

Nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklungen für unkonventionelle Mottisolatoren

Dissertation
zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften der
Fakultät Physik der Technischen Universität Dortmund

vorgelegt von
Dominik Ixert
geboren in Dortmund

Lehrstuhl für Theoretische Physik I
Fakultät Physik
Technische Universität Dortmund
2016

1. Gutachter:	Prof. Dr. Kai P. Schmidt
2. Gutachter:	Prof. Dr. Götz S. Uhrig
Vorsitzender der Prüfungskommission:	Prof. Dr. Metin Tolan
Vertreterin der wissenschaftlichen Mitarbeiter:	Dr. Bärbel Siegmann
Datum des Einreichens der Arbeit:	21. September 2016
Tag der mündlichen Prüfung:	28. Oktober 2016

Kurzfassung

In dieser Arbeit werden Linked-Cluster Entwicklungen weiterentwickelt und auf verschiedene Hubbard- und Spinmodelle bei Temperatur $T = 0$ angewendet. Die Spinmodelle können dabei als effektive Beschreibung der isolierenden Mottphase von Hubbardmodellen angesehen werden. In den meisten Fällen sind die verwendeten Linked-Cluster Entwicklungen nichtperturbative Varianten, welche physikalische Größen auf einzelnen Graphen mit nichtperturbativen Methoden wie kontinuierlichen unitären Transformationen oder exakter Diagonalisierung berechnen, um Resultate im thermodynamischen Limes zu erhalten.

Das halbgefüllte Hubbardmodell auf einer Einparameterfamilie von flussgefüllten Quadratgittern besteht aus einem anisotropen Parameter, welcher zwischen dem Grenzfall isolierter Dimere und dem isotropen Quadratgitter interpoliert. Es stellt sich heraus, dass das Grundzustandsphasendiagramm aus vier Phasen besteht: Einem Halbmetall und einem Bandisolator für schwache Wechselwirkungen sowie einer Néelphase und einem Valenzbondkristall bei starken Wechselwirkungen. Alle Ergebnisse sind entlang der gesamten Parameterachse konsistent mit der Abwesenheit einer Spinflüssigkeitsphase. Das Phasendiagramm wird durch eine Kombination von Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen und kontinuierlichen unitären Transformationen bestimmt. Dabei werden die kontinuierlichen unitären Transformationen in zwei Schritten durchgeführt: Zuerst werden nichtperturbative graphenbasierte kontinuierliche unitäre Transformationen verwendet, um effektive Quantenspinmodelle für die Mottphase abzuleiten. Im Anschluss daran werden diese Spinmodelle innerhalb des Valenzbondkristalls mit perturbativen kontinuierlichen unitären Transformationen analysiert, indem die Triplonlücke bestimmt und der Zusammenbruch des Valenzbondkristalls untersucht wird.

Kürzliche Studien haben Hinweise für die Existenz einer nichtmagnetischen isolierenden Phase innerhalb der Mottphase des halbgefüllten Hubbardmodells auf dem π -Fluss Dreiecksgitter gefunden. In dieser Arbeit wird mit perturbativen kontinuierlichen unitären Transformationen ein effektives Spinmodell für dieses Hubbardmodell abgeleitet. Die Analyse der effektiven Spinmodelle mittels exakter Diagonalisierung zeigt keine Anzeichen für die Existenz einer solchen exotischen Phase.

Abschließend wird in dieser Arbeit ein generisches Schema zur Durchführung von nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen in langreichweitig geordneten Quantenphasen vorgestellt. Dieses Schema geht über das Paradigma der normalen nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen hinaus und erweitert diese, sodass eine Berechnung um einen geordneten Referenzzustand durchgeführt werden kann. Die Cluster werden dann, als von diesem Referenzzustand umgeben, betrachtet, wodurch sich Randfelder ergeben, welche die mit der Ordnung assoziierte Symmetrie brechen. Das Einbeziehen dieser Randfelder in der exakten Diagonalisierung auf den einzelnen Graphen, führt – selbst für langreichweitig magnetisch geordnete Phasen mit lückenlosen Anregungen, bei denen die divergierende Korrelationslänge üblicherweise die Anwendung von nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen verhindert – zu einem monotonen Konvergenzverhalten. Weiterhin wird das Skalierungsverhalten der Datensequenzen zu unendlichen Ordnungen untersucht. Dabei werden unterschiedliche Graphenentwicklungen angewendet, welche eine volle Graphenentwicklung sowie Entwicklungen in rechteckigen und symmetrischeren quadratischen Clustern beinhalten. Das Schema wird auf das Spin-1/2 und Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Quadrat- und Dreiecksgitter, welche beide einen langreichweitig magnetisch geordneten Grundzustand mit lückenlosen Spinwellenanregungen aufweisen, sowie auf das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter, welches einen spontan trimerisierten lückenbehafteten Grundzustand besitzt, angewendet.

Abstract

In this thesis linked-cluster expansions are further developed and applied to different Hubbard and spin models at zero temperature. The spin models can be viewed as effective descriptions of the Mott-insulating phase of Hubbard models. For the most part the used linked-cluster expansions are non-perturbative variants which use non-perturbative methods like continuous unitary transformations or exact diagonalization for calculating physical properties on the graphs of the expansion to gain information in the thermodynamic limit.

The half-filled Hubbard model on a one-parameter family of vortex-full square lattices consists of an anisotropy parameter which interpolates between the limit of isolated dimers and the isotropic square lattice. It is found that the ground-state phase diagram consists of four phases: a semimetal and a band insulator in the weak coupling limit, as well as a Néel phase and valence bond solid in the strong coupling limit. All results are consistent with the absence of a spin-liquid phase in the whole parameter range. This phase diagram is mapped out by a combination of quantum Monte Carlo calculations and continuous unitary transformations. The continuous unitary transformations are performed in a two-step process: non-perturbative graph-based continuous unitary transformations are used to derive effective quantum spin models within the Mott insulator. These spin models are then analyzed in the valence bond solid via perturbative continuous unitary transformations to calculate the one-triplon gap and detect the breakdown of the valence bond solid.

Recent studies have found indications for a non-magnetic insulating phase within the Mott insulator of the half-filled Hubbard model on the π -flux triangular lattice. In this work perturbative linked-cluster expansions are used to derive an effective spin model for this Hubbard model on the π -flux triangular lattice. The analysis of these effective spin models by exact diagonalization on large clusters yield no signs of such an exotic phase.

In the final part of this thesis, a generic scheme is introduced to perform non-perturbative linked-cluster expansions in long-ranged ordered quantum phases. This scheme goes beyond the paradigm of normal non-perturbative linked-cluster expansions and expands them in a way which allow the calculation about an ordered reference state. The clusters are then considered to be surrounded by this reference state which gives rise to edge-fields that break the symmetry associated with the corresponding order. Including these edge-fields in the exact diagonalization calculations on single graphs leads to monotonic convergence behavior, even for long-range magnetic ordered phases with gapless excitations where the diverging correlation length usually prevents the applications of non-perturbative linked-cluster expansions. Furthermore, the scaling behavior of the data sequences, obtained by the non-perturbative linked-cluster expansions, to the infinite-order limit is investigated and different graph expansions are used, including a full-graph decomposition, rectangular clusters, and more symmetric square clusters. The scheme is applied to the spin-1/2 and spin-1 Heisenberg model on the square and triangular lattice, which both have a long-range magnetically ordered ground state with gapless spin-wave excitations, as well as the spin-1 Heisenberg model on the kagome lattice, which displays a spontaneous trimerized ground state with gapped excitations.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Linked-Cluster Entwicklungen	7
2.1	Graphenentwicklung	7
2.1.1	Grundlegende Definitionen	7
2.1.2	Linked-Cluster Theorem	13
2.2	Lösungsverfahren für einzelne Graphen	15
2.2.1	Exakte Diagonalisierung mit Randfeldern für geordnete Phasen	15
2.2.2	Kontinuierliche unitäre Transformationen	21
2.3	Extrapolationsverfahren	26
2.3.1	Wynn-Algorithmus	26
2.3.2	Reihenextrapolation	27
3	Exakte Diagonalisierung	29
3.1	Lanczos-Algorithmus	29
3.2	Darstellung von Zuständen	30
3.3	Symmetrien	32
3.3.1	S^z -Symmetrie	32
3.3.2	Translationssymmetrie	34
3.3.3	Untergitterkodierung	37
3.3.4	Spin-Flip Symmetrie	40
3.3.5	Weitere Symmetrien	40
4	Hubbardmodelle	41
4.1	Hubbardmodell auf flussgefüllten Quadratgittern	41
4.1.1	Starkkopplungslimes	43
4.1.2	Effektives Spinmodell	43
4.1.3	pCUT für die VBS-Phase	50
4.1.4	Ergebnisse	53
4.1.5	Phasendiagramm und Schlussfolgerungen	62
4.2	Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter	64
4.2.1	Effektives Spinmodell	65
4.2.2	ED für das effektive Ordnung 4 Spinmodell	69
4.2.3	J_1 - J_4 Modell	72
4.2.4	J_1 - J_2 Modell	75
4.2.5	Schlussfolgerungen	80

5 NLCEs für Quantenspinmodelle	81
5.1 Langreichweitig magnetisch geordnete Quantenphasen	82
5.1.1 Graphenentwicklungen	82
5.1.2 Skalierungen für NLCEs	84
5.1.3 Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter	86
5.1.4 Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Quadratgitter	98
5.1.5 Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter	102
5.1.6 Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter	106
5.1.7 Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Dreiecksgitter	114
5.1.8 Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter	116
5.1.9 Schlussfolgerungen	119
5.2 Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter	120
5.2.1 Graphenentwicklungen für das Kagomegitter	121
5.2.2 Spin-1 Heisenbergmodell auf der Dreieckskette	125
5.2.3 NLCEs für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter . . .	131
5.2.4 Schlussfolgerungen	138
6 Zusammenfassung und Ausblick	139
A Graphen-Algorithmen	147
A.1 Algorithmus zur Graphengenerierung	147
A.2 Algorithmus zur Grapheneinbettung	148
A.3 Algorithmus zur Graphensubtraktion	150
B Weiterführende Abbildungen	151
B.1 Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter	152
B.2 Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Quadratgitter	154
B.3 Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Dreiecksgitter	170
B.4 Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter	186
C Effektives Heisenbergmodell für die Spin-1 Dreieckskette im dimerisier-	
ten Limes	191
Literaturverzeichnis	195
Teilpublikationen	207
Danksagung	209

Kapitel 1

Einleitung

Seit den Anfängen der Quantenmechanik zu Beginn des 20. Jahrhunderts hat das Verständnis von elektronischen und magnetischen Systemen den technischen Fortschritt stark vorangetrieben. So wäre zum Beispiel die moderne Elektrotechnik ohne Transistoren nicht möglich und die Entdeckung des Riesenmagnetowiderstands [1, 2] hat dazu geführt, dass deutlich speichereffizientere Festplatten entwickelt werden konnten. Um ein fundiertes mikroskopisches Verständnis solcher Systeme zu erlangen, ist eine theoretische Beschreibung von Quantenphasen und den Phasenübergängen zwischen diesen unerlässlich. Für die Klassifikationen geordneter Phasen hat sich das von Landau [3, 4] eingeführte Konzept der Symmetriebrechung als sehr erfolgreich erwiesen. Dabei wird der geordneten Phase ein lokaler Ordnungsparameter zugewiesen, welcher mit einer Symmetriebrechung einhergeht. Für einen Ferromagneten wäre dies beispielsweise die Magnetisierung, welche in der ferromagnetischen Phase einen endlichen Wert besitzt. Sollte dieser Ordnungsparameter verschwinden, so findet ein Phasenübergang zu einer anderen Phase statt, welche sich – im Rahmen der Landautheorie – durch einen anderen Ordnungsparameter beschreiben lässt oder keinen Ordnungsparameter besitzt, wie zum Beispiel ein Paramagnet oder der Übergang zu unendlichen Temperaturen.

Anderson hat 1973 vorgeschlagen [5], dass auch nichttriviale Quantenphasen existieren, welche keinerlei Symmetriebrechung aufweisen. Solche sogenannten Quantenspinflüssigkeiten entziehen sich der Beschreibung durch die klassische Landautheorie und es können unkonventionelle physikalische Phänomene, wie beispielsweise fraktionale Anregungen [6] oder topologische Ordnung [7–10], auftreten, welche für die Entwicklung neuer Technologien von Nutzen sein können. Ein Beispiel ist der ganzzahlige (und später auch fraktionale) Quanten-Hall-Effekt [7, 11–13]. Die dort auftretenden Widerstandsplateaus besitzen alle die gleiche Symmetrie und lassen sich nicht über einen lokalen Ordnungsparameter erfassen, wie es die klassische Landautheorie vorsieht. Stattdessen zeigt sich, dass der Hallwiderstand proportional zu einer topologischen Invarianten ist, welche, im Falle des ganzzahligen Quanten-Hall-Effekts, Chern-Zahl genannt wird [7, 9, 10]. Das Besondere an dieser Invarianten ist, dass sie nicht von lokalen Eigenschaften des Systems, sondern von globalen Eigenschaften – also der Topologie – des Systems, abhängt. Isolatoren, welche topologisch geschützte Eigenschaften aufweisen [8–10, 14–19], sind deshalb vor allem für die Entwicklung von stabilen Quantenspeichern von Interesse, da eine lokale Störung die topologisch geschützte Information nicht zerstören kann. In diesem Zusammenhang sind auch die sogenannten Anyonen [20–22] interessant. Während in drei Raumdimensionen

nur Fermionen und Bosonen existieren, welche bei Vertauschung einen Phasenfaktor von 1 oder -1 aufweisen, so existieren in zwei Raumdimensionen auch Teilchen – die Anyonen –, welche bei Vertauschung einen beliebigen komplexen Phasenfaktor erhalten. Insbesondere die nicht-abelschen Anyonen [22–25], bei denen der, normalerweise skalare, Phasenfaktor eine Matrix ist, sind vielversprechend für die Konstruktion von stabilen Quantenspeichern. Die Reihenfolge der Vertauschung ist aufgrund der Nichtvertauschbarkeit der Matrizen relevant und kann als Möglichkeit genutzt werden Informationen fehlertolerant zu speichern [22, 23]. Quantenspinflüssigkeiten, topologische Isolatoren und Anyonen sind daher attraktive Kandidaten für die Weiterentwicklung von Quantencomputern und der Quanteninformationsverarbeitung [22]. Entsprechend hat sich die Suche nach exotischen Phasen in den letzten Jahrzehnten zu einem vielversprechenden und spannenden Aufgabenfeld innerhalb der Theorie kondensierter Materie entwickelt.

Generell wird die Ausbildung von exotischen Phasen in stark korrelierten Systemen durch frustrierte Wechselwirkungen [5, 26] begünstigt und es gibt viele Hinweise darauf, dass das Zusammenspiel von starken Quantenfluktuationen und Frustration den größten Einfluss auf die Stabilität unkonventioneller Quantenphasen hat [6, 27]. Frustration bedeutet, dass nicht alle Freiheitsgrade des Systems gleichzeitig optimal befriedigt werden können. So können auf einem Dreieck, bei dem sich an jeder Ecke ein Spin-1/2 befindet und die Kopplungen zwischen diesen eine antiparallele Ausrichtung begünstigen, nicht alle drei Kopplungen gleichzeitig energetisch optimiert werden, weil stets zwei Spins parallel zueinander stehen. Da niedrigdimensionale Systeme erhöhte Quantenfluktuationen aufweisen, werden in diesem Forschungsfeld vor allem zweidimensionale frustrierte Systeme mit starken Korrelationen untersucht.

Für die Beschreibung von stark korrelierten Elektronensystemen hat sich insbesondere das Hubbardmodell [28] als ein Standardmodell etabliert. Es besteht in seiner grundlegendsten Form aus einem kinetischen Anteil, welcher durch einen Austausch benachbarter Elektronen berücksichtigt wird, und einem Wechselwirkungsanteil – der Coulombabstoßung zwischen den Elektronen. Letztere beschreibt die langreichweitige Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen und die elektrostatische Abschirmung (engl. screening) durch diese. Vor allem als ein Kandidat zur Beschreibung von Hochtemperatursupraleitung [29] erlangte das Hubbardmodell besondere Aufmerksamkeit [30], wird aber auch im Rahmen des Quantenmagnetismus verwendet, für den insbesondere halbe Bandfüllung relevant ist. Generisch zeigt sich für das halbgefüllte Hubbardmodell bei Temperatur $T = 0$ eine metallische Phase bei kleinen Wechselwirkungen – das heißt eine große Elektronenkinetik – und eine isolierende Mottphase bei großen Wechselwirkungen [31]. Letztere steht im Gegensatz zu den gewöhnlichen Bandisolatoren, da die elektronische Bandstruktur weiterhin ein Metall vorhersagen würde. Dennoch ist das System ein Isolator, da aufgrund der Elektronenabstoßung eine Energielücke, die sogenannte Ladungslücke, vorliegt. Diese Ladungslücke kann ausgenutzt werden, um die Ladungsfreiheitsgrade auszuintegrieren, das heißt die Spin- und Ladungsfreiheitsgrade voneinander zu entkoppeln, und dadurch ein effektives Quantenspinmodell für das halbgefüllte Hubbardmodell zu erhalten, was bereits mit unterschiedlichen Methoden durchgeführt wurde [32–40]. Unter anderem wurde dies mit auf kontinuierlichen unitären Transformationen (CUTs) [41–43] basierenden Methoden erreicht [36–39], welche auch in dieser Arbeit für die systematische Ableitung von effek-

tiven Spinmodellen genutzt werden. Obwohl die Größe des Hilbertraums für das effektive Spinmodell kleiner als für das Hubbardmodell ist, stellt die Untersuchung des effektiven Modells weiterhin eine anspruchsvolle Aufgabe dar. Der Hauptvorteil effektiver Modelle liegt darin, dass das effektive Modell nur noch die relevante Niederenergiephysik enthält und so einen intuitiveren Zugang mit Näherungsmethoden ermöglicht [44].

Sowohl für das Hubbardmodell als auch für (effektive) Spinmodelle konnten unter anderem bereits exotische Spinflüssigkeitsphasen auf frustrierten Dreiecksgittern [38, 45–57] und dem hochfrustrierten Kagomegitter [58–63] gefunden werden. Während das Hubbardmodell auf dem isotropen Dreiecksgitter vermutlich ein lückenloses Spin-Bose Metall ausbildet [38, 45–50], konnten kürzlich erste Anzeichen für die Existenz einer nichtmagnetischen isolierenden Phase auf dem π -Fluss Dreiecksgitter gefunden werden [51]. Erstere lässt sich durch ein effektives Spinmodell verstehen, in dem die Vierspinwechselwirkungen den wichtigsten Beitrag für die Ausbildung der Phase darstellen [38] und daher wurde ein ähnliches Szenario auch für das Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter vorgeschlagen [51]. Ein reines Heisenbergmodell [64] auf dem Dreiecksgitter bildet hingegen lediglich eine antiferromagnetische langreichweitige Spinordnung – die sogenannte 120° -Ordnung – aus [65–68], da die Frustration der Wechselwirkungen offenbar noch nicht stark genug ist, um die Ordnung komplett zu unterdrücken. Im Gegensatz dazu steht der Grundzustand des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Kagomegitter, welcher wahrscheinlich eine Quantenspinflüssigkeit mit topologischer Ordnung darstellt [58, 59]. Neben der Frustration des Systems spielt allerdings auch die Spinquantenzahl eine wichtige Rolle. Systeme aus höherzahligen Spins verhalten sich bekanntermaßen „klassischer“, das heißt sie weisen geringere Quantenfluktuationen auf. So ist der Grundzustand des Spin-1 Heisenbergmodells auf dem Kagomegitter keine Spinflüssigkeit mehr, sondern eine langreichweitig geordnete Singulettphase mit endlicher Energielücke [69–74]. Die drei Spins der hoch- oder runter-Dreiecke des Kagomegitters verbinden sich dabei zu Singulettts, welche Trimere genannt werden, und das System weist eine spontane Trimerisierung auf den hoch- oder runter-Dreiecken auf. Eine weitere Erhöhung des Spins führt dann, wie auf dem Dreiecksgitter, zu einer langreichweitig magnetisch geordneten Phase [73, 75–77].

Die Existenz weiterer Spinterme hat ebenfalls einen großen Einfluss auf die zugrundeliegende Physik. Zum Beispiel führt eine Erweiterung des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Kagomegitter zur Ausbildung einer chiralen Spinflüssigkeit [60–63]. Interessant ist, dass eine Erweiterung des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Dreiecksgitter um übernächsten Nachbar Wechselwirkungen oder einen Chiralitätsterm ebenfalls ein reichhaltiges Phasendiagramm ergibt, welches Gegenstand vieler Untersuchungen ist [52–57, 78–80]. Insbesondere deuten aktuelle numerische Arbeiten auf die Existenz einer topologischen Spinflüssigkeitsphase für das Spin-1/2 Heisenbergmodell mit zusätzlichen Übernächstnarkopplungen hin [52–57]. Bemerkenswerterweise können diese erweiterten Spinmodelle oft als effektive Niederenergiebeschreibung der Mottphase von Hubbardmodellen verstanden werden: So treten Kopplungen zu übernächsten Nachbarn bereits als natürliche Konsequenz einer systematischen Entwicklung auf [32–40], während Chiralitätsterme zum Beispiel durch einen zusätzlichen magnetischen Fluss durch die Plaketten des Gitters induziert werden können [81].

In den letzten Jahren wurden auch starke Hinweise auf Spinflüssigkeiten in $SU(N)$ -symmetrischen Mottisolatoren mit $N > 2$ gefunden [82–85]. Diese $SU(N)$ -symmetrischen Mottisolatoren sind insbesondere interessant, da sie sich in optischen Gittern mit ultrakalten Erdalkaliatomen realisieren lassen [86–89].

