers. In order to validate this approach, previously published CCM results of the Heisenberg antiferromagnets (HAFMs) on the simple linear chain and the isotropic square lattice were recalculated in chapter 3. These calculations now form the state-of-the-art for high-order $\text{SUB}n - n$ CCM, and the results compared favourably with the best results of alternative approximate methods taken from the literature.

In chapter 4 a quasi-1d frustrated Heisenberg model of coupled J_1 - J_2 chains was studied in order to analyze the influence of quantum fluctuations, frustration, and the interchain coupling on the spiral angle. The phase transition point between a ground state with collinear, commensurate spin-spin-correlations to a ground state with spiral-like, incommensurate spin-spin correlations was investigated. In particular, it should be noted that the influence of the interchain coupling had not been studied in the literature before. In the following chapter, the ground-state magnetic long-range order of quasi-1D quantum Heisenberg antiferromagnets was investigated for spin quantum numbers $s = 1/2$ and $s = 1$. In particular, its dependence on the interchain coupling was considered. It was found that an infinitesimal interchain coupling is sufficient to stabilize magnetic long-range order for the unfrustrated spin-1/2 system. This result is in agreement with results obtained by other methods. By contrast, it was found that a finite interchain coupling is necessary to stabilize magnetic long-range order for the $s = 1$ system. A quasi-1D spin-1/2 system was also considered, where a frustrating next-nearest neighbour in-chain coupling was included. For stronger frustration, a finite interchain coupling was found to be necessary to have magnetic long-range order in the ground state. Indeed, it is known that the strength of the interchain coupling necessary to establish magnetic long-range order is related to the size of the spin gap of the isolated chain.

In chapter 5 the CCM was applied in order to study the ground-state properties of $s = 1/2$ HAFMs on the (unfrustrated) square-lattice and on the (frustrated) triangular lattice in the presence of external magnetic fields. For both quantum spin systems, precise values for the ground state energy, the ground state magnetization and the magnetic susceptibility were determined by carrying out high-order $\text{SUB}n - n$ calculations. These results were then extrapolated in the limit $n \rightarrow \infty$ by using suitable extrapolation techniques. The results for the square lattice are in good agreement with the results of other alternative methods such as quantum Monte Carlo (QMC). However, there are fewer such alternative approximate methods for the HAFM on the triangular lattice due to frustration. Indeed, the use of QMC is severely restricted because of the infamous sign problem. Good values for the 1/3-plateau in the magnetization curve were determined by using the CCM. Furthermore, the sublattice magnetizations and the field dependency of both the magnetic susceptibility and the spin-angles were found. These results have never before been described elsewhere in the literature.

In chapter 6 it was demonstrated that it is possible to find exact dimer- and plaquette-ordered singlet ground states (so-called valence-bond (VB) states) using the existing numerical CCM program for independent-spin product model states. The approach also greatly extends the range of applicability to which the CCM can be applied. The J_1 - J_2 chain, the Shastry-Sutherland model and the CAVO model were considered in order to illustrate this point. All of these systems have special parameter regions with exact dimer or plaquette-ordered VBC-states. The results determined via the CCM are again in good agreement with exact results and with results of other approximate methods.

In summary one can conclude that the results of the numerical CCM-program for high-order $\text{SUB}n - n$ approximations give a good description of the physics in the quantum spin systems considered here. One might say that the CCM is providing a very flexible (e.g., wide range of systems and VB states) and generally accurate and reliable (in comparison to the best of other approximate methods) method.