Mottisolatoren – und dementsprechend niedrigdimensionale Spinmodelle bei Temperatur $T = 0$ – sind also ein idealer Kandidat, um die Physik von exotischen Spinflüssigkeitsphasen zu untersuchen. Dazu ist es zum einen wichtig solche Phasen identifizieren und charakterisieren zu können, welches aufgrund des Fehlens eines lokalen Ordnungsparameters sehr subtil sein kann und daher eine große Herausforderung darstellt. Angesichts dessen ist es auch experimentell nicht einfach unkonventionelle Phasen nachzuweisen. Auf der anderen Seite ist es eine zentrale Aufgabe konventionelle Phasen quantitativ richtig zu erfassen, um reale Systeme besser charakterisieren zu können. Dadurch können auch Experimente in die Richtung von exotischeren Phasen gelenkt werden, welche wiederum neue Anreize für die Theorien liefern.

Vom theoretischen Standpunkt aus müssen daher Methoden entwickelt werden, welche es ermöglichen quantitative Informationen über Quantenphasen zu erlangen. Das antiferromagnetische Heisenbergmodell bei Temperatur $T = 0$ stellt ein ideales Testsystem für diese Methoden dar, da, wie bereits beschrieben, eine Mannigfaltigkeit an unterschiedlichen Phasen in Abhängigkeit vom Frustrationsgrad und dem Gesamtspin vorliegt.

Neben den schon erwähnten CUT-Methoden existieren viele weitere numerische Techniken für die Behandlung zweidimensionaler Quantenvielteilchensysteme, die ihre eigenen Stärken und Beschränkungen besitzen. Während die Methode zur exakten Diagonalisierung (ED) [90, 91] zwar auf beliebige Gittermodelle angewendet werden kann, ist die untersuchbare Systemgröße sehr beschränkt und die Ausnutzung von Symmetrien ein wichtiger Bestandteil, um die Systemgrößen so weit wie möglich zu erhöhen. Im Gegensatz dazu stehen Quanten-Monte-Carlo (QMC) Methoden [92], welche extrem große Systeme berechnen können, aber aufgrund des Vorzeichenproblems, oft nicht anwendbar sind. Verfahren die auf variationellen Tensornetzwerken basieren, wie die Dichtematrixrenormierungsgruppe (DMRG) [93, 94] oder (i)PEPS (von engl. (infinite) projected entangled pair states) [95–98], erlauben ebenfalls eine Berechnung auf sehr großen bis hin zu unendlich großen Systemen. Die DMRG-Methoden funktionieren aber nur für (quasi) eindimensionale Systeme zuverlässig und die (i)PEPS-Algorithmen sind numerisch sehr anspruchsvoll und erfordern eine hohe Rechenzeit.

Ein weiteres vielversprechendes Verfahren sind nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklungen (NLCEs) [99–104]. Sie basieren ebenso wie störungstheoretische Hochordnungsreihenentwicklungen auf dem Linked-Cluster Theorem [99, 102, 105, 106], welches es erlaubt, das Gitter in kleinere Teilsysteme – die Cluster oder Graphen genannt werden – zu zerlegen und die Berechnung einer physikalischen Größe im thermodynamischen Limes auf eine Berechnung auf den Graphen zurückzuführen. Für die perturbativen Linked-Cluster Entwicklungen (LCEs) wird die Störungsordnung vorgegeben, wodurch die Größe der benötigten Graphen kanonisch begrenzt ist. Bei der nichtperturbativen Variante wird die Störungsrechnung auf den Graphen durch eine nichtperturbative Methode, wie ED, DMRG [107] oder CUTs [103, 104] ersetzt.

Bisher sind alle NLCEs Realraummethoden, wodurch Systeme mit einer endlichen Energielücke gut konvergieren sollten, da diese eine endliche Korrelationslänge aufweisen. Lückenlose Systeme besitzen hingegen eine divergierende Korrelationslänge und die NLCE wird problematisch oder divergiert sogar. Doch auch für Systeme mit Energielücke können NLCEs ein nichtmonotones Verhalten zeigen [74]. Dieses lässt sich auf quantenkritische Punkte in niederdimensionalen Teilsystemen zurückführen, wie in dieser Arbeit gezeigt wird [74]. So weist das Spin-1 Heisenbergmodell auf der eindimensionalen Dreieckskette, welche Teil einer Graphenzerlegung des zweidimensionalen Kagomegitters ist, einen quantenkritischen Punkt auf, welcher eine NLCE für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem zweidimensionalen Kagomegitter erschwert [74]. Das Grundproblem ist in diesem Fall, dass die Berechnung auf den eindimensionalen Kettengraphen die trimerisierte Singulettordnung des Kagomegitters nicht berücksichtigt und deshalb Fluktuationen in der Entwicklung auftreten, die nicht Teil des zweidimensionalen Systems sind. Sowohl für lückenlose als auch lückenbehaftete geordnete Phasen ist es deshalb notwendig, die zugrundeliegende Quantenordnung in die NLCE miteinzubeziehen [108, 109].

Ein wichtiger Teil dieser Arbeit ist es, die NLCEs zu erweitern, sodass geordnete Phasen – insbesondere lückenlose magnetisch geordnete Phasen – mit einer NLCE quantitativ richtig erfasst werden können. Dazu werden sogenannte Randfelder eingeführt, welche den einzelnen Graphen der Entwicklung die geordnete Phase des unendlichen Systems vorgeben [108, 109]. Für das Isingmodell im transversalen Feld wurde eine solche NLCE bereits erfolgreich durchgeführt [108]. In dieser Arbeit werden die erweiterten NLCEs für das Spin-1/2 und Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Quadrat- und Dreiecksgitter angewendet, um zu zeigen, dass die Randfelder eine systematische Möglichkeit darstellen NLCEs in geordneten Antiferromagneten durchzuführen [109]. Die Methode wird ebenfalls auf das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter angewendet, wodurch ein monotones Konvergenzverhalten erreicht werden kann [109].

Weiterhin werden in dieser Arbeit die Linked-Cluster Entwicklungen sowohl in ihrer perturbativen wie nichtperturbativen Form genutzt, um mittels CUTs effektive Spinmodelle für das Hubbardmodell auf anisotropen π -Fluss Quadratgittern (flussgefüllte Quadratgitter) [40, 110] und dem π -Fluss Dreiecksgitter [40] abzuleiten. Das effektive Spinmodell für das Hubbardmodell auf den flussgefüllten Quadratgittern wird mit nichtperturbativen graphenbasierten CUTs (gCUTs) [103, 104] abgeleitet und im Anschluss um eine Valenzbondphase [5, 111] entwickelt, um die Triplonlücke mit perturbativen CUTs (pCUTs) [112–114] zu bestimmen. Triplonen entsprechen dabei Quasiteilchen, welche als angezogene (von engl. dressed) Anregungen von Singulett zu Triplett [115] verstanden werden können. Die Triplonlücke stellt dann den Ordnungsparameter der Valenzbondphase dar und der Zusammenbruch dieser Phase kann dann anhand der Triplonlücke untersucht werden. Durch eine Kombination von CUTs und QMC wird so das Phasendiagramm für die betrachtete Einparameterfamilie flussgefüllter Quadratgitter ermittelt [40].

Für das π -Fluss Dreiecksgitter werden pCUTs verwendet, um ein effektives Spinmodell abzuleiten, welches anschließend mit ED analysiert wird. Dabei soll insbesondere geklärt werden, ob die vorgeschlagene nichtmagnetische isolierende Phase [51] – welche ein Kandidat für eine Quantenspinflüssigkeit ist – ebenfalls durch ein effektives Spinmodell verstan-

den werden kann, wie es für das isotrope Dreiecksgitter der Fall ist [38]. Gezeigt wird in dieser Arbeit, dass die Situation weitaus subtiler als beim isotropen Dreiecksgitter ist und die Vierspinterme vermutlich der Ausbildung einer nichtmagnetischen isolierenden Phase entgegenwirken.

Diese Doktorarbeit gliedert sich wie folgt: Zuerst wird in Kapitel 2 eine Einführung in die Funktionsweise von Linked-Cluster Entwicklungen gegeben und es werden die verwendeten perturbativen und nichtperturbativen Lösungsverfahren für die einzelnen Graphen erläutert. Vor allem wird die Methode der NLCEs um Randfelder erweitert, welche eine Entwicklung um geordnete Referenzzustände ermöglichen. In Kapitel 3 wird dann die Methode zur exakten Diagonalisierung vorgestellt. Es wird darauf eingegangen wie Symmetrien ausgenutzt werden können, um die betrachtbare Systemgröße weiter zu erhöhen.

Nachdem die methodischen Grundlagen gelegt wurden, werden in Kapitel 4 effektive Spinmodelle für das Hubbardmodell auf einer Familie von anisotropen π -Fluss Quadratgittern sowie auf dem π -Fluss Dreiecksgitter abgeleitet und anschließend analysiert, um Aussagen über die Niederenergiephysik der Mottphase des Hubbardmodells treffen zu können. Anschließend wird in Kapitel 5 die zuvor vorgestellte Methode, die die NLCEs um Randfelder erweitert, für Heisenbergmodelle auf verschiedenen Gittern getestet und es werden quantitative Grundzustandseigenschaften ermittelt. Die Arbeit schließt mit einer kurzen Zusammenfassung und einem Ausblick auf mögliche Anknüpfungspunkte für zukünftige Studien in Kapitel 6 ab.

Kapitel 2

Linked-Cluster Entwicklungen

Dieses Kapitel soll eine kurze Einführung in die sogenannten Linked-Cluster Entwicklungen (LCEs) geben. Diese stellen ein zentrales Instrument für die Behandlung unterschiedlicher Problembereiche der Quantenphysik bis hin zur statistischen Physik dar. Detaillierte Einführungen zu Linked-Cluster Entwicklungen finden sich unter anderem in den Büchern von Domb und Green [105] sowie Oitmaa et al. [106].

Im Allgemeinen bestehen Linked-Cluster Entwicklungen aus zwei Teilen: Der erste Teil ist der kombinatorische graphentheoretische Aspekt, bei dem die Zerlegung des Gitters in Graphen stattfindet und das Linked-Cluster Theorem ausgenutzt wird.

Der zweite Teil stellt die Analyse des Hamiltonoperators auf den einzelnen Graphen dar. Dabei kann die Analyse unterschiedliche Formen annehmen. In dieser Arbeit sind das die Ableitung effektiver Modelle mittels kontinuierlicher unitärer Transformationen (CUTs) sowie die Bestimmung extensiver Grundzustandseigenschaften, wie der Grundzustandsenergie oder der Untergittermagnetisierung, durch exakte Diagonalisierung (ED). Letztere wird als nichtperturbative oder numerische Linked-Cluster Entwicklung (NLCE) bezeichnet [99–104].

2.1 Graphenentwicklung

2.1.1 Grundlegende Definitionen

In diesem Unterkapitel werden zuerst einige grundlegende Definitionen von Graphen gegeben. Dabei gilt, dass alle Definitionen und Graphen bezüglich der *Kopplungsmenge*

$$T = \{1, 2, \dots, t_{\max}\} \quad (2.1)$$

zu verstehen sind. Diese Kopplungsmenge zählt sämtliche Kopplungen durch, welche vorhanden sein sollen. Der Ursprung dieser Kopplungen geht auf das zugrunde liegende physikalische Gittermodell zurück, welches mit Hilfe der graphenbasierten Methoden untersucht werden soll. Für die Beispiele dieses Kapitels ist die Kopplungsmenge

$$T = \{1, 2, 3\} . \quad (2.2)$$

Weiterhin sind bei der Summe von Operatoren – wie in der Physik üblich – sämtliche Tensorprodukte mit Einheitsoperatoren impliziert, sodass ihre Dimensionen stimmen.

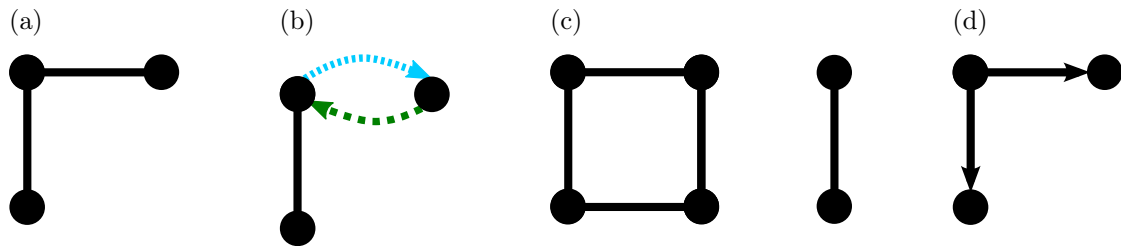


Abbildung 2.1: Einige Beispiele für Graphen: (a) zusammenhängender ungerichteter Graph, (b) zusammenhängender gerichteter Graph mit drei verschiedenen Kopplungstypen, (c) nicht-zusammenhängender ungerichteter Graph, (d) nicht-zusammenhängender gerichteter Graph. Schwarze durchgängige Linien gehören zu Kopplungstyp 1, blaue fein gestrichelte zu Kopplungstyp 2 und grüne grob gestrichelte zu Kopplungstyp 3

Definition 1: Graph

Ein Graph $\mathcal{G} = (V, E)$ ist ein Paar aus einer Menge V von Knoten sowie einer Menge $E \subseteq V \times V \times T$ von gerichteten Verbindungen zwischen diesen Knoten. Das Tupel $(v_1, v_2, t) \in E$ heißt *Verbindung* oder *Kante*. Der Knoten v_1 ist der *Anfangsknoten*, während v_2 als *Endknoten* bezeichnet wird.

Eine Verbindung $(v_1, v_2, t) \in E$ heißt *ungerichtet*, wenn die Verbindung (v_2, v_1, t) ebenfalls in E enthalten ist. Ist dies nicht der Fall, so heißt die Verbindung *gerichtet*. Ein Graph heißt *ungerichtet*, wenn alle Verbindungen ungerichtet sind.

Definition 2: Zusammenhängender Graph

Ein Graph $\mathcal{G} = (V, E)$ heißt *zusammenhängend*, wenn von jedem Knoten $s \in V$ jeder andere Knoten $s' \in V$ über die Verbindungen erreicht werden kann, das heißt es existiert eine Teilmenge $\{(s, i_1, t_1), (i_1, i_2, t_2), \dots, (i_{n-1}, i_n, t_n), (i_n, s', t_{n+1})\}$ von E mit $i_1, \dots, i_n \in V$ und $t_1, \dots, t_{n+1} \in T$.

Typischerweise wird diese formale Definition eines Graphen durch eine grafische Darstellung ersetzt. Abbildung 2.1 zeigt einige Beispiele für Graphen. Die ungerichteten Kopplungen des Graphen werden als „pfeillose“ Linie dargestellt, während gerichtete Kopplungen durch einen Pfeil vom Anfang- zum Endknoten dargestellt werden.

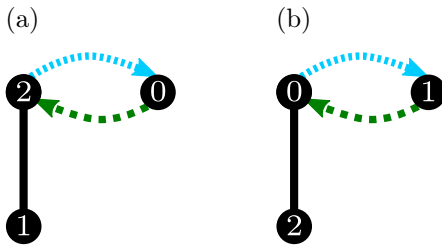


Abbildung 2.2: Zwei verschiedene Beschriftungen für den Graphen aus Abbildung 2.1 (b). Beschriftung (b) ist zugleich die Beschriftung mit der kleinsten Graphzahl.

Definition 3: Beschriftung eines Graphen und beschrifteter Graph

Eine *Beschriftung* $L^{\mathcal{G}}$ eines Graphen $\mathcal{G} = (V, E)$ ist eine bijektive Abbildung

$$L^{\mathcal{G}} : V \rightarrow V_{\mathbb{B}}, \quad (2.3)$$

welche jedem Knoten von \mathcal{G} eindeutig eine natürliche Zahl aus $V_{\mathbb{B}} \subset \mathbb{N}_0$ zuweist.

Die Beschriftung ist nicht eindeutig und es gibt im Allgemeinen viele mögliche Beschriftungen eines Graphen. Ein Graph mit einer Beschriftung wird als *beschrifteter Graph* bezeichnet.

Der Einfachheit halber wird in dieser Arbeit meistens nicht zwischen Graphen und beschriftete Graphen unterschieden, denn für sämtliche praktischen Zwecke ist es sinnvoll, jedem Knoten eines Graphen \mathcal{G} eine Zahl zuzuweisen, um diesen eindeutig zuordnen zu können. Beschriftete Graphen werden deshalb oft einfach als Graph bezeichnet. Dabei ist die Wahl der Beschriftung nicht eindeutig, hat aber auch keinen Einfluss auf die zu berechnenden physikalischen Größen – sie dient nur der vereinfachten Handhabung von Graphen. In Abbildung 2.2 sind zwei mögliche Beschriftungen des Graphen aus Abbildung 2.1 (b) dargestellt.

Definition 4: Adjazenzmatrix

Gegeben sei der Graph $\mathcal{G} = (V, E)$ und eine Beschriftung $L^{\mathcal{G}}$. O.B.d.A. bestehe die Zielmenge V_B der Beschriftung aus den Zahlen $0, \dots, N-1$, wobei N die Anzahl der Knoten von \mathcal{G} ist. Weiterhin gelte für alle $t' \neq t$ die Einschränkung

$$(v_1, v_2, t) \in E \Rightarrow (v_1, v_2, t') \notin E, \quad (2.4)$$

das heißt es existiert maximal eine Verbindung von v_1 nach v_2 .

Dann heißt die Matrix $A^{L^{\mathcal{G}}} = (a_{ij}^{L^{\mathcal{G}}})_{i,j=0}^{N-1}$ mit

$$v_i = (L^{\mathcal{G}})^{-1}(i) \quad (2.5)$$

$$v_j = (L^{\mathcal{G}})^{-1}(j) \quad (2.6)$$

$$a_{ij}^{L^{\mathcal{G}}} = \begin{cases} t, & \text{falls } (v_i, v_j, t) \in E \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.7)$$

Adjazenzmatrix von \mathcal{G} unter der Beschriftung $L^{\mathcal{G}}$.

Die Einschränkung (2.4) ist notwendig, damit die Matrix eindeutig definiert werden kann. Sie kann stets erreicht werden, indem für Graphen, bei denen mehrere Verbindungen von einem Knoten zu einem anderen existieren, diese mehrfachen Verbindungen durch eine einzelne Verbindung mit einem neuen Kopplungstyp ersetzt werden.

Für die beschrifteten Graphen (a) und (b) aus Abbildung 2.2 lauten die Adjazenzmatrizen

$$A_{(a)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

$$A_{(b)} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 3 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Definition 5: Graphzahl

Die Graphzahl $z_L^{\mathcal{G}}$ des Graphen \mathcal{G} unter der Beschriftung $L^{\mathcal{G}}$ ist durch

$$z_L^{\mathcal{G}} := \sum_{i,j=0}^{N-1} a_{ij}^{L^{\mathcal{G}}} \cdot (t_{\max} + 1)^{N \cdot i + j} \quad (2.10)$$

gegeben. Dabei ist N die Gesamtzahl der Knoten von \mathcal{G} .

Für ungerichtete Graphen ist die Adjazenzmatrix symmetrisch, weshalb es theoretisch reichen würde die Graphzahl durch den Teil ober- oder unterhalb der Diagonalen zu definieren. Der Allgemeinheit halber wird hier jedoch die vollständige Definition verwendet.

Definition 6: Kanonische Graphzahl

Zu einem Graphen \mathcal{G} seien alle möglichen Beschriftungen $L^{\mathcal{G}}$ gegeben. Die kleinste Graphzahl

$$z_{\text{kan}}^{\mathcal{G}} := \min_{L^{\mathcal{G}}} z_L^{\mathcal{G}} \quad (2.11)$$

heißt dann *kanonische Graphzahl* des Graphen \mathcal{G} .

Für die beiden Adjazenzmatrizen (2.8) und (2.9) ergeben sich demnach die Graphzahlen

$$\begin{aligned} z_{(a)} &= 0 \cdot 3^0 + 0 \cdot 3^1 + 3 \cdot 3^2 + 0 \cdot 3^3 + 0 \cdot 3^4 + 1 \cdot 3^5 + 2 \cdot 3^6 + 1 \cdot 3^7 + 0 \cdot 3^8 \\ &= 3915 \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} z_{(b)} &= 0 \cdot 3^0 + 2 \cdot 3^1 + 1 \cdot 3^2 + 3 \cdot 3^3 + 0 \cdot 3^4 + 0 \cdot 3^5 + 1 \cdot 3^6 + 0 \cdot 3^7 + 0 \cdot 3^8 \\ &= 825 . \end{aligned} \quad (2.13)$$

Es lässt sich leicht sehen, dass die Graphzahl $z_{(b)}$ die minimale, also die kanonische, Graphzahl des Graphen ist.

Definition 7: Topologische Äquivalenz

Zwei Graphen \mathcal{G}' und \mathcal{G} heißen *topologisch äquivalent*, wenn sie dieselbe kanonische Graphzahl besitzen.

Da unterschiedliche Beschriftungen desselben Graphen lediglich eine Permutation der Knoten darstellen und auf endlichen Graphen mindestens eine Permutation existiert, welche zu einer kleinsten Graphzahl führt, eignet sich die kanonische Graphzahl als eindeutige Kennzeichnung topologisch unterschiedlicher Graphen.

Definition 8: Schnittgraph

Gegeben seien die beiden Graphen $\mathcal{G} = (V, E)$ und $\mathcal{G}' = (V', E')$. Dann heißt der Graph

$$\mathcal{G}_S = \mathcal{G} \cap \mathcal{G}' := (V \cap V', E \cap E') \quad (2.14)$$

Schnittgraph oder *Überlappgraph* von \mathcal{G} und \mathcal{G}' .

Definition 9: Untergraph

Ein Graph $\mathcal{G}' = (V', E')$ heißt *Untergraph* von $\mathcal{G} = (V, E)$, wenn $V' \subset V$ und $E' \subset E$ gilt. Es wird $\mathcal{G}' \subset \mathcal{G}$ geschrieben, wenn \mathcal{G}' ein zusammenhängender Untergraph von \mathcal{G} ist.

Ein Graph \mathcal{G}' heißt *einbettbar* (*Einbettung*) auf (von) \mathcal{G} , wenn er ein Untergraph von \mathcal{G} ist.

Für die Linked-Cluster Entwicklung ist es essentiell, dass Beiträge eines Graphen zu einer physikalischen Größe nicht doppelt gezählt werden. Folglich wird es nötig sein, die Beiträge von Untergraphen abzuziehen.

Definition 10: Reduzierter Beitrag

Die auf dem Graphen \mathcal{G} berechnete Größe P wird mit $P^{\mathcal{G}}$ bezeichnet. Dann wird der *reduzierte Beitrag* $P_{\text{red}}^{\mathcal{G}}$ von $P^{\mathcal{G}}$ über

$$P_{\text{red}}^{\mathcal{G}} := P^{\mathcal{G}} - \sum_{\mathcal{G}' \subset \mathcal{G}} P_{\text{red}}^{\mathcal{G}'} \quad (2.15)$$

mit

$$P_{\text{red}}^{\mathcal{G}} = 0 \text{ für } \mathcal{G} = (\emptyset, \emptyset) \quad (2.16)$$

definiert. Der reduzierte Beitrag wird oft auch als *Gewicht* des Graphen \mathcal{G} bezüglich der Größe P bezeichnet.

Anschaulich werden alle Fluktuationsbeiträge der Untergraphen abgezogen, sodass der reduzierte Beitrag nur die durch den Graphen \mathcal{G} neu hinzugekommenen Fluktuationen enthält. Die auf dem Graphen \mathcal{G} berechnete physikalische Größe $P^{\mathcal{G}}$ kann dabei zum Beispiel die Grundzustandsenergie sein. Bei der Bestimmung von effektiven Modellen treten auch Matrizen oder Operatoren auf.

Definition 11: Clusteradditivität

Gegeben sei eine Größe P und die beiden Graphen $\mathcal{G}_1 = (V_1, E_1)$ und $\mathcal{G}_2 = (V_2, E_2)$. Ferner soll der Schnittgraph

$$\mathcal{G}_1 \cap \mathcal{G}_2 = (\emptyset, \emptyset) \quad (2.17)$$

sein, das heißt \mathcal{G}_1 und \mathcal{G}_2 sind disjunkt.

Mit $P^{\mathcal{G}_1}$ bzw. $P^{\mathcal{G}_2}$ wird die auf \mathcal{G}_1 bzw. \mathcal{G}_2 berechnete Größe P bezeichnet. Weiterhin sei

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_1 \cup \mathcal{G}_2 := (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2) \quad (2.18)$$

der (nicht zusammenhängende) *vereinte* Graph von \mathcal{G}_1 und \mathcal{G}_2 und $P^{\mathcal{G}}$ die auf \mathcal{G} berechnete Größe P . Dann heißt P *clusteradditiv* falls

$$P^{\mathcal{G}} = P^{\mathcal{G}_1} + P^{\mathcal{G}_2} \quad (2.19)$$

gilt.

Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass obige Definition auch für Operatoren gilt, wobei entsprechende Tensorprodukte mit Einheitsmatrizen impliziert sind.

Im Folgenden wird der Begriff des *Gitters* benötigt. Anschaulich ist ein D -dimensionales Gitter \mathcal{L} ein unendlich großer Graph, welcher in D Dimensionen als periodische Struktur dargestellt werden kann.

Definition 12: Einbettungsfaktor

Der *Einbettungsfaktor* $\nu_{\mathcal{L}}^{\mathcal{G}}$ ist die Anzahl an möglichen Einbettungen pro Gitterplatz des Graphen \mathcal{G} auf das unendliche Gitter \mathcal{L} .

Definition 13: Vollständiger Untergraph

Ein Graph $\mathcal{G} \subset \mathcal{G}'$ mit N Knoten heißt *vollständiger Untergraph* von \mathcal{G}' , wenn kein Untergraph $\mathcal{G}'' \subset \mathcal{G}'$ mit N Knoten und der Eigenschaft

$$\mathcal{G} \subset \mathcal{G}'' \tag{2.20}$$

existiert.

Bezüglich eines unendlichen Gitters \mathcal{L} werden vollständige Untergraphen auch einfach als vollständige Graphen oder vollständig bezeichnet. Alternativ wird auch der Begriff „feste“ (von engl. strong) Graphen verwendet [106].

Bezüglich eines Gitters sind bei vollständige Graphen – unter Betrachtung der Einbettung – alle möglichen Gitterkopplungen vorhanden. Es lässt sich leicht sehen, dass Untergraphen bei denen nicht alle Kopplungen vorhanden sind, für die Berechnung einer physikalischen Größe exakt wegfallen, da die Menge aller festen Graphen schnittstabil ist.

2.1.2 Linked-Cluster Theorem

Grundlage für die Nutzbarkeit von Graphenentwicklungen zur Behandlung von Quantensystemen stellt das Linked-Cluster Theorem [99, 102, 105, 106] dar. Es sagt aus, dass sich eine extensive, clusteradditive Größe $P(\mathcal{L})$ eines unendlichen Gitters \mathcal{L} als

$$\frac{P(\mathcal{L})}{N} = \sum_{\mathcal{G}} \nu_{\mathcal{L}}^{\mathcal{G}} P_{\text{red}}^{\mathcal{G}} \tag{2.21}$$

schreiben lässt. Dabei ist N die Anzahl der Gitterplätze, $\nu_{\mathcal{L}}^{\mathcal{G}}$ der sogenannte Einbettungsfaktor des Graphen \mathcal{G} und $P_{\text{red}}^{\mathcal{G}}$ der reduzierte Beitrag, der auf dem Graphen \mathcal{G} bestimmten Größe P . Die Summe läuft dabei über alle topologisch inäquivalenten zusammenhängenden Graphen \mathcal{G} , welche auf das Gitter eingebettet werden können – also Untergraphen von \mathcal{L} sind. Aufgrund der Translationsinvarianz des Gitters reicht es jedoch von einer Einheitszelle aus alle Graphen einzubetten. Dies wird entsprechend durch den Einbettungsfaktor $\nu_{\mathcal{L}}^{\mathcal{G}}$ repräsentiert, welcher die Einbettungen des Graphen \mathcal{G} pro Gitterplatz angibt. Praktisch muss die Summe trunziert werden, wodurch eine gewisse Freiheit für die Summation über

die Graphen besteht. So gibt es verschiedene Trunkierungs- und Summationsschemata, um die Summe in Gleichung (2.21) auszuführen. Wichtig ist, dass das Trunkierungsschema eindeutig eine Trunkierungsordnung (auch Ordnung der Entwicklung genannt) festlegt, sodass die trunkierte Größe von $P(\mathcal{L})$ mit zunehmender Ordnung systematisch gegen $P(\mathcal{L})$ konvergiert. Für das Summationsschema ist zu beachten, dass innerhalb einer Ordnung die Menge G der verwendeten Graphen schnittstabil ist, das heißt der Schnittgraph $\mathcal{G}_S = \mathcal{G} \cap \mathcal{G}'$ zweier Graphen $\mathcal{G}, \mathcal{G}' \in G$ ebenfalls in G enthalten ist.

Die Clusteradditivität der Größe P ist essentiell, damit nur zusammenhängende Graphen betrachtet werden müssen. Denn für nicht zusammenhängende Graphen verschwindet gemäß der Gleichungen (2.15) und (2.19) der reduzierte Beitrag. Die reduzierte Symmetrie – z.B. die fehlende Translationsinvarianz – der Graphen kann jedoch bei der Berechnung von Anregungen problematisch werden, da Fehlfluktuationen zu einem nicht glatten Verhalten physikalischer Größen führen. In diesem Fall ist eine verallgemeinerte Sichtweise auf das Linked-Cluster Theorem und Clusteradditivität für die NLCE nötig, wie in Referenz 104 diskutiert wird.

In dieser Arbeit wird das Linked-Cluster Theorem verwendet, um extensive Grundzustandseigenschaften wie die Grundzustandsenergie oder Untergittermagnetisierung sowie effektive Hamiltonoperatoren für Hubbardmodelle abzuleiten. Solche effektiven Modelle können durch Operatoren oder in einer entsprechenden Matrixdarstellung angegeben werden. Diese können ebenfalls als extensiv angesehen werden, da deren Eigenwerte extensiv sind. Entsprechend ist auch das Linked-Cluster Theorem anwendbar. Die Größe $P(\mathcal{L})$ ist dann allerdings keine Zahl mehr, sondern ein Operator oder eine Matrix.

Die Stärke des Linked-Cluster Theorems wird schnell deutlich, wenn man Systeme mit kurzreichweitigen Korrelationen betrachtet, da dann die reduzierten Beiträge von größer werdenden Graphen immer kleiner werden sollten. Hierdurch ergibt sich ein systematisches Trunkierungsschema für die Summe in (2.21) und die trunkierte Größe sollte gegen den Wert im thermodynamischen Limes konvergieren, sobald immer größere Graphen hinzukommen.

Dabei stellt sich zum einen aber die Frage, was es bedeutet, dass Graphen „größer“ werden. Eine naheliegende Variante ist es, in der Anzahl Gitterplätze, das heißt den Knoten der Graphen, zu trunkieren. Dies muss aber nicht immer die sinnvollste Wahl sein und je nach Gitter und Modell sind andere Trunkierungsvarianten besser geeignet. Auch die Lösungsmethode (siehe Kapitel 2.2) beeinflusst diese Wahl. Sollte zum Beispiel ein störungstheoretischer Lösungsansatz gewählt werden, so ist die Trunkierung derart zu wählen, dass sie mit der Störungsordnung übereinstimmt.

Zum anderen definiert das Linked-Cluster Theorem eine Zerlegung des Gitters in Graphen. Das Gitter muss dabei allerdings nicht immer vollständig in alle möglichen Untergraphen zerlegt werden. So ist es auf dem Quadratgitter zum Beispiel ohne weiteres möglich nur rechteckige Graphen zu berücksichtigen [108, 116–118]. Solange der Schnittgraph zweier Einbettungen ebenfalls in der Graphenmenge enthalten ist, ist die Zerlegung in diese Menge möglich. Auch hier können manche Zerlegungen für das gegebene System vorteilhafter sein als andere. In Kapitel 5 werden verschiedene Zerlegungen und Trunkierungsschemata für Quantenspinmodelle diskutiert.

Üblicherweise wird die Graphengenerierung sowie die Berechnung der reduzierten Beiträge und Einbettungsfaktoren mithilfe von Computerprogrammen durchgeführt. In dem Buch von Oitmaa et al. [106] werden zum Beispiel solche Programme diskutiert. Für diese Arbeit lag der Fokus nicht auf der Optimierung einer vollen Graphenentwicklung, bei der eine möglichst hohe Ordnung in der Anzahl an Gitterplätzen erreicht wird. Einfache Algorithmen, welche die grundlegende Idee des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Computerprogramms wiedergeben, finden sich in Anhang A.

2.2 Lösungsverfahren für einzelne Graphen

Im vorherigen Kapitel wurde erläutert, dass sich eine physikalische Größe im thermodynamischen Limes durch die Berechnung auf zusammenhängenden Graphen bestimmen lässt. Die Grundlage hierfür bildet das Linked-Cluster Theorem. In diesem Kapitel wird nun darauf eingegangen, wie sich die Größe $P^{\mathcal{G}}$ auf einem gegebenen Graphen \mathcal{G} bestimmen lässt. Dafür werden zwei verschiedene Lösungsverfahren vorgestellt: Das erste Verfahren ist die exakte Bestimmung aller Energieeigenwerte des endlichen Systems durch Matrixdiagonalisierung und das Zweite besteht in der Ableitung von effektiven Modellen mittels kontinuierlicher unitärer Transformationen [41–43]. Letztere können sowohl nichtperturbativ als auch perturbativ durchgeführt werden. Für die nichtperturbative Variante wird sich in dieser Arbeit auf die graphenbasierte kontinuierliche unitäre Transformation (gCUT) [103, 104] beschränkt. Die perturbative Variante wird entsprechend als perturbative kontinuierliche unitäre Transformation (pCUT) bezeichnet [112–114].

Wie im vorangegangenen Kapitel bereits erwähnt wurde, eignen sich Linked-Cluster Entwicklungen vor allem für kurzreichweitig korrelierte Systeme. Insbesondere ist die Behandlung von lückenlosen Systemen extrem schwierig. Ein wichtiger Teil dieser Arbeit ist es, die nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen (mit exakter Diagonalisierung) insofern zu erweitern, dass sich langreichweitig geordnete Systeme – insbesondere geordnete lückenlose Systeme – beschreiben lassen. Der durch Referenz 108 inspirierten Idee liegt die Einführung von Randfeldern zugrunde, welche einen Referenzzustand repräsentieren, um den die Entwicklung durchgeführt wird.

Diese Idee wird nun genauer erläutert und im Anschluss wird in Kapitel 2.2.2 auf die kontinuierlichen unitären Transformationen eingegangen. Eine Beschreibung der exakten Diagonalisierung für beliebige Systeme findet sich in Kapitel 3.

2.2.1 Exakte Diagonalisierung mit Randfeldern für geordnete Phasen

Die Inhalte dieses Unterkapitels wurden zum Großteil bereits in Referenz 109 veröffentlicht.

Der ursprüngliche Ansatz [99, 102] für nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklungen besteht darin, den Hamiltonoperator exakt auf den einzelnen Graphen zu diagonalisieren. Je nach Graphenentwicklung ist dann entweder die exakte Diagonalisierung oder die Graphenentwicklung der limitierende Faktor für die Linked-Cluster Entwicklung. Im Falle einer

vollen Graphenentwicklung wächst die Anzahl an Graphen beispielsweise exponentiell mit der Anzahl an Knoten, sodass hier meist die Graphenentwicklung die Entwicklungsordnung definiert. Für eine Entwicklung in rechteckigen Clustern gibt es hingegen nur sehr wenige Graphen und die Einbettungsfaktoren lassen sich analytisch angeben [118], sodass die exakte Diagonalisierung vorgibt, wie viele Knoten betrachtet werden können. In diesem Fall können noch Symmetrien ausgenutzt werden, um den zu betrachtenden Hilbertraum zu reduzieren. Der Lanczos-Algorithmus [119] (siehe Kapitel 3.1) erlaubt weiterhin eine effiziente Bestimmung der niedrigsten Eigenwerte. Dabei ist jedoch die Translationssymmetrie oft die entscheidende Symmetrie, um größere Systeme behandeln zu können, welche auf endlichen Graphen ohne periodische Randbedingungen leider nicht ausgenutzt werden kann. Eine tiefere Beschreibung der exakten Diagonalisierung findet sich in Kapitel 3.

Unabhängig davon wie die exakte Diagonalisierung auf den einzelnen Graphen durchgeführt wird, ergibt sich das Problem, dass die Graphen selbst keine Informationen über die zugrundeliegende Phase des unendlichen Gitters besitzen. Dies kann sowohl bei Systemen mit als auch ohne Energielücke ein Problem darstellen. Während die Lückenlosigkeit üblicherweise zu Divergenzen führt, so liegt das Grundproblem darin, dass einzelne Graphen oder Untermengen von Graphen ein anderes Verhalten, verglichen mit der Physik des kompletten Gitters, aufweisen können. Beispielsweise verhalten sich beim lückenbehafteten Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter die quasi eindimensionalen Kettengraphen anders, da die antiferromagnetische Spin-1 Dreieckskette einen Quantenphasenübergang bei $\lambda < 1$ aufweist [74]. Der Parameter $\lambda \in [0,1]$ interpoliert dabei zwischen den Grenzfällen isolierter Dreiecke und dem isotropen Gitter und da für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter kein Phasenübergang erwartet wird, führt der Übergang der Dreieckskette bei einer Untersuchung des Modells in Abhängigkeit von λ zu einem nichtmonotonen Konvergenzverhalten. Dieses Verhalten wird generisch für Quantenvielteilchensysteme erwartet, insbesondere wenn diese geometrisch frustriert sind, da dort viele verschiedene Phasen miteinander konkurrieren. Es kann dazu führen, dass jede endliche NLCE ein nichtmonotones Verhalten oder sogar Divergenzen aufweist, welche zu einer nicht konvergierenden Entwicklung führen. Generell kann – bzw. sollte – die im folgenden beschriebene Randfeldmethode für geordnete Phasen verwendet werden. Dabei sind lückenlose Systeme im Allgemeinen schwieriger zu behandeln.

Während für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter dieses Problem durch eine reorganisierte Graphenentwicklung behoben werden kann – wie in Referenz 74 und Kapitel 5.2 genauer erläutert wird – so lässt sich dieses Problem für lückenlose Systeme, wie z.B. dem Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadrat- oder Dreiecksgitter, bisher nicht durch ein verbessertes Summationsschema der Graphen lösen. Um dennoch eine NLCE durchführen zu können, soll die NLCE erweitert werden, indem sie die zu berechnende Größe um den zu erwartenden Grundzustand des betrachteten Modells entwickelt. In dieser Arbeit werden zweidimensionale Spinsysteme betrachtet, welche einen langreichweitig geordneten Grundzustand aufweisen. Jeder Graph der NLCE sollte die für ihn spezifischen Fluktuationen zu der untersuchten physikalischen Größe beitragen, wenn er als Teil der geordneten Phase betrachtet wird. Dazu müssen die außerhalb des Graphen liegenden Kopplungen zu der geordneten Phase betrachtet werden. Diese Idee wurde bereits erfolg-

reich für die geordnete Phase des Isingmodells im transversalen Feld auf dem Quadratgitter angewendet [108].

Der Hamiltonoperator sei also in der Form

$$H = H_0 + \lambda V \quad (2.22)$$

schreibbar. Dabei weise H_0 einen symmetriegebrochenen Grundzustand

$$|0\rangle := |0_0\rangle |0_1\rangle \cdots \quad (2.23)$$

auf, welcher ein Produkt von lokalen, auf den einzelnen Gitterplätzen $i = 0, 1, \dots$ definierten, Zuständen $|0_i\rangle$ darstellt. Weiterhin soll der Grundzustand $|0\rangle$ von H_0 adiabatisch zu der, bei endlichen λ liegenden, geordneten Quantenphase von H verknüpft sein. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass der Parameter λ bereits Teil des zu untersuchenden Modells ist, oder künstlich eingeführt werden kann, indem der ursprüngliche Hamiltonoperator entsprechend umgeschrieben wird.

Für die NLCE ist der elementare Baustein aus dem die Graphen bestehen durch den Produktzustand $|0\rangle$ vorgegeben. Im Falle des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Quadratgitter wäre dies ein einzelner Gitterplatz, während das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter eine spontane Trimerisierung von Dreiecken aufweist [69–74] und diese Dreiecke dann als elementares Element für eine Graphenentwicklung verwendet werden. Die Graphen $\mathcal{G} = (V, E)$ werden dann als vom Zustand $|0\rangle$ „umgeben“ betrachtet. Das bedeutet, dass – wenn der Graph als Teil des Gitters angenommen wird – alle Kopplungen zwischen einem Knoten $i \in V$ und einem Gitterplatz ν des Gitters, der nicht zum Graph gehört, als „Randkopplungen“ miteinbezogen werden. Diese Randkopplungen werden als Operator

$$O_{\nu,i}^{\text{rand}} = O_\nu \otimes O_i \quad (2.24)$$

geschrieben. Für das Heisenbergmodell wäre dies zum Beispiel eine Heisenbergkopplung¹⁾

$$O_{\nu,i}^{\text{rand}} = \mathbf{S}_\nu \cdot \mathbf{S}_i . \quad (2.25)$$

Ein Beispiel für die Randkopplungen eines Graphen auf dem Quadratgitter findet sich in Abbildung 2.3.

Während die Kopplungen zwischen den Knoten innerhalb des Graphen ganz normal behandelt werden, so sollten die Randkopplungen keine Auswirkung auf die Gitterplätze außerhalb des Graphen haben, da der Zustand außerhalb des Graphen als statisch betrachtet wird und nur Fluktuationen auf dem Graphen betrachtet werden. Die Randkopplung reduziert sich demnach auf das lokale Randfeld

$$\langle 0_\nu | O_\nu | 0_\nu \rangle O_i , \quad (2.26)$$

¹⁾Das Tensorprodukt \otimes wird – wie für Heisenbergkopplungen üblich – durch einen Multiplikationspunkt ersetzt.

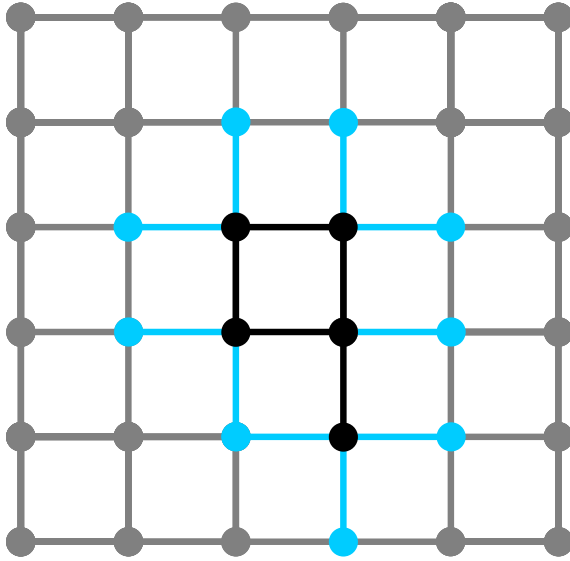


Abbildung 2.3: Beispiel von Randkopplungen (blau) für einen Graphen (schwarz) auf dem Quadratgitter (grau).

welches nur auf Gitterplatz i des Graphen \mathcal{G} wirkt. Dieses Feld sorgt nun dafür, dass die richtige Symmetriebrechung der geordneten Referenzphase dem NLCE-Schema hinzugefügt wird. Die Gesamtstärke der Randfelder skaliert mit dem Umfang des Graphen und ist deshalb für eindimensionale Graphen maximal, während sie für die „zweidimensionalsten“ Graphen minimal ist. Es ist wichtig, dass für die Grundzustandsenergie der Beitrag der Randfelder auf den einzelnen Graphen abgezogen wird und aufgrund des Subtraktions- und Einbettungsverfahrens der Einfluss der Randfelder mit zunehmender Größe der Graphen immer kleiner wird, da der Umfang langsamer als die Knotenanzahl wächst. Eindimensionale Graphen stellen hier eine Ausnahme dar, welche aber gewünscht ist, da der Einfluss von eindimensionalen Graphen auf die Physik des zweidimensionalen Gitters mit zunehmender Graphenlänge sowieso abnehmen sollte. Folglich ist der Beitrag der Randfelder zur Grundzustandsenergie nur subextensiv.

Üblicherweise sind die Graphen in praktischen Rechnungen jedoch nicht groß genug, sodass der Einfluss der Randfelder verschwindet, weshalb es sinnvoll sein könnte einen reellen Parameter $K \geq 0$ einzuführen, mit dem das Randfeld flexibel variiert werden kann:

$$F_i = -K O_i . \quad (2.27)$$

Physikalisch gesehen entspricht ein Parameter $K \neq \langle 0_\nu | O_\nu | 0_\nu \rangle$ einem anderen Produktzustand $|\bar{0}\rangle$. Für $K \rightarrow \infty$ sind die Randfelder so stark, dass keine Fluktuationen auf den Graphen auftreten und das System im Produktzustand $|0\rangle$ von H_0 verbleibt. Im anderen Grenzfall $K \rightarrow 0$ wird die normale NLCE ohne Randfelder, mit den dort vorliegenden Problemen, reproduziert. Es wird $K < \langle 0_\nu | O_\nu | 0_\nu \rangle$ erwartet, da der wahre Grundzustand von H durch Quantenfluktuationen zu – verglichen mit $\langle 0_\nu | O_\nu | 0_\nu \rangle$ – kleineren Werten führt.

In dieser Arbeit werden zwei Arten von geordneten Phasen betrachtet: Die erste Klasse sind langreichweitig magnetisch geordnete Phasen. Der Grundzustand ist dann eine angezogene

(von engl. dressed) Version der assoziierten klassischen Ordnung, welche der Grundzustand von H_0 ist. Sowohl der klassische als auch der quantenmechanische Grundzustand besitzen eine endliche Untergittermagnetisierung als Ordnungsparameter. Es ist deshalb möglich eine Untergitterrotation (siehe z.B. Referenz 120 für das Quadratgitter und Referenz 121 für das Dreiecksgitter) durchzuführen, sodass der klassisch geordnete Zustand ein vollständig in z -Richtung polarisierter Ferromagnet ist. Nach der Untergitterrotation und durch Einschränkung auf Zweispinterme mit antiferromagnetischer Kopplung $J > 0$ (eine Verallgemeinerung ist unproblematisch) folgt der Hamiltonoperator

$$H_{\text{rot}} = -J \sum_{i,j} S_i^z S_j^z + \lambda V . \quad (2.28)$$

Gleichung (2.28) besitzt die gewünschte Form (2.22) mit dem polarisierten Zustand

$$|0\rangle = |\uparrow \cdots \uparrow\rangle \quad (2.29)$$

als Grundzustand von H_0 . Das Randfeld ergibt sich dann aus der Kopplung²⁾

$$O_{\nu,i}^{\text{rand}} = S_{\nu}^z S_i^z \quad (2.30)$$

zu

$$F_i^{\text{mag}} = -K S_i^z . \quad (2.31)$$

Die zweite Klasse von Quantenphasen sind nichtmagnetische Valenzbondkristalle (VBS, von engl. valence bond solid), welche die Translationssymmetrie des Gitters brechen. Häufig ist dies eine Dimerisierung bei der sich zwei Spins zu einem Dimer auf dem Gitter verbinden. Eine Verallgemeinerung hiervon ist die Trimerisierung, welche für das antiferromagnetische Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter eine wichtige Rolle spielt [69–74]. Dabei koppeln drei Spin-1 auf einem Dreieck zu einem Singulett (Trimer), welches dann als elementarer Baustein der Ordnung fungiert. Sowohl für Dimerisierung als auch Trimerisierung ist es möglich einen Parameter λ einzuführen, sodass der Hamiltonoperator H_0 für $\lambda = 0$ einen Grundzustand aus entkoppelten Dimeren bzw. Trimeren besitzt. Für die Graphenentwicklung bietet es sich deshalb an diese Dimere bzw. Trimere als elementaren „Knoten“ zu verwenden.

Im Gegensatz zu den magnetisch geordneten Phasen, ist H_0 vollständig lokal in den Dimeren bzw. Trimeren, sodass für $\lambda = 0$ keine Randkopplungen der Form $O_{\nu} \otimes O_i$ existieren. Es ist deshalb notwendig den Grenzfalle infinitesimal kleiner λ zu betrachten. Die Randkopplungen treten dann in zweiter Ordnung Störungstheorie in λ auf und haben die Form

$$O_{\nu,i}^{\text{rand}} = (|s_{\nu}\rangle \langle s_{\nu}|) \otimes (|s_i\rangle \langle s_i|) . \quad (2.32)$$

Dabei ist $|s_i\rangle \langle s_i|$ der Singulettprojektor auf Dimer oder Trimer i am Rand eines gegebenen Graphen. Für die Randfelder folgt dann analog zu den magnetischen Phasen der Ausdruck

$$F_i^{\text{VBS}} = -K |s_i\rangle \langle s_i| . \quad (2.33)$$

²⁾Es wird nur die z -Komponente berücksichtigt, da S_{ν}^x und S_{ν}^y im Erwartungswert des polarisierten Zustands verschwinden.

Um die Randfelder in der NLCE zu berücksichtigen, müssen die Graphen zusammen mit ihrer Einbettung auf das Gitter betrachtet werden. Dabei wird sich auf vollständige Graphen (siehe Definition 13 und Referenz 106) beschränkt. Durch diese Einschränkung der verwendeten Graphen – es wird nochmal betont, dass dies keine Näherung oder andere Art von Trunkierung ist, sondern exakt die gleiche Entwicklung liefert – sind die Randfelder eines jeden Graphen eindeutig festgelegt, da sämtliche nicht vorhandenen Kopplungen nur zu Gitterplätzen führen, welche außerhalb des Graphen liegen.

Sobald die Randfelder ermittelt wurden, können extensive Grundzustandsgrößen (z.B. Grundzustandsenergie oder -magnetisierung) mit exakter Diagonalisierung bestimmt werden. Beachtet werden muss jedoch, dass die Beiträge der Randfelder von der Grundzustandsenergie abgezogen werden müssen. Im Falle des polarisierten Ferromagneten gestaltet sich die Subtraktion besonders einfach, da dort jedes Randfeld einen Beitrag $-S \cdot K$ liefert, wobei S der Wert des Spins ist.

Eine offene Frage ist jedoch, welches der „beste“ Wert für die Randfeldstärke K ist. Im Unterschied zu Referenz 108 werden in dieser Arbeit zwei verschiedene Möglichkeiten untersucht, um ein optimales K zu ermitteln. Bei der ersten Möglichkeit wird der Ordnungsparameter, z.B. die Untergittermagnetisierung für die magnetisch geordneten Phasen, durch eine selbstkonsistente Rechnung bestimmt, welche als *Fixpunktmethode* bezeichnet wird. Das zweite Verfahren verwendet den K -Wert bei dem die Grundzustandsenergie die kleinste Änderung aufweist und wird als *Minimumsmethode* bezeichnet. Beide Verfahren werden in den folgenden Absätzen genauer beschrieben.

Fixpunktmethode

Es erscheint als physikalisch sinnvoll, dass eine gute Wahl für K in der Größenordnung des echten Ordnungsparameters m_0 der Quantenphase liegt. In der Tat wird sich in Kapitel 5.1 herausstellen, dass ein selbstkonsistent durch die Fixpunktgleichung

$$K = m_0(K) \tag{2.34}$$

bestimmtes K zu sehr guten Resultaten führt. Dieses Verfahren wird nur für die magnetisch geordneten Phasen verwendet und deshalb ist der Ordnungsparameter durch die Untergittermagnetisierung m_0 gegeben.

Der Fixpunkt K von Gleichung (2.34) wird mithilfe des Sekantenverfahrens zur Nullstellenbestimmung [122] für jede NLCE-Ordnung ermittelt. Für eine feste NLCE-Ordnung werden zwei Startwerte K_1 und K_2 gewählt und die Grundzustandsmagnetisierung wird für beide K -Werte, auf allen für die Ordnung benötigten Graphen, bestimmt. Gemäß dem Linked-Cluster Theorem (2.21) werden dann die Werte

$$m_0^{(i)} := m_0(K_i) \tag{2.35}$$

der Grundzustandsmagnetisierung bestimmt. Nun wird das Sekantenverfahren

$$K_{i+1} = K_i - \frac{K_i - K_{i-1}}{m_0^{(i)} - K_i - m_0^{(i-1)} + K_{i-1}} \cdot (m_0^{(i)} - K_i) \tag{2.36}$$

verwendet, um eine verbesserte Wahl K_{i+1} zu erhalten, mit dem die zugehörige Magnetisierung $m_0^{(i+1)}$ berechnet wird. Dieser iterative Prozess wird solange durchgeführt bis $\left|K_{i+1} - m_0^{(i+1)}\right| < 0.0001$ ist.

Minimumsmethode

Da der Einfluss der Randfelder subextensiv ist, sollte die NLCE für jeden Wert von K konvergieren, wenn die Graphen groß genug sind. Dies ist jedoch in der Praxis meist nicht der Fall, weshalb es Sinn ergibt, den K -Wert zu wählen, bei dem die Grundzustandsenergie minimal von K abhängt. Dies entspricht lokalen Extremwerten und ist üblicherweise ein Minimum. Deshalb wird in jeder Ordnung der NLCE die Grundzustandsenergie $e_0(K)$ in Abhängigkeit von K untersucht und das Energieminimum $e_0^{\min}(K_{\min})$ für weitere Extrapolationen verwendet. Angemerkt sei bereits an dieser Stelle, dass es vorkommen kann, dass nicht alle Ordnungen ein Minimum aufweisen. Diese Ordnung wird dann ignoriert und für weitere Extrapolationen nicht beachtet.

2.2.2 Kontinuierliche unitäre Transformationen

Flussgleichung

Kontinuierliche unitäre Transformationen [41–43] erlauben es, einen Hamiltonoperator in eine optimierte Basisdarstellung zu überführen. Um dies zu erreichen, wird der Hamiltonoperator als kontinuierliche Funktion $H(l)$ eines Parameters $l \in \mathbb{R}$ betrachtet. Dabei soll $H(l = 0)$ dem ursprünglichen Hamiltonoperator entsprechen und $H_{\text{eff}} := H(l = \infty)$ soll der Hamiltonoperator in der optimierten Basisdarstellung sein. Unter der unitären Transformation $U(l)$ gilt also für alle $l \in \mathbb{R}$ die Gleichung

$$H(l) = U(l)H(0)U^\dagger(l) . \quad (2.37)$$

Wird nun der antihermitesche Generator $\eta(l) := \eta(H(l))$ von $U(l)$ eingeführt, dann ergibt sich aus (2.37) die Differentialgleichung

$$\frac{dU(l)}{dl} = \eta(l)U(l) . \quad (2.38)$$

Durch Ableiten von Gleichung (2.37) und Einsetzen von (2.38) folgt letztendlich die Flussgleichung

$$\frac{dH(l)}{dl} = [\eta(l), H(l)] . \quad (2.39)$$

Die Flussgleichung führt durch den Kommutator allerdings zu einer unendlichen Hierarchie gekoppelter Differentialgleichungen. Dementsprechend ist es notwendig, eine Trunkierung einzuführen, um diese lösen zu können. Dabei spielt auch die Wahl des verwendeten Generators eine wichtige Rolle.

In den vergangenen Jahrzehnten wurden verschiedene Trunkierungsschemata und Generatoren entwickelt. Im Folgenden werden zwei verbreitete Generatoren vorgestellt, gefolgt von einer kurzen Beschreibung der beiden in dieser Arbeit verwendeten Trunkierungsschemata. Abschließend wird noch ein kurzer Überblick über einige weitere Trunkierungsschemata gegeben.

Generatoren

Der von Wegner [41] vorgeschlagene Generator

$$\eta^{\text{Wegner}}(l) = [H_d(l), H(l)] \quad (2.40)$$

transformiert den ursprünglichen Hamiltonoperator auf die Form von $H_d(l)$. $H_d(l)$ ist dabei der (Block-) Diagonalanteil von $H(l)$ und wird entsprechend der gewünschten Endform von H_{eff} gewählt. Eine grundlegende Eigenschaft dieses Generators ist, dass die quadratische Summe aller Nebendiagonalelemente, das heißt der Elemente, die nicht in $H_d(l)$ enthalten sind, monoton abnimmt. Problematisch ist hierbei jedoch, dass eine energetische Entartung zu einer sehr langsamen Konvergenz der Flussgleichung führt [112, 114].

Ein weiterer sehr verbreiteter Generator ist der Quasiteilchengenerator [112–114, 123]

$$\eta_{ij}^{\text{QP}}(l) = \text{sgn}(q_i - q_j) h_{ij}(l) . \quad (2.41)$$

Die q_i bezeichnen die Anzahl an Quasiteilchen (QP, von engl. quasi particles) im Zustand $|i\rangle$, welcher ein Eigenzustand des Zähloperators Q ist, das heißt es gilt

$$Q |i\rangle = q_i |i\rangle . \quad (2.42)$$

Mit $h_{ij}(l) = \langle i | H(l) | j \rangle$ werden die Matrixelemente von H in der Eigenbasis von Q bezeichnet und

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x = 0 \\ -1 & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (2.43)$$

ist die wie üblich definierte Vorzeichenfunktion.

Zum einen erhält der Quasiteilchengenerator die Blockdiagonalität von H bezüglich der Quasiteilchen und zum anderen kommutieren Q und H_{eff} , sodass H_{eff} blockdiagonal in der Anzahl Quasiteilchen ist [112–114, 123]. Eine Eigenschaft dieses Generators ist, dass er stets die niedrigsten Eigenwerte in den untersten Block „einsortiert“. Folglich liegen nach der unitären Transformation die kleinsten Eigenwerte im Block mit der kleinsten Anzahl an Quasiteilchen. Dies kann insbesondere bei Rechnungen auf endlichen Clustern problematisch sein, wenn diese eine geringere Symmetrie als das Gesamtsystem aufweisen, und erfordert eine Modifikation der Flussgleichung [104].

In dieser Arbeit wird ausschließlich der Quasiteilchengenerator (2.41) verwendet, um effektive Spinmodelle für Hubbardmodelle abzuleiten. Dies wird einerseits mittels nichtperturbativer graphenbasierter kontinuierlicher unitärer Transformationen und andererseits mit einem perturbativen Ansatz durchgeführt. Beide Varianten werden in den folgenden Unterkapiteln beschrieben.

Perturbative kontinuierliche unitäre Transformationen

Dieser Abschnitt soll nur eine kurze Erklärung der Grundidee von perturbativen kontinuierlichen unitären Transformationen [112–114] bieten. Eine ausführliche und gut verständliche Einführung ist unter anderem in der Doktorarbeit von Knetter [114] zu finden. Inhaltlich orientiert sich dieser Abschnitt an den Ausführungen der Referenzen 112, 114 und 124.

Besitzt der Hamiltonoperator die Form

$$H = H_0 + V \quad (2.44)$$

mit einem in der betrachteten Basis diagonalen H_0 und

$$V = \sum_{i=1}^M x_i H_i, \quad (2.45)$$

dann kann V störungstheoretisch behandelt werden. Die x_1, \dots, x_M werden als Stör- oder Entwicklungsparameter bezeichnet.

Als weitere Voraussetzungen muss H_0 ein nach unten beschränktes äquidistantes Spektrum aufweisen und die H_i müssen sich als

$$H_i = \sum_{j=-n}^n T_i^{(j)} \quad (2.46)$$

schreiben lassen, wobei $n \in \mathbb{N}_0$ ist und die $T_i^{(j)}$ genau j Quasiteilchen erzeugen (j positiv) beziehungsweise vernichten (j negativ). Mit dem in Gleichung (2.42) eingeführten Zähloperator für Quasiteilchen gilt entsprechend

$$[Q, T_i^{(j)}] = j T_i^{(j)}. \quad (2.47)$$

Um die Flussgleichung zu lösen, wird der Ansatz

$$H(l) = H_0 + \sum_{k_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{k_M=1}^{\infty} x_1^{k_1} \cdots x_M^{k_M} \sum_{|\underline{m}|=k} F(l, \underline{m}, k) T(\underline{m}, k) \quad (2.48)$$

mit den Definitionen

$$\underline{k} := (k_1, k_2, \dots, k_M) \quad (2.49)$$

$$k := \sum_{i=1}^M k_i \quad (2.50)$$

$$\underline{m} := (m_1, m_2, \dots, m_k) \quad (2.51)$$

$$m_i \in \{0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n\} \quad (2.52)$$

$$|\underline{m}| := k \quad (2.53)$$

$$m := \sum_{i=1}^k m_i \quad (2.54)$$

$$T(\underline{m}, \underline{k}) := T_1^{(m_1)} \cdots T_1^{(m_{k_1})} T_2^{(m_{k_1+1})} \cdots T_2^{(m_{k_1+k_2})} \cdots T_M^{(m_k)} \quad (2.55)$$

verwendet. Die Summe $\sum_{|\underline{m}|=k}$ entspricht einer Summation über alle möglichen k -Tupel aus $\{0, \pm 1, \pm 2, \pm n\}^k$. Der Operator $T(\underline{m}, \underline{k})$ ist ein Produkt aller $T_i^{(j)}$, wobei das Tupel \underline{m} die Werte der j festlegt und es immer genau k_i Operatoren zum Störparameter x_i gibt, sodass die Potenz von x_i und die Anzahl der mit x_i assoziierten Störoperatoren $T_i^{(j)}$ gleich ist. Durch Einsetzen von (2.48) in die Flussgleichung (2.39) und Lösen der Differentialgleichungen folgt zusammen mit der Definition

$$C(\underline{m}, \underline{k}) := \lim_{l \rightarrow \infty} F(l, \underline{m}, \underline{k}) \quad (2.56)$$

der effektive Hamiltonoperator

$$H_{\text{eff}} = H_0 + \sum_{k_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{k_M=1}^{\infty} x_1^{k_1} \cdots x_M^{k_M} \sum_{|\underline{m}|=k, m=0} C(\underline{m}, \underline{k}) T(\underline{m}, \underline{k}). \quad (2.57)$$

Die Einschränkung der Summe auf alle Tupel mit $m = 0$ liefert die gewünschte Blockdiagonalität in der Quasiteilchenanzahl, da $m = 0$ bedeutet, dass $T(\underline{m}, \underline{k})$ als Produkt der $T_i^{(j)}$ effektiv keine Quasiteilchen erzeugt oder vernichtet. Ausführliche Herleitungen von Gleichung (2.57) finden sich in den Referenzen 112, 113 und 114.

Die Trunkierung besteht nun darin, nur Terme mitzunehmen, welche eine bestimmte maximale Störungsordnung k_{max} besitzen. Bis zu dieser Ordnung ist die Rechnung mittels pCUT allerdings exakt, das heißt eine Taylorentwicklung der exakten Lösung der Flussgleichung bis Ordnung k_{max} würde genau die in dieser Ordnung mittels pCUT ermittelte Reihe ergeben.

Die Koeffizienten $C(\underline{m}, \underline{k})$ sind modellunabhängig und brauchen demnach nur einmal berechnet zu werden. In dieser Arbeit wird zum Lösen der Flussgleichungen mittels pCUT ein von Klagges [125] entwickeltes Programm verwendet. Die Koeffizienten sind ebenfalls innerhalb der Arbeitsgruppe vorhanden gewesen.

Um nun die pCUT für ein bestimmtes Modell anzuwenden, müssen nur H_0 definiert und die $T_i^{(j)}$ entsprechend den Gleichungen (2.45) und (2.46) bestimmt werden. Eine Einschränkung auf Modelle, bei denen die $T_i^{(j)}$ aus Termen bestehen, die nur lokal zwei Gitterplätze über eine Verbindung v koppeln, führt zu einem sehr anschaulichen Verständnis (siehe auch Referenz 126): Die $T_i^{(j)}$ können dann nämlich als Summe

$$T_i^{(j)} = \sum_v t_i^{(j)}(v) \quad (2.58)$$

von lokalen Operatoren $t_i^{(j)}(v)$ geschrieben werden. Eine Ordnung der pCUT bedeutet also, dass der Störanteil des Hamiltonoperators auf eine Verbindung des Gitters „wirkt“. Gemäß dem Linked-Cluster Theorem (siehe Kapitel 2.1.2) müssen allerdings nur verbundene Prozesse betrachtet werden, also nur Produkte der $t_i^{(j)}(v)$, welche einen zusammenhängenden Pfad auf dem Gitter bilden. Entsprechend kann die pCUT auf einem genügend großen Cluster, welcher alle möglichen Pfade in der Ordnung beinhaltet, durchgeführt werden. Dies führt in der Praxis allerdings dazu, dass nur sehr niedrige Ordnungen erreicht werden

können, weil der Speicheraufwand für die Berechnung auf einem großen Cluster sehr schnell anwächst. Das Linked-Cluster Theorem erlaubt allerdings auch eine Berechnung auf einzelnen Graphen und deren anschließende kombinatorische Einbettung auf das unendliche Gitter. Dadurch können deutlich höhere Störungsordnungen erreicht werden.

Graphenbasierte kontinuierliche unitäre Transformationen

Bei den graphenbasierten kontinuierlichen unitären Transformationen [103, 104] wird die Flussgleichung (2.39) auf endlichen Clustern, den Graphen, exakt gelöst. Dies ist möglich, da die Basis endlich ist und der Kommutator so durch einfache Matrixmultiplikation ausgewertet werden kann. Gelöst wird die daraus entstehende gekoppelte, nichtlineare Differentialgleichung erster Ordnung dann numerisch mit dem Computer. In dieser Arbeit wurde dazu ein adaptives Runge-Kutta-Verfahren, die Dormand-Price Methode fünfter Ordnung, aus den Numerical Recipes verwendet [122]. Dabei ist zu beachten, dass $H(l)$ mit l gegen $H_{\text{eff}} = H(l = \infty)$ konvergiert, die Lösung also bei einem endlichen l abgebrochen werden kann, sobald eine vorgegebene Genauigkeit erreicht wurde.

Die auf den einzelnen Graphen bestimmten Lösungen werden dann gemäß dem Linked-Cluster Theorem (2.21) in das unendliche System eingebettet, um eine im thermodynamischen Limes gültige Lösung zu erhalten.

Weitere Trunkierungsschemata für kontinuierliche unitäre Transformationen

Es existiert auch eine Erweiterung von pCUT für Modelle mit nicht-äquidistanten Spektren, welche als epCUT (von engl. enhanced pCUT) bezeichnet wird [127]. Der Nachteil ist allerdings, dass die Flussgleichung nicht mehr allgemein gelöst werden kann. Wird der Störungsparameter direkt in die perturbativ aufgestellten Flussgleichungen eingesetzt, so ergibt sich ein stabiles Extrapolationsschema (deepCUT, von engl. directly evaluated epCUT) [127].

Eine andere Möglichkeit ist es, den Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung darzustellen und nur die Operatoren mitzunehmen, welche nicht mehr als eine bestimmte Maximalanzahl an Quasiteilchen erzeugen oder vernichten. Allerdings muss für unendlich große Systeme eine zusätzliche Trunkierung stattfinden. Typischerweise wird sich bei Systemen mit Energielücke und endlicher Korrelationslänge auf lokale Prozesse beschränkt. Dieses Trunkierungsschema ist ebenfalls nichtperturbativ und wird als selbstähnliche kontinuierliche Transformation (sCUT) bezeichnet [128, 129].

Vor kurzem wurde zudem ein auf Tensornetzwerken basierendes Trunkierungsschema vorgestellt, welches als eCUT (von engl. entanglement CUT) bezeichnet wird [130].

2.3 Extrapolationsverfahren

Im Rahmen der Linked-Cluster Entwicklungen ergibt sich für die Größe P eine endliche Reihe der Form

$$\frac{P_n}{N} = \sum_{i=1}^n S_i, \quad (2.59)$$

wobei n der durch das Trunkierungsschema gegebenen maximalen Ordnung entspricht. Die S_i sind die Summe der reduzierten Beiträge aller Graphen, welche genau in Ordnung i beitragen. Wird zum Beispiel in der Anzahl Gitterplätze der Graphen trunziert, dann entspricht S_i der Summe aller reduzierten Beiträge mit i Gitterplätzen.

Wenn die Entwicklung konvergiert, dann sind die S_i eine Nullfolge, was bedeutet, dass die reduzierten Beiträge von größer werdenden Graphen abnehmen. Weiterhin sollte der Grenzwert von P_n gegen den Wert $P(\mathcal{L})$ im thermodynamischen Limes konvergieren:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{P_n}{N} = \frac{P(\mathcal{L})}{N}. \quad (2.60)$$

Um die Konvergenz der Reihe zu verbessern, existieren mehrere Techniken, welche „Konvergenzbeschleunigung“ genannt werden. In dieser Arbeit werden für die nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen der Wynn-Algorithmus [102, 131, 132] sowie verschiedene Skalierungen verwendet, während für die perturbativen Entwicklungen die Padé-Approximation [132, 133] angewendet wird. Es ist erwähnenswert, dass der Wynn-Algorithmus eine Möglichkeit darstellt, bestimmte Padé-Approximationen zu berechnen.

Dieses Kapitel dient dazu, den Wynn-Algorithmus zu erläutern und eine kurze Einführung in die Funktionsweise von Padé-Approximationen zu geben. Für detaillierte Ausführungen sei an dieser Stelle auf die Bücher von Graves-Morris [133] und Guttmann verwiesen [132]. Die verwendeten Skalierungsgesetze für die NLCEs werden genauer in Kapitel 5.1 beschrieben, wo sie auch direkt zur Extrapolation angewendet werden.

Außerdem gibt es noch weitere Algorithmen zur Konvergenzbeschleunigung. Diese sind unter anderem die für alternierende Reihen nützliche Euler-Transformation [122] oder Brezinski's θ Algorithmus [132]. Zusätzlich wurde vor kurzem ein Verfahren entwickelt, mit dem Padé-Extrapolationen für nichtperturbativ bestimmte Reihen durchgeführt werden können, um zum Beispiel kritische Exponenten zu bestimmen [134].

2.3.1 Wynn-Algorithmus

Der Wynn-Algorithmus [102, 131, 132] (auch Wynns Epsilon Methode genannt) lautet

$$P_i^{(-1)} = 0 \quad (2.61)$$

$$P_i^{(0)} = P_i \quad (2.62)$$

$$P_i^{(k)} = P_{i+1}^{(k-2)} + \frac{1}{P_{i+1}^{(k-1)} - P_i^{(k-1)}}. \quad (2.63)$$

Der Parameter i läuft im ersten Schritt $P_i^{(0)}$ von 1 bis n und reduziert sich um 1 in jedem weiteren Schritt. Es lässt sich zeigen, dass die $P_i^{(k)}$ für ungerade k divergieren, während sie für gerade k konvergieren [131, 132]. Letztendlich konvergiert die Folge $P_{n-2l}^{(2l)}$ gegen P . Zwei Iterationen des Algorithmus werden deshalb auch als ein *Zyklus* bezeichnet.

Manchmal werden nicht alle Ordnungen für die Wynn-Extrapolation verwendet. So kann eine Einschränkung auf gerade oder ungerade Ordnungen sinnvoll sein oder es wird die niedrigste Ordnung weggelassen, damit im letzten Schritt die größte Ordnung berücksichtigt wird.

2.3.2 Reihenextrapolation

Um Potenzreihen zu extrapolieren haben sich Padé-Approximationen [132, 133] als ein sehr nützliches Werkzeug herausgestellt. Die Theorie der Padé-Approximationen ist allerdings sehr umfassend, weshalb in diesem Unterkapitel lediglich eine kurze Erläuterung gegeben wird. Dabei orientiert sich dieses Kapitel an den Ausführungen der Referenzen 40, 132 und 134. Eine tiefere Beschreibung der Methode findet sich in Referenz 133.

Gegeben sei eine Potenzreihe

$$F_n(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i, \quad (2.64)$$

wobei $x, a_i \in \mathbb{R}$ sind. Die Funktion $F_n(x)$ wurde zum Beispiel mittels perturbativer Linked-Cluster Entwicklungen ermittelt und soll eine Näherung an die Funktion

$$F(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} F_n(x) \quad (2.65)$$

darstellen.

Die Padé-Extrapolation ist dann durch

$$[L, M]_F := \frac{P_L(x)}{Q_M(x)} = \frac{\sum_{i=0}^L p_i x^i}{\sum_{i=0}^M q_i x^i} \quad (2.66)$$

gegeben, wobei $p_i, q_i \in \mathbb{R}$ die Koeffizienten der beiden Potenzreihen $P_L(x)$ und $Q_M(x)$ darstellen. Die Konvention $q_0 = 1$ und die Bedingung, dass die Taylorentwicklung von $[L, M]_F$ um $x = 0$ bis zum Grad $L + M \leq n$ mit $F_n(x)$ bis Ordnung $L + M$ übereinstimmt, legt die Koeffizienten eindeutig fest. Das dadurch entstehende Gleichungssystem kann dann gelöst werden, um die Koeffizienten p_i und q_i zu bestimmen. Für $L \geq M$ kann auch der Wynn-Algorithmus zur Bestimmung der Koeffizienten verwendet werden. Für praktische Anwendungen bietet es sich allerdings an, die von Computer-Algebra-Systemen wie Maple oder Mathematica bereitgestellten Funktionen zu verwenden.

Besonders nützlich für die Untersuchung von physikalischen Systemen sind die sogenannten dlog-Padé Extrapolationen. Während normale Padé-Extrapolationen in der Nähe von

quantenkritischen Punkten das relevante Verhalten nicht angemessen beschreiben können, erlauben die dlog-Padé Extrapolationen sogar die Bestimmung des kritischen Exponenten.

Angenommen die Funktion $F(x)$ gehorcht in der Nähe eines kritischen Wertes x_c einem Potenzgesetz

$$F(x) = A(x) \left(1 - \frac{x}{x_c}\right)^{-\lambda}, \quad (2.67)$$

wobei $A(x)$ analytisch bei x_c ist. Dann lassen sich die logarithmische Ableitung

$$D(x) := \frac{d}{dx} \ln F(x) = -\frac{\lambda}{x - x_c} (1 + \mathcal{O}(x - x_c)) \quad (2.68)$$

und ihre Padé-Approximationen

$$[L, M]_D = \frac{P_L(x)}{Q_M(x)} \quad (2.69)$$

bilden. Aufgrund der Ableitung gilt jetzt die Beschränkung $L + M \leq n - 1$.

Die dlog-Padé-Approximation $D[L, M]_F$ der Funktion $F(x)$ ist nun durch

$$D[L, M]_F := \exp \left(\int_0^x \frac{P_L(x')}{Q_M(x')} dx' \right) \quad (2.70)$$

gegeben. Im Falle des oben angenommenen Potenzgesetzes (2.67) besitzt $D[L, M]_F$ einen Pol bei $x = x_c$. Der kritische Exponent λ lässt sich dann gemäß

$$\lambda = \left. \frac{P_L(x)}{Q'_M(x)} \right|_{x=x_c} \quad (2.71)$$

ermitteln.

Kapitel 3

Exakte Diagonalisierung

Die Methode der exakten Diagonalisierung (ED) gehört zu den Standardmethoden zur Untersuchung quantenmechanischer Systeme. Die Grundidee ist denkbar einfach und besteht darin, einen endlichen Ausschnitt des Gitters (Cluster) zu betrachten und die Eigenwerte sowie Eigenzustände des Hamiltonoperators auf diesem Teilsystem exakt zu bestimmen. Damit gehört sie zu den nichtperturbativen Methoden. Sie erlaubt es weiterhin auch Erwartungswerte von Observablen in den berechneten Eigenzuständen zu ermitteln.

Ein großer Vorteil dieser Methode ist, dass sie fast immer angewendet werden kann und Ergebnisse liefert, welche frei von systematischen Fehlern sind. Das exponentielle Anwachsen des Hilbertraumes begrenzt jedoch die Maximalgröße der untersuchbaren Systeme. Um dennoch möglichst große Systeme betrachten zu können, wurden im Laufe der letzten Jahrzehnte viele Ideen entwickelt. Den vermutlich größten Einfluss hat dabei die Verwendung des Lanczos-Algorithmus [119], welcher es erlaubt, die Hamiltonmatrix nicht speichern zu müssen, wodurch eine enorme Verringerung des erforderlichen Arbeitsspeichers erfolgt und größere Quantensysteme numerisch behandelt werden können. Es ist weiterhin sinnvoll, die Symmetrien des Systems gezielt auszunutzen, um die Maximalgröße der Systeme weiter zu erhöhen.

Dieses Kapitel soll eine Einführung in die verwendete Methode zur exakten Diagonalisierung sowie ihrer technischen Implementation liefern. Insbesondere wird darauf eingegangen, wie Symmetrien geschickt von Computerprogrammen ausgenutzt werden können, um die Berechnung größerer Systeme zu ermöglichen. Für eine detaillierte Einführung sei auf die Buchkapitel von Weiße und Fehske [90] sowie Läuchli [91] verwiesen. Inhaltlich orientiert sich dieses Kapitel an ersterem Buchkapitel [90] sowie Referenz 135.

3.1 Lanczos-Algorithmus

Der Lanczos-Algorithmus [119] ist ein iterativer Algorithmus, welcher ursprünglich zur Tridiagonalisierung von hermiteschen Matrizen entwickelt wurde. Durch sukzessive Anwendung des Hamiltonoperators H auf einen zufälligen Startzustand $|\phi_0\rangle$, sollen die Eigenwerte des Systems immer besser approximiert werden. Der Algorithmus lässt sich mit $|\phi_{-1}\rangle := 0$

folgendermaßen formulieren [90]:

$$\begin{aligned}
 |\phi'\rangle &= H |\phi_n\rangle - \beta_n |\phi_n\rangle \\
 \alpha_n &= \langle \phi_n | \phi' \rangle \\
 |\phi''\rangle &= |\phi'\rangle - \alpha_n |\phi_n\rangle \\
 \beta_{n+1} &= \sqrt{\langle \phi'' | \phi'' \rangle} \\
 |\phi_{n+1}\rangle &= \frac{1}{\beta_{n+1}} |\phi''\rangle .
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Werden insgesamt M Iterationen durchgeführt, dann ergibt sich aus den Koeffizienten α_n und β_n die Tridiagonalmatrix

$$H_{\text{tri}} = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & 0 & 0 \\ \vdots & \cdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \beta_{M-2} & \alpha_{M-2} & \beta_{M-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \beta_{M-1} & \alpha_{M-1} \end{pmatrix} . \tag{3.2}$$

Die Eigenwerte von H_{tri} konvergieren gegen die Eigenwerte von H , wobei die kleinsten und größten Eigenwerte am schnellsten konvergieren. Für die Bestimmung der Grundzustandsenergie ist der Lanczos-Algorithmus also besonders gut geeignet.

Mit dem Lanczos-Algorithmus kann weiterhin auch der Grundzustand bestimmt werden. Dazu wird der normierte Eigenvektor $\mathbf{v} = (v_0, \dots, v_{M-1})$ zum kleinsten Eigenwert von H_{tri} verwendet, um den echten Grundzustand von H durch die Superposition

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{M-1} v_i |\phi_i\rangle \tag{3.3}$$

anzunähern. Der Zustand $|\psi\rangle$ konvergiert – analog zu den Eigenwerten – mit größer werdendem M gegen den tatsächlichen Grundzustand von H , allerdings nicht so schnell wie die Eigenwerte, das heißt es werden deutlich mehr Iterationen benötigt um eine ähnliche Genauigkeit zu erreichen.

Da für die Berechnung von $|\psi\rangle$ alle Zustände $|\phi_0\rangle$ bis $|\phi_{M-1}\rangle$ benötigt werden, muss der Lanczos-Algorithmus ein weiteres Mal durchgeführt werden, sobald \mathbf{v} bekannt ist. Das Speichern aller $|\phi_i\rangle$ ist nicht zweckmäßig, da dadurch deutlich mehr Speicher benötigt wird.

Mithilfe von $|\psi\rangle$ können dann auch Grundzustandserwartungswerte, wie zum Beispiel Spinstrukturfaktoren oder Untergittermagnetisierungen, berechnet werden.

3.2 Darstellung von Zuständen

Der große Vorteil des Lanczos-Algorithmus liegt darin, dass nur die Wirkung des Hamiltonoperators auf die Zustände bekannt sein muss und deshalb nicht die gesamte Hamiltonmatrix gespeichert wird. Dazu müssen die Zustände allerdings gespeichert werden. Eine

Möglichkeit, die sich als sehr sinnvoll erwiesen hat, ist es, die Zustände als Ganzzahl zu kodieren. Am einfachsten lässt sich dieses für Spin-1/2 Systeme verstehen. Für ein System aus N Spins bilden die Zustände

$$|s_1^z, s_2^z, \dots, s_N^z\rangle \quad (3.4)$$

eine vollständige Basis des Hilbertraums. Die s_i^z geben dabei an, welche magnetische Quantenzahl der i -te Spin in diesem Zustand aufweist. Im Falle von Spin-1/2 Systemen kann diese nur die Werte $s_i^z = \pm 1/2$ annehmen. Das ist optimal für den Computer, da jener den Zustand (3.4) durch die Identifizierung

$$0 \hat{=} -\frac{1}{2} \hat{=} \downarrow \quad (3.5)$$

$$1 \hat{=} \frac{1}{2} \hat{=} \uparrow \quad (3.6)$$

einfach als Binärzahl speichern kann. Folglich kann jeder Spin-1/2 Zustand durch die ersten N Bits einer Ganzzahl eindeutig dargestellt werden. So würde die Ganzzahl 6 bei einem System mit vier Spins die Binärdarstellung 0110 besitzen, welche dem Spinzustand $|\downarrow, \uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle$ entspricht.

Für Systeme mit mehr als zwei lokalen Zuständen, wie zum Beispiel Hubbardsysteme oder Modelle mit höherzahligem Spin, benötigt jeder lokale Zustand mehr als ein Bit. Für Spin-1 Systeme kann zum Beispiel folgende Identifizierung gemacht werden:

$$00 \hat{=} -1 \quad (3.7)$$

$$01 \hat{=} 0 \quad (3.8)$$

$$10 \hat{=} 1 . \quad (3.9)$$

In diesem Kapitel wird mit $|I\rangle_{\text{B}}$ ein Basiszustand bezeichnet, wobei I die Ganzzahl ist, dessen Binärdarstellung dem Spinzustand entspricht. Überlagerungszustände werden mit $|\psi\rangle$ bezeichnet.

Sobald die lokalen Zustände definiert worden sind und ein Zustand aus N Spins durch eine Ganzzahl eindeutig festgelegt ist, können die Operatoren effizient durch bitweise Operationen implementiert werden. Ein Spinflip-Operator, angewandt auf den Zustand $|I\rangle_{\text{B}}$, der einen Spin-1/2 an Stelle k flippen soll, würde zum Beispiel der bitweisen XOR-Operation

$$I \text{ XOR } (1 \ll k) \quad (3.10)$$

entsprechen. Dabei bedeutet $1 \ll k$, dass jedes Bit der Zahl 1 um k Stellen nach links verschoben, also mit 2^k multipliziert wird.

Die Speicherung aller Zustände ist nun sehr einfach: Die Zustände – diese sind Überlagerungen der S^z -Zustände – können in einem Vektor \mathbf{v} gespeichert werden. Dieser Vektor hat die Länge $N_{\mathcal{H}}$ des Hilbertraumes und repräsentiert den Zustand

$$|\psi(\mathbf{v})\rangle = \sum_{i=0}^{N_{\mathcal{H}}-1} v_i |i\rangle_{\text{B}} . \quad (3.11)$$

Der Vorfaktor vor dem Zustand $|i\rangle_{\text{B}}$ ist die i -te Komponente v_i von \mathbf{v} .

Dieses Verfahren funktioniert im Grunde immer, auch wenn einige Zustände $|i\rangle_{\text{B}}$ einen Vorfaktor $v_i = 0$ aufweisen, weil sie z.B. aufgrund von Symmetrien nicht auftreten. Der Zweck von Symmetrien ist es jedoch, die Größe des zu betrachtenden Hilbertraumes zu reduzieren und dementsprechend nur Vektoren mit einer Größe $N_{\mathcal{H}_{\text{sym}}} < N_{\mathcal{H}}$ zu speichern. Dann entspricht der Index des Vektors \mathbf{v} jedoch nicht mehr der Ganzzahl, dessen Binärdarstellung den Zustand repräsentiert. Es wird also eine bijektive Abbildung

$$I : \{0, 1, \dots, N_{\mathcal{H}_{\text{sym}}} - 1\} \rightarrow \mathcal{I} \quad (3.12)$$

$$i \mapsto I(i), \quad (3.13)$$

mit \mathcal{I} als Menge aller auftretenden Ganzzahlen, benötigt, welche zu jedem Index $i \in I$ die entsprechende Ganzzahl $I(i) \in \mathcal{I}$ des Zustands liefert. Diese Abbildung ist sehr einfach zu implementieren, da nur ein weiterer Vektor \mathbf{I} gespeichert werden muss, dessen Komponenten $I_i = I(i)$ genau die Ganzzahldarstellung des mit dem Index i assoziierten Zustands sind.

Das Hauptproblem ist jedoch die Umkehrung: Den Index $i(I)$ zu einem gegebenen Zustand $|I\rangle_{\text{B}}$ *schnell und speichereffizient* zu finden ist ein hochgradig nichttriviales Problem. Während eine lineare Suche in \mathbf{I} oder eine Hashmap zwar wenig Speicher erfordern, dafür aber sehr langsam sind, so ist der naive Ansatz, einen weiteren Vektor zu speichern, welcher jedem Zustand einen Index zuordnet, zwar überaus schnell, benötigt jedoch sehr viel Arbeitsspeicher, da dieser Vektor die Größe $N_{\mathcal{H}}$ des gesamten Hilbertraumes aufweist.

In dem nächsten Unterkapitel wird deshalb erklärt, wie einige Symmetrien ausgenutzt werden können und es werden mehrere Verfahren vorgestellt, um den Index zu einem Zustand auf möglichst effiziente Weise zu finden.

3.3 Symmetrien

Wie bereits erwähnt, ist die Ausnutzung von Symmetrien essentiell, um möglichst große Quantensysteme mit ED behandeln zu können. Im Rahmen dieser Arbeit werden die S^z -Symmetrie, Translationssymmetrie und Spin-Flip Symmetrie ausgenutzt. Die folgenden Unterkapitel erklären die technischen Details zur Ausnutzung dieser Symmetrien.

3.3.1 S^z -Symmetrie

Die Ausnutzung der S^z -Symmetrie gestaltet sich als sehr einfach: Da die Spinzustände in der S^z -Basis kodiert sind, müssen einfach nur die Zustände berücksichtigt werden, deren gesamtes S^z_{ges} dem gewünschten S^z entspricht.

Wird nur die S^z -Symmetrie und keine Translationssymmetrie ausgenutzt, kann ein sehr effizientes, von Lin [136] vorgeschlagenes, Verfahren implementiert werden, um zu einem Zustand $|I\rangle_{\text{B}}$ den gesuchten Index $i(I)$ zu finden. Es wird in dieser Arbeit als Lin-Tabellen

bezeichnet. Für die Erklärung der Funktionsweise von Lin-Tabellen wird sich im Folgenden auf Spin-1/2 beschränkt. Die Erweiterung auf beliebige Spins ist jedoch offensichtlich.

Zuerst wird jedoch ein kleines Zahlenbeispiel gegeben, wieso Lin-Tabellen einen Vorteil gegenüber dem naiven Ansatz bieten. Ein aus 32 Spin-1/2 bestehendes System benötigt einen Vektor der Größe $2^{32} = 4295000000 \hat{=} 16$ GB, um zu einem Zustand den entsprechenden Index zu finden. Lin-Tabellen basieren auf der Idee, dass ein halb so großes System, also 16 Spins, nur einen Vektor der Größe $2^{16} = 65536 \hat{=} 256$ kB benötigt. Dies ist ein Unterschied von fünf Größenordnungen im Speicherbedarf.

Der Index des Gesamtsystems soll aus zwei Vektoren ermittelt werden, welche die Größe eines halb so großen Systems aufweisen. Dies funktioniert folgendermaßen: Der Index i eines Zustands $|I\rangle_B$ soll als

$$i(I) = i_a(I_a) + i_b(I_b) \tag{3.14}$$

ermittelt werden, indem die ersten $N/2$ Bits von I die Ganzzahl I_a bilden und die restlichen $N/2$ Bits die Ganzzahl I_b bilden. Es gilt also

$$I = \sum_{j=0}^{N-1} c_j \cdot 2^j \tag{3.15}$$

$$I_a = \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-1} c_j \cdot 2^j \tag{3.16}$$

$$I_b = \sum_{j=\frac{N}{2}}^{N-1} c_j \cdot 2^{j-\frac{N}{2}} . \tag{3.17}$$

Für die Teilsysteme a und b werden dann Vektoren \mathbf{i}_a und \mathbf{i}_b der Größe $2^{\frac{N}{2}}$ gespeichert, die jeder Ganzzahl I_a bzw. I_b einen Index $i_a(I_a)$ bzw. $i_b(I_b)$ zuordnen. Zusätzlich wird noch die Abbildung (3.13) in dem Vektor \mathbf{I} gespeichert, welche dem Index i die Ganzzahl

$$I(i) = I_a + I_b \cdot 2^{\frac{N}{2}} \tag{3.18}$$

zuweist.

Zustand a	I_a	$i_a(I_a)$	Zustand b	I_b	$i_b(I_b)$	$i = i_a + i_b$
00	0	0	11	3	0	0
01	1	1	01	1	0	1
01	1	1	10	2	1	2
10	2	3	01	1	0	3
10	2	3	10	2	1	4
11	3	5	00	0	0	5

Tabelle 3.1: Darstellung der Lin-Tabellen für ein System aus vier Spin-1/2 mit $S_{\text{ges}}^z = 0$.

Die beiden Vektoren werden mit folgendem Algorithmus generiert:

```

1:  $J \leftarrow 0$ 
2: for  $I_a \leftarrow 0, \dots, 2^{\frac{N}{2}} - 1$  do
3:    $J_a \leftarrow i$ 
4:    $J_b \leftarrow 0$ 
5:   for  $I_b \leftarrow 0, \dots, 2^{\frac{N}{2}} - 1$  do
6:     if  $S_a^z + S_b^z = S_{\text{ges}}^z$  then
7:        $i_a(I_a) \leftarrow J_a$ 
8:        $i_b(I_b) \leftarrow J_b$ 
9:        $I(J_a + J_b) \leftarrow I_a + I_b \cdot 2^{\frac{N}{2}}$ 
10:       $J_b \leftarrow J_b + 1$ 
11:       $J \leftarrow J + 1$ 
12:     end if
13:   end for
14: end for .

```

In Tabelle 3.1 findet sich eine tabellarische Darstellung des Algorithmus für ein System aus vier Spin-1/2 mit $S_{\text{ges}}^z = 0$. Die drei Vektoren \mathbf{I} , \mathbf{i}_a und \mathbf{i}_b sind am Ende des Algorithmus durch

$$\mathbf{I} = (1100_2, 0101_2, 1001_2, 0110_2, 1010_2, 0011_2)^T = (12, 5, 9, 6, 10, 3)^T \quad (3.19)$$

$$\mathbf{i}_a = (0, 1, 3, 5)^T \quad (3.20)$$

$$\mathbf{i}_b = (0, 0, 1, 0)^T \quad (3.21)$$

gegeben.

Diese Methode funktioniert leider nicht, wenn die Translationssymmetrie ausgenutzt wird. Lin hat deshalb ein Verfahren vorgeschlagen, welches als Untergitterkodierung (engl. sublattice coding) bezeichnet wird [136]. Die tatsächliche Implementation von diesem Verfahren ist in Referenz 136 jedoch nicht ausführlich erklärt. Die beiden folgenden Kapitel erklären die Grundlagen für die Ausnutzung der Translationssymmetrie in periodischen Systemen und eine an Referenz 135 angelehnte Herangehensweise die Untergitterkodierung zu implementieren.

3.3.2 Translationssymmetrie

In dieser Arbeit wird die Translationssymmetrie nur für periodische zweidimensionale Systeme mit einelementiger Einheitszelle ausgenutzt. Folglich beziehen sich sämtliche Erläuterungen in diesem Kapitel auf zwei Dimensionen, wobei eindimensionale Systeme als Grenzfall mit inbegriffen sind und die Erweiterung auf Systeme mit mehr als zwei Dimensionen sich als unkompliziert erweist.

Gegeben sei also ein zweidimensionaler periodischer Cluster mit $N = x_{\text{max}} \cdot y_{\text{max}}$ Gitterplätzen, welcher durch die beiden linear unabhängigen Vektoren \mathbf{v}_x und \mathbf{v}_y aufgespannt

wird. Der Ort \mathbf{R}_i eines jeden Gitterplatzes wird dabei gemäß

$$\mathbf{R}_i = x_i \cdot \mathbf{v}_x + y_i \cdot \mathbf{v}_y \quad x_i \in \{0, 1, \dots, x_{\max} - 1\}, \quad y_i \in \{0, 1, \dots, y_{\max} - 1\} \quad (3.22)$$

eindeutig durch das Tupel (x_i, y_i) festgelegt. Der Cluster besitze also insgesamt x_{\max} Gitterplätze in die durch \mathbf{v}_x definierte x -Richtung sowie y_{\max} Gitterplätze in die durch \mathbf{v}_y definierte y -Richtung. Jeder Gitterplatz kann also entweder durch das Paar (x_i, y_i) oder den Index i gekennzeichnet werden.

Ein Zustand $|\psi\rangle$ auf diesem Cluster kann, wie in Kapitel 3.2 beschrieben, als Überlagerung der Basiszustände $|I\rangle_B$ geschrieben werden. Weiterhin seien die Translationsoperatoren T_x und T_y durch ihre Wirkung auf die Basiszustände definiert, indem sie die Gitterplätze entlang der Basisvektoren \mathbf{v}_x und \mathbf{v}_y auf dem Gitter verschieben:

$$T_x |I\rangle_B = T_x |\dots, s_{(x_i, y_i)}^z, \dots\rangle = |\dots, s_{((x_i+1) \bmod x_{\max}, y_i)}^z, \dots\rangle \quad (3.23)$$

$$T_y |I\rangle_B = T_y |\dots, s_{(x_i, y_i)}^z, \dots\rangle = |\dots, s_{(x_i, (y_i+1) \bmod y_{\max})}^z, \dots\rangle . \quad (3.24)$$

Sie induzieren also die Abbildungen

$$\tilde{T}_x : (x, y) \mapsto ((x + 1) \bmod x_{\max}, y) \quad (3.25)$$

$$\tilde{T}_y : (x, y) \mapsto (x, (y + 1) \bmod y_{\max}) , \quad (3.26)$$

welche jeden Gitterplatz auf einen anderen Gitterplatz abbilden.

Die Periodizität des Clusters bedeutet nun, dass die Translationsoperatoren T_x in x -Richtung und T_y in y -Richtung den Hamiltonoperator invariant lassen. Es gilt also

$$[T_x, T_y] = 0 \quad (3.27)$$

$$[T_x, H] = 0 \quad (3.28)$$

$$[T_y, H] = 0 . \quad (3.29)$$

Mit diesen Überlegungen lässt sich leicht sehen, dass der Projektor

$$P_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{j_x=0}^{x_{\max}-1} \sum_{j_y=0}^{y_{\max}-1} \exp\left(2\pi i \left(\frac{j_x \cdot k_x}{x_{\max}} + \frac{j_y \cdot k_y}{y_{\max}}\right)\right) T_x^{j_x} T_y^{j_y} \quad (3.30)$$

mit $\mathbf{k} := (k_x, k_y)^T$ und $k_x \in \{0, 1, \dots, x_{\max} - 1\}$, $k_y \in \{0, 1, \dots, y_{\max} - 1\}$, angewendet auf einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$, einen Eigenzustand von T_x und T_y erzeugt:

$$T_x P_{\mathbf{k}} |\psi\rangle = e^{-2\pi i \frac{k_x}{x_{\max}}} P_{\mathbf{k}} |\psi\rangle \quad (3.31)$$

$$T_y P_{\mathbf{k}} |\psi\rangle = e^{-2\pi i \frac{k_y}{y_{\max}}} P_{\mathbf{k}} |\psi\rangle . \quad (3.32)$$

Mit B wird nun die Menge aller Basiszustände $|I\rangle_B$ des Hilbertraums \mathcal{H} bezeichnet. Einige dieser Zustände sind über Translationen miteinander verknüpft:

$$|I'\rangle_B = e^{i\varphi} T_x^{j_x} T_y^{j_y} |I\rangle_B . \quad (3.33)$$

Das bedeutet, dass ein Zustand $|I'\rangle_B$ bis auf eine globale Phase $\varphi \in \mathbb{R}$ durch Translation aus dem Zustand $|I\rangle_B$ erhalten werden kann. Die Menge O_R aller Zustände, welche aus einem dieser Zustände $|R\rangle_B$ erhalten werden können, ist also durch

$$O_R := \left\{ |I\rangle_B \in B \mid \exists j_x, j_y \in \mathbb{N}_0, \varphi \in \mathbb{R} : e^{i\varphi} T_x^{j_x} T_y^{j_y} |R\rangle_B = |I\rangle_B \right\} \quad (3.34)$$

definiert. Eine äquivalente Definition ist es O_R als die Menge aller Zustände, welche geschlossen unter der Translationsgruppe sind, zu definieren. Der Zustand $|R\rangle_B$ wird *Repräsentant* genannt. Die Wahl dieses Repräsentanten ist offensichtlich nicht eindeutig, da jeder Zustand aus O_R ein Repräsentant sein könnte. Der Repräsentant muss daher in irgendeiner Weise festgelegt werden. Eine oft verwendete Konvention ist, dass aus allen Zustände $|I\rangle_B \in O_R$ derjenige als Repräsentant gewählt wird, der die kleinste Ganzzahldarstellung I besitzt. Die Menge O_R wird auch als *Orbit* der Zustände $|I\rangle_B \in O_R$ bezeichnet.

Alle Zustände $|I\rangle_B \in O_R$ besitzen nun die Eigenschaft, dass $P_{\mathbf{k}} |I\rangle_B$ denselben – bis auf eine globale Phase – translationsinvarianten Zustand liefert. Folglich sind sämtliche translationsinvarianten Zustände durch

$$|R_{\mathbf{k}}\rangle := \frac{P_{\mathbf{k}} |R\rangle_B}{\sqrt{{}_B\langle R | P_{\mathbf{k}} | R \rangle_B}} \quad (3.35)$$

definiert. Theoretisch müssten jetzt die Superpositionen, durch die die $|R_{\mathbf{k}}\rangle$ aus den Basiszuständen hervorgehen, gespeichert werden. Es wird sich jedoch herausstellen, dass es ausreicht für jeden Zustand den Repräsentanten zu ermitteln und die Norm $\sqrt{{}_B\langle R | P_{\mathbf{k}} | R \rangle_B}$ für diesen zu speichern. Das folgt aus der Eigenschaft

$$\langle R'_{\mathbf{k}} | H | R_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{{}_B\langle R' | P_{\mathbf{k}} H P_{\mathbf{k}} | R \rangle_B}{\sqrt{{}_B\langle R' | P_{\mathbf{k}} | R' \rangle_B} \sqrt{{}_B\langle R | P_{\mathbf{k}} | R \rangle_B}} = \frac{{}_B\langle R' | P_{\mathbf{k}} H | R \rangle_B}{\sqrt{{}_B\langle R' | P_{\mathbf{k}} | R' \rangle_B} \sqrt{{}_B\langle R | P_{\mathbf{k}} | R \rangle_B}}, \quad (3.36)$$

welche sich direkt aus den Gleichungen (3.28), (3.29) und der Projekteigenschaft von $P_{\mathbf{k}}$ ergibt.

Gleichung (3.36) sagt aus, dass der Hamiltonoperator H direkt auf einen Basiszustand angewendet werden kann und es ausreicht anschließend den Projektionsoperator anzuwenden. Im Allgemeinen ist der Zustand

$$|\psi\rangle = H |R\rangle_B \quad (3.37)$$

kein Repräsentant mehr, sondern eine Superposition

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{N_{\mathcal{H}}-1} c_i \cdot |I(i)\rangle_B \quad (3.38)$$

beliebiger Basiszustände. Durch Anwendung von $P_{\mathbf{k}}$ auf diese Superposition wird jeder Zustand $|I(i)\rangle_B$ symmetrisiert. Innerhalb dieser symmetrisierten Zustände existiert auch der Repräsentant von $|I(i)\rangle_B$. Dieser hat den Vorfaktor c_i sowie eine Phase

$$\theta = \exp \left(2\pi i \left(\frac{j_x \cdot k_x}{x_{\max}} + \frac{j_y \cdot k_y}{y_{\max}} \right) \right). \quad (3.39)$$

Da als nächstes das Skalarprodukt mit dem Repräsentanten $|R'\rangle_{\text{B}}$ gebildet wird, fallen alle Nicht-Repräsentanten weg. Wenn also die Phase θ – oder j_x und j_y – die den Zustand $|I(i)\rangle$ mit seinem Repräsentanten verbindet, bekannt ist, reicht es den Gesamtzustand des Systems durch einen Vektor zu beschreiben, welcher die Vorfaktoren vor den Repräsentanten enthält. Diese Eigenschaft führt zu einem enormen Geschwindigkeits- und Speichergewinn und ermöglicht die effiziente Berechnung von Quantensystemen. Angemerkt sei an dieser Stelle, dass die Hamiltonmatrix des Systems in Blöcke mit festem Impuls \mathbf{k} zerfällt. Diese können aufgrund der Phase nun komplexwertig sein. Weiterhin führt die Ausnutzung dieser Symmetrie auch zu einer erhöhten Stabilität des Lanczos-Algorithmus, da energetische Entartungen reduziert werden.

3.3.3 Untergitterkodierung

Die Untergitterkodierung [135, 136] erweitert die Idee der Lin-Tabellen (siehe Kapitel 3.3.1), sodass auch bei Ausnutzung der Translationssymmetrie der Index i_R des Repräsentanten $|R\rangle_{\text{B}}$ zu einem Zustand $|I\rangle_{\text{B}}$ effizient ermittelt werden kann. Eine verständliche und ausführliche Beschreibung findet sich in Referenz 135. Dieses Kapitel erklärt die Grundlagen des Verfahrens und erweitert die Notation auf zweidimensionale Systeme.

Das Verfahren wird in dieser Arbeit für Systeme mit einelementiger Einheitszelle vorgestellt. Verallgemeinerungen auf beliebige L -elementige Einheitszellen sind ebenfalls möglich, wobei die Ausnutzung der Translationssymmetrie für Systeme mit kleineren Einheitszellen einen deutlich größeren Einfluss hat. Zusätzlich wird sich in dieser Arbeit auf Systeme mit einer geraden Anzahl an Gitterplätzen beschränkt. Das Verfahren der Untergitterkodierung kann jedoch auch für eine ungerade Anzahl an Gitterplätzen verwendet werden [135].

Gegeben sei nun ein Cluster mit einelementiger Einheitszelle und gerader Anzahl an Gitterplätzen in x -Richtung. Es werden dann zwei Teilsysteme a und b definiert, sodass die Gitterplätze entlang der x -Richtung abwechselnd zu Teilsystem a und b gehören. Als Beispiel soll hier der in Abbildung 3.1 dargestellte Cluster mit 18 Gitterplätzen eines Dreiecksgitters dienen: Die schwarzen Gitterplätze gehören zu Teilsystem a , während die blauen Gitterplätze zu Teilsystem b gehören. Die in Abbildung 3.1 angegebene Nummerierung ist gerade so gewählt, dass die ersten $M = 9$ Bits zum Teilsystem a und die letzten 9 Bits zum Teilsystem b gehören.

Die Ganzzahl I , die den Zustand $|I\rangle_{\text{B}}$ des Gesamtsystems beschreibt, lässt sich nun – wie bei den Lin-Tabellen – durch die Ganzzahlen I_a und I_b der beiden Teilsysteme darstellen:

$$I = I_a + I_b \cdot 2^M . \quad (3.40)$$

Für den Zustand wird dann, der Notation aus Referenz 135 folgend,

$$|I\rangle_{\text{B}} := |I_a\rangle_{\text{B}} \otimes |I_b\rangle_{\text{B}} \quad (3.41)$$

geschrieben. Die Zustände $|I_a\rangle_{\text{B}}$ und $|I_b\rangle_{\text{B}}$ stammen jetzt aus einem Hilbertraum, welcher deutlich kleiner ist als der Hilbertraum des Gesamtsystems. Essentiell bei der Aufteilung

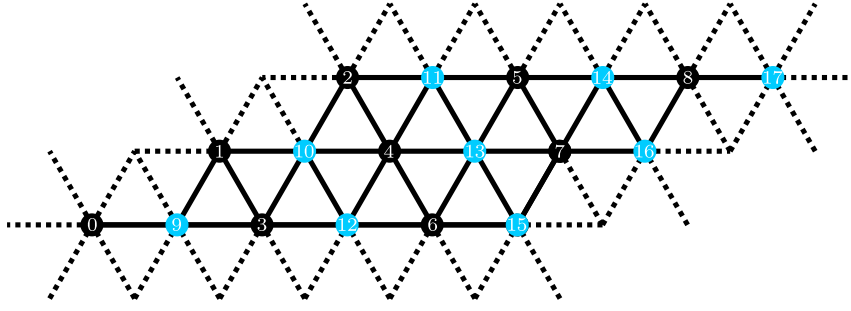


Abbildung 3.1: Ein periodischer Cluster mit 18 Gitterplätzen auf dem Dreiecksgitter. Gestrichelte Linien deuten periodische Kopplungen an. Schwarze Kreise gehören zu Teilsystem a , während blaue Kreise zu Teilsystem b gehören.

des Gitters in die Teilsysteme a und b ist, dass beide Teilsysteme die gleiche Translationsgruppe besitzen. Der Translationsoperator in y -Richtung wirkt nur auf die einzelnen Teilsysteme, während der Translationsoperator in x -Richtung die beiden Teilsysteme tauscht. Dadurch folgen direkt die Zusammenhänge

$$T_x |I\rangle_B = T_x (|I_a\rangle_B \otimes |I_b\rangle_B) = (T_x |I_b\rangle_B) \otimes |I_a\rangle_B \quad (3.42)$$

$$T_y |I\rangle_B = T_y (|I_a\rangle_B \otimes |I_b\rangle_B) = (T_y |I_a\rangle_B) \otimes (T_y |I_b\rangle_B) \quad (3.43)$$

zwischen der Translation des Gesamtzustands $|I\rangle_B$ und der Translation der Zustände $|I_a\rangle_B$ und $|I_b\rangle_B$ der Teilsysteme. Mehrfache Anwendung der Translationsoperatoren liefert dann

$$T_x^{2j_x} T_y^{j_y} |I\rangle_B = \left(T_x^{j_x} T_y^{j_y} |I_a\rangle_B \right) \otimes \left(T_x^{j_x} T_y^{j_y} |I_b\rangle_B \right) \quad (3.44)$$

$$T_x^{2j_x+1} T_y^{j_y} |I\rangle_B = \left(T_x^{j_x+1} T_y^{j_y} |I_b\rangle_B \right) \otimes \left(T_x^{j_x} T_y^{j_y} |I_a\rangle_B \right) . \quad (3.45)$$

Aufgrund der sehr geringen Hilbertraumgröße der Teilsysteme können alle nötigen Informationen gespeichert werden. Da sich die Teilsysteme a und b bezüglich der Translation nach Voraussetzung identisch verhalten sollen, braucht dies nur für eines der Teilsysteme durchgeführt werden. Hier wird o.B.d.A. Teilsystem a verwendet. Der Index i_a eines Zustands $|I_a\rangle_B$ entspricht direkt der Ganzzahl I_a seiner Binärdarstellung und der Repräsentant r_a sowie die nötigen Translationen $j_{a,x}$ und $j_{a,y}$ können für jeden Zustand $|I_a\rangle_B$ als Vektor gespeichert werden. Weiterhin kann für jeden Zustand $|I_a\rangle_B$ gespeichert werden, welchem Orbit O_{r_a} er angehört.

Wegen der Translationssymmetrie gilt selbstverständlich

$$T_x^{x_{\max}} |r_a\rangle_B = |r_a\rangle_B \quad (3.46)$$

$$T_y^{y_{\max}} |r_a\rangle_B = |r_a\rangle_B , \quad (3.47)$$

aber es gibt auch Repräsentanten, welche sogar bezüglich der Translation

$$T_x^{j_{a,x}} T_y^{j_{a,y}} |r_a\rangle_B = |r_a\rangle_B \quad (3.48)$$

mit $0 \leq j_{a,x} < x_{\max}$, $0 \leq j_{a,y} < y_{\max}$ und $(j_{a,x}, j_{a,y}) \neq (0,0)$ invariant sind. Alle Repräsentanten, welche bezüglich derselben Translationen invariant sind, werden derselben Untergruppe g_a zugeordnet. Zu welcher Untergruppe ein Repräsentant gehört, wird ebenfalls in einem Vektor gespeichert.

Es ist so, dass die aus allen Repräsentanten $|r_a\rangle_{\text{B}}$ und $|r_b\rangle_{\text{B}}$ der Teilsysteme a und b gebildeten Zustände

$$|r_a, r_b\rangle_{\text{B}} = |r_a\rangle_{\text{B}} \otimes |r_b\rangle_{\text{B}} \quad (3.49)$$

nicht alle Repräsentanten des Gesamtsystems beschreiben. Um alle Repräsentanten zu erhalten, muss gemäß der Gleichungen (3.42) und (3.43) nur eine relative Translation zwischen $|r_a\rangle_{\text{B}}$ und $|r_b\rangle_{\text{B}}$ eingeführt werden. Auf diese Weise lassen sich durch die Zustände

$$|r_a, r_b, j_x, j_y\rangle_{\text{B}} = |r_a\rangle_{\text{B}} \otimes \left(T_x^{j_x} T_y^{j_y} |r_b\rangle_{\text{B}} \right), \quad (3.50)$$

mit $r_a \leq r_b$ alle Repräsentanten des Gesamtsystems darstellen. Es kann sogar vorkommen, dass gar nicht alle Translationen benötigt werden, um sämtliche Repräsentanten zu erhalten. Die Einschränkung $r_a \leq r_b$ wird gemacht, da durch Anwendung von T_x die beiden Teilsysteme getauscht werden.

Wenn nun der Repräsentant zu einem allgemeinen Zustand

$$\begin{aligned} |I\rangle_{\text{B}} &= |I_a\rangle_{\text{B}} \otimes |I_b\rangle_{\text{B}} \\ &= T_x^{i_x} T_y^{i_y} |r_a, r_b, j_x, j_y\rangle_{\text{B}} \\ &= T_x^{i_x} T_y^{i_y} \left(|r_a\rangle_{\text{B}} \otimes \left(T_x^{j_x} T_y^{j_y} |r_b\rangle_{\text{B}} \right) \right) \end{aligned} \quad (3.51)$$

ermittelt werden soll, das heißt der Index i_R des Repräsentanten im Zustandsvektor sowie die Phase (3.39), dann müssen die Exponenten i_x , i_y und j_x , j_y bestimmt werden. Diese können allerdings eindeutig aus den Informationen der Teilsysteme erhalten werden. Da die Exponenten $j_{a,x}$, $j_{a,y}$, $j_{b,x}$, $j_{b,y}$ und die zugehörigen Untergruppen g_a und g_b der Orbits für jeden Zustand $|r_a\rangle_{\text{B}}$ und $|r_b\rangle_{\text{B}}$ in Vektoren gespeichert sind, werden nur die Abbildungen

$$t^< : (j_{a,x}, j_{a,y}, j_{b,x}, j_{b,y}, g_a, g_b) \mapsto (i_x, i_y, j_x, j_y) \quad (3.52)$$

$$t^= : (j_{a,x}, j_{a,y}, g_a) \mapsto (i_x, i_y, j_x, j_y) \quad (3.53)$$

$$t^> : (j_{a,x}, j_{a,y}, j_{b,x}, j_{b,y}, g_a, g_b) \mapsto (i_x, i_y, j_x, j_y) \quad (3.54)$$

$$s : (r_a, r_b, j_x, j_y) \mapsto i_R \quad (3.55)$$

benötigt. Diese Abbildungen können als Vektoren gespeichert werden und liefern deshalb einen effizienten Zugang zu den für die Ausnutzung der Translationssymmetrie nötigen Parametern.

Die Konstruktion der Abbildungen (3.52) bis (3.55) ist sehr einfach. Für alle g_a und g_b wird jeweils ein beliebiger Repräsentant $|r_a\rangle_{\text{B}}$ und $|r_b\rangle_{\text{B}}$ dieser Untergruppe ausgewählt. Dann wird in umgekehrter Reihenfolge über i_x , i_y , j_x , j_y iteriert, der Zustand (3.51) gebildet und die Exponenten $j_{a,x}$, $j_{a,y}$, $j_{b,x}$, $j_{b,y}$ von $|I_a\rangle_{\text{B}}$ und $|I_b\rangle_{\text{B}}$ bestimmt. Die dadurch erhaltenen i_x , i_y , j_x , j_y sind dann die Minimalen, welche den Repräsentanten $|r_a, r_b, j_x, j_y\rangle_{\text{B}}$ erzeugen und ihn mit dem Zustand (3.51) verbinden.

3.3.4 Spin-Flip Symmetrie

Es kommt oft vor, dass das System eine Spin-Flip Symmetrie aufweist, was bedeutet, dass der Operator T_{flip} , welcher in einem Zustand jeden Spin s_i^z auf $-s_i^z$ abbildet, mit dem Hamiltonoperator vertauscht. Weiterhin vertauscht dieser Operator auch mit den Translationsoperatoren T_x und T_y . Der Projektor, welcher einen Spin-Flip symmetrischen Zustand erzeugt, lautet

$$P_f = \frac{1}{2} (1 + f \cdot T_{\text{flip}}) \quad f \in \{-1, 1\} . \quad (3.56)$$

Die Anwendung von T_{flip} auf einen symmetrisierten Zustand $P_f |\psi\rangle$ liefert dann den Eigenwert f . Die Form ist also identisch zu der Form des Translationsprojektors $P_{\mathbf{k}}$ (siehe Gleichung (3.30)). Entsprechend kann die Spin-Flip Symmetrie einfach als eine dritte „ \mathbf{k} -Quantenzahl“ berücksichtigt werden. Die Verallgemeinerung der obigen Formeln auf das Tripel (k_x, k_y, f) ist offensichtlich und leicht durchzuführen.

Für Systeme mit Spin-Flip und S^z -Symmetrie ist es nur sinnvoll, die Spin-Flip Symmetrie im $S^z = 0$ Sektor auszunutzen. In den anderen Sektoren bedeutet sie lediglich, dass es ausreicht alle Sektoren mit $S^z > 0$ (oder $S^z < 0$) zu berechnen.

3.3.5 Weitere Symmetrien

Um noch größere Systeme mit exakter Diagonalisierung behandeln zu können, müssen noch mehr Symmetrien betrachtet werden. Die Grundvoraussetzung damit mehrere Symmetrien gleichzeitig verwendet werden können, ist, dass die entsprechenden Operatoren miteinander kommutieren, also ein gemeinsames System von Eigenzuständen besitzen. Gerade bei der Betrachtung von Raumsymmetrien kann dies nicht immer gewährleistet werden.

Abschließend noch der Hinweis, dass für gewisse Modelle das Programmpaket SPINPACK [137] verwendet werden kann, welches alle topologischen Symmetrien, S^z -Symmetrie und die Spin-Flip Symmetrie automatisch ermittelt und ausnutzt. Unter die unterstützten Modelle fallen typische Heisenberg-, t - J - und Hubbardmodelle.

Kapitel 4

Hubbardmodelle

In diesem Kapitel werden mehrere Arten von flussgefüllten Hubbardmodellen [28] untersucht, indem sie auf effektive Quantenspinmodelle abgebildet und diese dann analysiert werden. Die betrachteten Hubbardmodelle sind die Folgenden: Ein anisotropes Quadratgitter mit endlichem π -Fluss in den Plaketten (flussgefülltes Quadratgitter) [40, 110] sowie ein Dreiecksgitter mit einem π -Fluss in jedem zweiten Dreieck (π -Fluss Dreiecksgitter) [51].

Für eine Familie von flussgefüllten Quadratgittern werden effektive Spinmodelle mittels graphenbasierter kontinuierlicher unitärer Transformationen (gCUTs) abgeleitet. Im Anschluss wird die Triplonlücke, ausgehend von einem Valenzbondkristall (VBS), mittels perturbativer kontinuierlicher unitärer Transformationen (pCUTs) bestimmt. Aus dieser Lücke kann dann ermittelt werden, wann die Valenzbondphase zusammenbricht. Beide CUT-Methoden werden in Kapitel 2.2.2 beschrieben.

Für das Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter wurde mittels der variationellen Cluster Näherung (VCA von engl. variational cluster approximation) eine nichtmagnetische isolierende Phase – welche ein Kandidat für eine Quantenspinflüssigkeit ist – innerhalb des Mottisolators gefunden [51]. Ziel dieser Arbeit ist es unter anderem zu überprüfen, ob diese Phase auch durch ein effektives Spinmodell beschrieben werden kann. Da diese Phase, wie die antiferromagnetisch geordnete Phase, ebenfalls eine Ladungslücke aufweist, sollte eine Beschreibung durch ein effektives Quantenspinmodell prinzipiell möglich sein.

4.1 Hubbardmodell auf flussgefüllten Quadratgittern

Die Resultate dieses Kapitels wurden bereits in Referenz 40 publiziert. Sie basieren weiterhin auf den grundlegenden Überlegungen aus Referenz 138. Neben den Ergebnissen, welche mit den in dieser Doktorarbeit vorgestellten Methoden ermittelt wurden, werden auch die Quanten-Monte-Carlo (QMC) Ergebnisse aus Referenz 40 gezeigt, da diese in Zusammenarbeit mit Fakher Assaad von der Universität Würzburg entstanden sind.

Betrachtet wird das halbgefüllte Hubbardmodell [28]

$$H = H_U + H_t = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right) \quad (4.1)$$

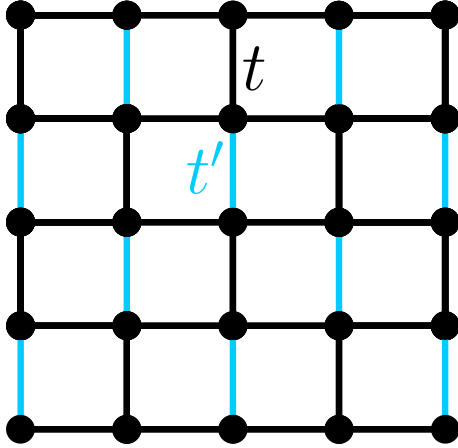


Abbildung 4.1: Ausschnitt aus dem anisotropen Quadratgitter. Schwarze Linien entsprechen der Kopplung $t_{ij} = t$ und blaue Linien der Kopplung $t_{ij} = t'$.

bei Temperatur $T = 0$ auf dem in Abbildung 4.1 dargestellten anisotropen Quadratgitter. Der Besetzungszahloperator für Elektronen mit Spin σ auf Gitterplatz i ist durch $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ gegeben. Dabei bezeichnen $c_{i\sigma}^{(\dagger)}$ fermionische Vernichtungsoperatoren (Erzeugungsoperatoren) von Elektronen mit Spin σ auf Gitterplatz i . Durch $\langle i, j \rangle$ wird die Summe auf Kopplungen zwischen nächsten Nachbarn eingeschränkt. Dabei sind, wie für das repulsive Hubbardmodell üblich, $U > 0$ und $t > 0$ gewählt. Für $t' = t$ ergibt sich das isotrope Quadratgitter, auf welchem sich aufgrund von Nesting für beliebig kleine Werte von U eine langreichweitige Néelordnung ausbildet [139–141]. Demzufolge werden für $t' > 0$ keine spannenden physikalischen Phänomene erwartet. Im Gegensatz dazu gibt es für negative t' Vorschläge für die Existenz von exotischen nichtmagnetischen Phasen [110], weshalb sich in dieser Arbeit auf $t' < 0$ beschränkt wird.

Die Kopplung t' sorgt dafür, dass beim Umlauf einer Plakette ein Fluss durch diese entsteht. Für $t' = -t$ wäre es ein π -Fluss [110] und für $t' = 0$ ergibt sich das Bienenwabengitter.

Für den Fall $U = 0$ reduziert sich das Hubbardmodell auf ein Modell freier Fermionen, kann exakt durch Fouriertransformation gelöst werden und liefert die Dispersion [40, 138]

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \left\| (t' - 1) + (1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1})(1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}) \right\| \quad (4.2)$$

mit den Gittervektoren $\mathbf{a}_1 = (a, a)$ und $\mathbf{a}_2 = (a, -a)$ und der Gitterkonstanten a . Eine weitere interessante Größe ist die Bandbreite

$$W := \max_{\mathbf{k}} E_+(\mathbf{k}) - \max_{\mathbf{k}} E_-(\mathbf{k}) = 2\sqrt{(t' - t)^2 + 4t^2}, \quad (4.3)$$

welche eine charakteristische Energieskala für die Kinetik der Elektronen darstellt. Werden die hier betrachteten ganzzahligen Werte für t'/t eingesetzt, so ergibt sich

$$W = \begin{cases} 4\sqrt{2} & \approx 5.66 & \text{für } t'/t = -1 \\ 2\sqrt{13} & \approx 7.21 & \text{für } t'/t = -2 \\ 4\sqrt{5} & \approx 8.94 & \text{für } t'/t = -3 \end{cases} \quad (4.4)$$

für die Bandbreite. Für den in dieser Arbeit diskutierten Starkkopplungslimes gibt die inverse Bandbreite t/W ein Maß dafür an, bis zu welchen Werten von t/U die Ableitung von effektiven Spinmodellen sinnvoll ist.

4.1.1 Starkkopplungslimes

Zuerst soll der Starkkopplungslimes $t/U, t'/U \rightarrow 0$ betrachtet werden. In diesem sind die Ladungsfluktuationen irrelevant und die Niederenergiephysik lässt sich durch ein effektives Spinmodell beschreiben. Zur Ableitung solcher Spinmodelle wurden bereits viele unterschiedliche Methoden verwendet [32–39], wobei sich für das hier betrachtete Gitter in führender Ordnung Störungstheorie das J - J' -Heisenbergmodell

$$H_{\text{spin}} = E_0 + J \sum_{t\text{-Bonds}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J' \sum_{t'\text{-Bonds}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (4.5)$$

mit

$$E_0 = -\frac{3t^2 + t'^2}{2U} \cdot N \quad (4.6)$$

$$J = \frac{4t^2}{U} \quad (4.7)$$

$$J' = \frac{4t'^2}{U} \quad (4.8)$$

und N als Gesamtanzahl an Gitterplätzen ergibt. Dieses Spinmodell kann aufgrund der fehlenden Frustration effizient mit Quanten-Monte-Carlo Methoden untersucht werden [111]. Es ergibt sich ein Phasenübergang zweiter Ordnung zwischen einer langreichweitig magnetisch geordneten Néelphase für kleine J'/J und einem paramagnetischen Valenzbondkristall für große J'/J . Der Übergang zwischen diesen beiden Phasen gehört zur $O(3)$ -Universalitätsklasse und liegt bei $J'/J = 2.5196$ [111], welches dem Verhältnis

$$t'/t = \pm\sqrt{J'/J} = \pm 1.5873 \quad (4.9)$$

entspricht. Während die magnetisch geordnete Phase lückenlose Goldstone-Bosonen als Anregungen besitzt [142], weist der Valenzbondkristall lückenbehaftete Triplonen [115] als Anregungen auf. Diese Triplonen entsprechen angezogenen (von engl. dressed) Anregungen von Singulettts auf den t' -Bonds zu Triplettts.

4.1.2 Effektives Spinmodell

Es wird die in Kapitel 2.2.2 beschriebene gCUT-Methode verwendet, um für verschiedene Werte von t/U und t'/t effektive Spinmodelle abzuleiten. Verwendet wird der Quasiteilchengenerator, wobei alle Zustände ohne Doppelbesetzung den Eigenwert $q_i = 0$ des Zähleroperators Q aufweisen, während alle anderen Zustände mit mindestens einer Doppelbesetzung den Eigenwert $q_i = 1$ besitzen. Dies weicht von der üblichen Definition von Q

ab, bei der q_i mit der Anzahl an Doppelbesetzungen identifiziert wird [34, 35, 37, 39, 103]. Die hier verwendete Wahl hat jedoch numerische Vorteile, da die CUT die Blöcke mit Doppelbesetzungen nicht mehr untereinander separieren muss.

Für die Ableitung wird allerdings keine volle Graphenentwicklung genutzt, sondern eine Art Rechteckentwicklung [108, 116–118]. Zum einen verringert sich so der kombinatorische Aufwand für die Erzeugung aller Graphen und zum anderen weisen die verwendeten Graphen mehr Gittersymmetrien auf. Für das Bienenwabengitter wurde eine ähnliche gCUT-Entwicklung schon erfolgreich durchgeführt [39]. Die Entwicklung wird mit Graphen, die bis zu drei Quadrate und acht Gitterplätze besitzen, durchgeführt, wobei weiterhin alle Graphen mit mehr als vier Gitterplätzen in eine Richtung ebenfalls ausgeschlossen werden. Alle dadurch entstehenden topologisch inäquivalenten Graphen $\mathcal{G}_\nu^{(n)}$ sind in Abbildung 4.2 grafisch dargestellt, wobei ν die Anzahl an Knoten des Graphen bezeichnet und n die Graphen mit identischer Knotenanzahl durchnummeriert. Wie für das Linked-Cluster Theorem (siehe Kapitel 2.1.2) nötig, ist die Menge der Graphen schnittstabil und stellt so eine valide Entwicklung dar. Mit gCUT(ν) werden die Ergebnisse bezeichnet, bei der alle Graphen mit bis zu ν Gitterplätzen berücksichtigt werden.

Zusätzlich wird das in den Referenzen 40 und 138 vorgestellte Verfahren zur Erzeugung der für die CUT verwendeten Basis bei Ausnutzung der SU(2)-Symmetrie verwendet. Um die CUT auf endlichen Graphen durchzuführen, müssten eigentlich alle möglichen Hubbardzustände erzeugt werden. Die Anzahl an Flussgleichungen für den Graphen $\mathcal{G}_\nu^{(n)}$ wächst dann jedoch mit $4^\nu \times 4^\nu$, weshalb es sinnvoll ist Symmetrien auszunutzen. In den ursprünglichen Publikationen zur gCUT-Methode [39, 103] wurde nur die S^z -Symmetrie ausgenutzt, während hier die vollständige SU(2)-Symmetrie ausgenutzt und mit einem iterativen Verfahren – ähnlich dem Lanczos-Algorithmus – zur Erzeugung einer deutlich kleineren Zustandsmenge kombiniert wird. Die SU(2)-Symmetrie kann einfach durch Berechnung der Clebsch-Gordan Koeffizienten implementiert werden [143, 144].

Der iterative Algorithmus erzeugt, ausgehend von einer Anfangsmenge B_0 , welche alle orthogonalisierten Zustände ohne Doppelbesetzungen und der gewünschten Symmetrie enthält, durch Anwendung des Hamiltonoperators H auf diese Zustände weitere Zustände. Da H sämtliche Symmetrien erhält, besitzen die resultierenden Zustände ebenfalls wieder diese Symmetrien, enthalten aber Doppelbesetzungen. Durch Anwendung des modifizierten Gram-Schmidt Verfahrens [145] werden die neuen Zustände ebenfalls orthogonalisiert. Nun wird die Hamiltonmatrix in den Zuständen aufgestellt und die CUT durchgeführt, um den Block ohne Doppelbesetzungen (0QP-Block) von dem Block mit Doppelbesetzungen (1QP-Block) zu trennen. Dieses Verfahren wird solange wiederholt bis der doppelbesetzungsfreie Block konvergiert ist.

Dabei wird die Konvergenz der CUT über die quadratische Summe der Elemente, die den 0QP- mit dem 1QP-Block verbinden, gebildet – die sogenannte ROD (vom englischen residual of off-diagonal elements). Sobald diese kleiner als 10^{-10} ist, wird die CUT gestoppt. Typischerweise führt der Quasiteilchengenerator zu einer Minimierung der ROD, welches allerdings problematisch wird, wenn der 1QP-Block Eigenwerte enthält, die kleiner als die Eigenwerte im 0QP-Block sind. Dann werden die korrespondierenden Zustände während der CUT getauscht [123], wodurch die Entkopplung der Spin- und Ladungsfreiheitsgrade

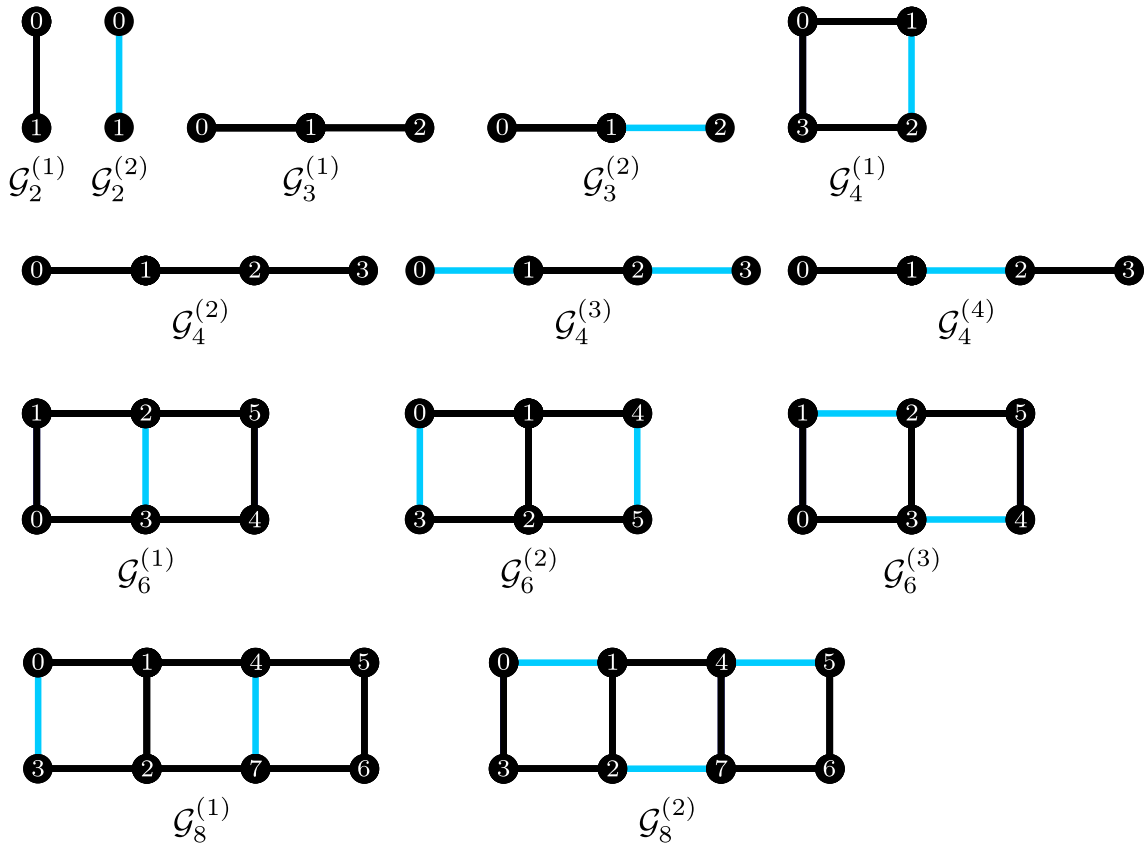


Abbildung 4.2: Alle topologisch inäquivalenten Graphen $\mathcal{G}_\nu^{(n)}$ für die Rechteckentwicklung des anisotropen Quadratgitters mit bis zu drei Quadraten und acht Knoten. Schwarze Linien stellen die Kopplung t dar, während blaue Linien die Kopplung t' darstellen. Der Index ν bezeichnet die Anzahl Knoten und n nummeriert Graphen mit derselben Anzahl Knoten durch.

auf dem Graphen nicht mehr korrekt funktioniert. Das Austauschen der Zustände führt allerdings zu einem temporären Anstieg der ROD und es erscheint daher sinnvoll, die CUT abzubrechen, sobald ein Minimum in der ROD erreicht ist. Offensichtlich entsteht dann ein Problem, wenn die ROD beim Abbruch der CUT noch sehr groß ist. Dieses Problem tritt für große Werte von t/U bei den Graphen mit acht Gitterplätzen auf, wie später in diesem Unterkapitel genauer erläutert wird.

Die Konvergenz des doppelbesetzungsfreien Blocks wird für jedes Element einzeln überprüft. Wenn die Differenz aller Elemente des 0QP-Blocks sich zwischen zwei Iterationen um weniger als 10^{-8} unterscheiden, wird die Iteration beendet.

Obige Methode führt zu einer deutlich schnelleren Konvergenz mit deutlich weniger Zuständen. Durch Ausnutzen der kompletten $SU(2)$ -Symmetrie für die Startzustände, wird diese Konvergenz nochmal beschleunigt. In Tabelle 4.1 ist für den Graphen $\mathcal{G}_6^{(1)}$ die Anzahl N_{start} an Startzuständen (Doppelbesetzungsfreie Zustände, welche die gegebene Symmetrie tragen) und die Anzahl N_{erf} an benötigten Zuständen, um eine Konvergenz des doppelbesetzungsfreien Blocks zu erreichen, bei Ausnutzung der S^z - oder $SU(2)$ -Symmetrie, einge-

S	SU(2)-Symmetrie		S^z -Symmetrie		
	N_{start}	N_{erf}	S^z	N_{start}	N_{erf}
$S = 0$	5	48	$S^z = 0$	20	400
$S = 1$	9	73	$S^z = \pm 1$	15	225
$S = 2$	5	19	$S^z = \pm 2$	6	36
$S = 3$	1	1	$S^z = \pm 3$	1	1

Tabelle 4.1: Anzahl N_{start} der Startzustände und erforderliche Anzahl N_{erf} an Zuständen, um eine Konvergenz des doppelbesetzungsfreien Blocks zu erreichen, wenn die S^z - oder SU(2)-Symmetrie berücksichtigt wird. Die Daten sind für den Graphen $\mathcal{G}_6^{(1)}$ mit $t'/t = -2$ und $t/U = 0.1$ bestimmt worden.

tragen. Es lässt sich klar erkennen, dass durch Ausnutzung der SU(2)-Symmetrie deutlich weniger Zustände benötigt werden, bis die Iteration konvergiert ist.

Auf jedem Graphen \mathcal{G} wird nun die beschriebene Methode durchgeführt und der durch die CUT entkoppelte Block ohne Doppelbesetzungen liefert eine effektive Hamiltonmatrix mit den Elementen

$$h_{\text{eff},ij}^{\mathcal{G}} = \langle i | H_{\text{eff}}^{\mathcal{G}} | j \rangle . \quad (4.10)$$

Da die Ladungsfluktuationen nun ausintegriert sind, lässt sich das effektive Modell als ein Spinmodell der Form

$$H_{\text{spin}}^{\mathcal{G}} = E_0^{\mathcal{G}} + \sum_{i,j} J_{ij}^{\mathcal{G}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \sum_{i,j,k,l} J_{ijkl}^{\mathcal{G}} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) (\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l) + \dots \quad (4.11)$$

mit der Konstanten $E_0^{\mathcal{G}}$, den Heisenbergkopplungen $J_{ij}^{\mathcal{G}}$ und den Vierspinkopplungen $J_{ijkl}^{\mathcal{G}}$ schreiben. Die Punkte „...“ repräsentieren mögliche m -Spin Operatoren mit $m \in \{6, 8, \dots\}$. Für die hier verwendeten Graphen treten maximal Achtspinoperatoren auf, da maximal acht Gitterplätze betrachtet werden. Gefordert wird nun, dass die Matrixelemente $\langle i | H_{\text{spin}}^{\mathcal{G}} | j \rangle$ des Spinmodells den Matrixelementen der effektiven Hamiltonmatrix nach der CUT entsprechen sollen:

$$\langle i | H_{\text{eff}}^{\mathcal{G}} | j \rangle = \langle i | H_{\text{spin}}^{\mathcal{G}} | j \rangle . \quad (4.12)$$

Gleichung (4.12) liefert ein überbestimmtes Gleichungssystem für die Spinkopplungen $J_{ij, \dots}^{\mathcal{G}}$, welches numerisch gelöst werden kann. Allerdings ist es so, dass für größer werdende Graphen die Anzahl an Spinkopplungen schneller wächst als die Anzahl an Matrixelementen, was auf ein unterbestimmtes Gleichungssystem führt. Dies stellt aber kein großes Problem dar, da jede Lösung dieses Gleichungssystems valide ist, da sie die relevante Niederenergiephysik des ursprünglichen Hubbardmodells erfasst.

Es lässt sich leicht sehen, dass die Berechnung der reduzierten Beiträge und die Einbettung auf das unendliche Gitter der effektiven Spinmodelle (4.11), sich auf das Reduzieren und Einbetten der Spinkopplungen zurückführen lässt. Durch den Einbettungsprozess werden

dann die Gittersymmetrien, welche auf einzelnen Graphen gebrochen sein können, wiederhergestellt. Anhand der wichtigen Nächstnachbar-Kopplung J' wird nun ein Beispiel gegeben, wie die reduzierten Beiträge und die Einbettung bis gCUT(6) aussehen. Um die Notation möglichst einfach zu halten werden die reduzierten Beiträge der Kopplung $J_{\mathcal{G}_\nu}^{(n)}$ mit $\overline{J_{\mathcal{G}_\nu}^{(n)}}$ bezeichnet. Für die benötigten reduzierten Beiträge ergeben sich die Beziehungen

$$\overline{J_{01}^{\mathcal{G}_2^{(2)}}} = J_{01}^{\mathcal{G}_2^{(2)}} \quad (4.13)$$

$$\overline{J_{12}^{\mathcal{G}_3^{(2)}}} = J_{12}^{\mathcal{G}_3^{(2)}} - \overline{J_{01}^{\mathcal{G}_2^{(2)}}} \quad (4.14)$$

$$\overline{J_{12}^{\mathcal{G}_4^{(1)}}} = J_{12}^{\mathcal{G}_4^{(1)}} - \overline{J_{01}^{\mathcal{G}_2^{(2)}}} \quad (4.15)$$

$$\overline{J_{12}^{\mathcal{G}_6^{(1)}}} = J_{12}^{\mathcal{G}_6^{(1)}} - \overline{J_{01}^{\mathcal{G}_2^{(2)}}} - 2\overline{J_{12}^{\mathcal{G}_4^{(1)}}} \quad (4.16)$$

$$\overline{J_{03}^{\mathcal{G}_6^{(2)}}} = J_{03}^{\mathcal{G}_6^{(2)}} - \overline{J_{01}^{\mathcal{G}_2^{(2)}}} - \overline{J_{12}^{\mathcal{G}_4^{(1)}}} \quad (4.17)$$

$$\overline{J_{12}^{\mathcal{G}_6^{(3)}}} = J_{12}^{\mathcal{G}_6^{(3)}} - \overline{J_{01}^{\mathcal{G}_2^{(2)}}} - \overline{J_{12}^{\mathcal{G}_4^{(1)}}} - \overline{J_{12}^{\mathcal{G}_3^{(2)}}} \quad (4.18)$$

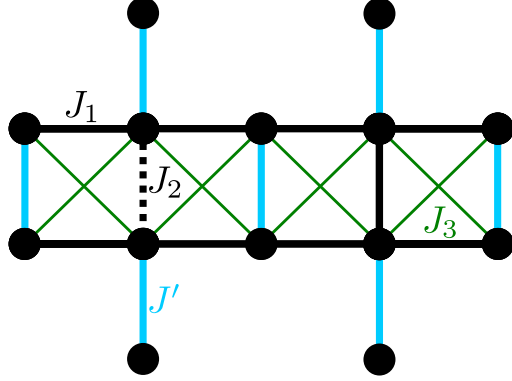
und durch Einbetten ergibt sich

$$J' = \overline{J_{01}^{\mathcal{G}_2^{(2)}}} + 2\overline{J_{12}^{\mathcal{G}_3^{(2)}}} + 2\overline{J_{12}^{\mathcal{G}_4^{(1)}}} + \overline{J_{12}^{\mathcal{G}_6^{(1)}}} + 2\overline{J_{03}^{\mathcal{G}_6^{(2)}}} + 4\overline{J_{12}^{\mathcal{G}_6^{(3)}}} . \quad (4.19)$$

Sowohl bei den reduzierten Beiträgen, als auch beim Einbetten wurde berücksichtigt, dass gewisse Kopplungen, aufgrund von Symmetrien auf den Graphen, identisch sind. So ist die Kopplung $J_{03}^{\mathcal{G}_6^{(2)}}$ des Graphen $\mathcal{G}_6^{(2)}$ identisch mit der Kopplung $J_{45}^{\mathcal{G}_6^{(2)}}$ desselben Graphen.

Die Diskussion des resultierenden Spinmodells wird in dieser Arbeit auf maximal Vierspinterme eingeschränkt, wodurch sich, die in Abbildung 4.3 dargestellten, sieben Kopplungen für das im thermodynamischen Limes gültige effektive Spinmodell ergeben. Diese Einschränkung folgt aus einer störungstheoretischen Betrachtungsweise: Da die Amplitude der Spinkopplungen von t/U und t'/U abhängt, werden mit den gewählten Kopplungen fast alle Kopplungen berücksichtigt, welche in vierter Ordnung Störungstheorie auftreten – sie sind dennoch nichtperturbativ abgeleitet. Lediglich eine Heisenbergkopplung zwischen über-übernächsten Nachbarn wurde vernachlässigt, da diese bekanntermaßen eine sehr kleine Amplitude aufweist, während für die Vierspinterme auf einzelnen Quadraten für das isotrope Quadrat- und Dreiecksgitter bereits gezeigt wurde, dass diese einen großen und wichtigen Beitrag liefern [34, 35, 37, 39, 103]. Die Kopplung J_3 zwischen übernächsten Nachbarn ist eine Größenordnung kleiner als die anderen betrachteten Zweispinkopplungen, weshalb sie eine Ausnahme darstellt. Sämtliche Amplituden der Sechs- und Achtspinterme sind, im betrachteten Parameterbereich, ebenfalls mindestens eine Größenordnung kleiner als die Zweispinkopplungen (mit Ausnahme von J_3). Unter diesen Einschränkungen lässt

(a) Zweispinkopplungen



(b) Vierspinkopplungen

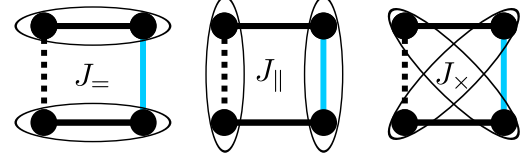


Abbildung 4.3: Grafische Darstellung der (a) Zweispinkopplungen J' , J_1 , J_2 , J_3 und (b) Vierspinkopplungen J_+ , $J_{||}$, J_{\times} des effektiven Spinmodells.

sich das effektive Spinmodell als

$$H_{\text{spin}} = E_0 + H' + H \quad (4.20)$$

$$H' = J' \sum_{\langle i,j \rangle'} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} H = & J_1 \sum_{\langle i,j \rangle_1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle i,j \rangle_2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_3 \sum_{\langle i,j \rangle_3} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ & + \sum_{(i,j,k,l) \in \square} [J_+ (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) (\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l) + J_{||} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l) (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k) \\ & + J_{\times} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k) (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l)] \end{aligned} \quad (4.22)$$

schreiben. Dabei geht die Summe $\sum_{(i,j,k,l) \in \square}$ über alle Quadrate des Gitters und die i,j,k,l werden von der linken oberen Ecke des jeweiligen Quadrates startend im Uhrzeigersinn durchlaufen. Die mittels gCUT(ν) ($\nu \in \{4,6,8\}$) resultierenden Amplituden der Spinkopplungen sind für $t'/t \in \{-1, -2, -3\}$ in Abbildung 4.4 dargestellt.

Es lässt sich erkennen, dass die inverse Bandbreite eine charakteristische Energieskala für die Konvergenz der gCUT-Rechnungen darstellt. Für $t/U \leq t/W$ werden die Resultate mit zunehmender gCUT-Ordnung ν kontinuierlich verbessert, während für größere t/U deutlich höhere ν nötig sind, um konvergente Resultate zu erzielen. Dies ist plausibel, da die erhöhten Ladungsfluktuationen zu einer größeren Korrelationslänge führen. Zusätzlich wurde für die großen Cluster mit acht Gitterplätzen und $t'/t = -3$ die Integration der Flussgleichungen bei einem Minimum der ROD abgebrochen, bevor die Trennung der Spin- und Ladungsfreiheitsgrade vollständig abgeschlossen war. Dies lässt sich in Abbildung 4.4 (c) an einem nichtmonotonen Verhalten der Spinkopplungen erkennen und deutet

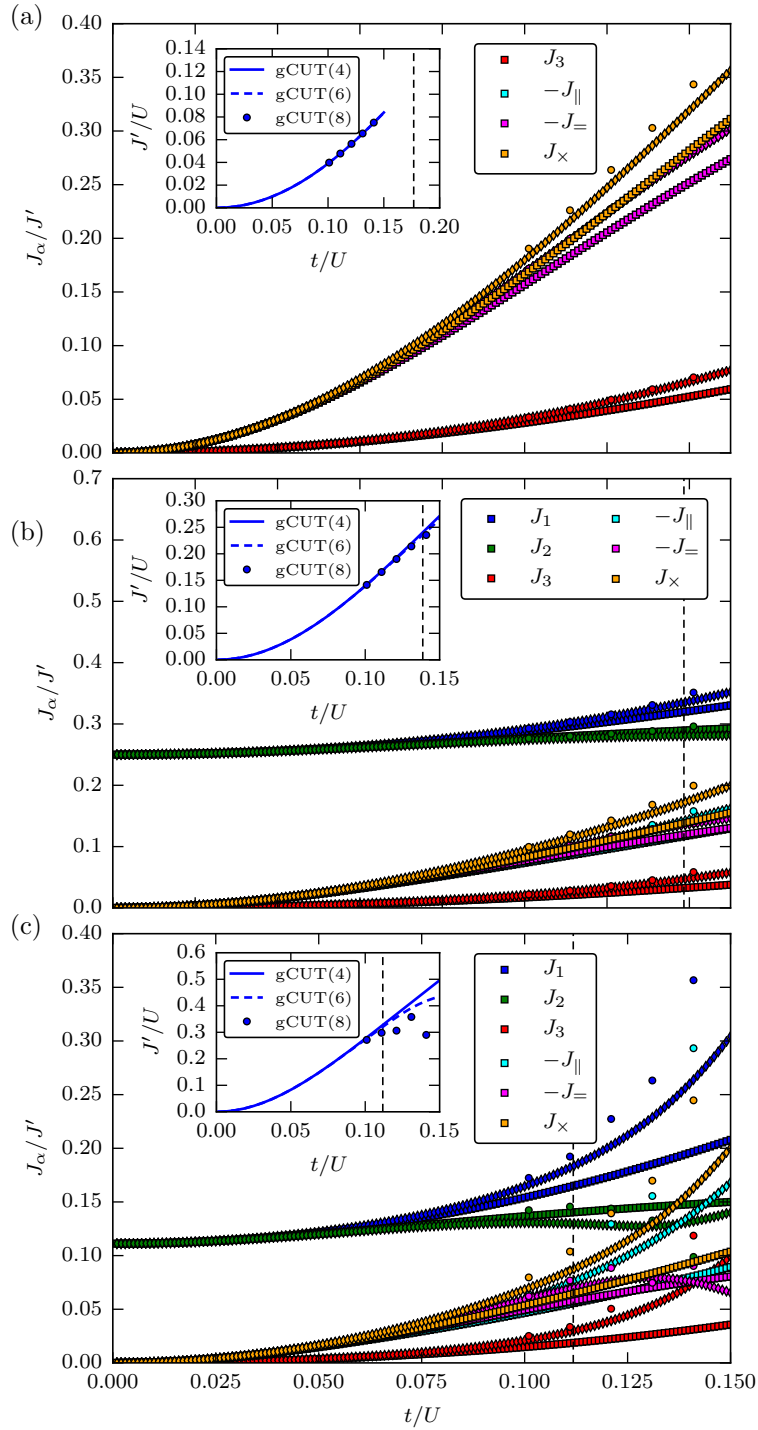


Abbildung 4.4: Relative Amplituden der Spinkopplungen J_α/J' ($\alpha \in \{1,2,3, \parallel, =, \times\}$) in Abhängigkeit von t/U für (a) $t'/t = -1$, (b) $t'/t = -2$, (c) $t'/t = -3$. Unterschiedliche Farben repräsentieren unterschiedliche Kopplungen J_α/J' und die Quadrate, Rauten und Kreise sind gCUT(4), gCUT(6) bzw. gCUT(8). Die inverse Bandbreite t/W wird durch vertikale gestrichelte Linien angezeigt. *Bildeinschübe:* Spinkopplung J'/U in Abhängigkeit von t/U . In (a) gilt $J' = J_1 = J_2$.

auf mögliche Grenzen des verwendeten gCUT-Verfahrens in diesem Bereich hin.

Für den Bereich $t/U \leq t/W$ ist folgende Kopplungshierarchie erkennbar: Die bereits in zweiter Ordnung Störungstheorie auftretenden nächstnachbar Zweispinkopplungen J' , J_1 und J_2 besitzen die größten Amplituden. Als wichtigste Korrektur kommen die auf den Quadraten definierten Ringaustauschterme (Vierspinkopplungen) J_{\parallel} , $J_{=}$ und J_{\times} hinzu, wodurch die hier gezeigten Resultate konsistent zu ähnlichen Rechnungen für das isotrope Hubbardmodell auf Dreiecks- [39, 103] und Quadratgitter [34, 35, 37] sind. Insbesondere wächst der Einfluss der Vierspinterme für größer werdende t/U an.

4.1.3 pCUT für die VBS-Phase

In dem vorherigen Unterkapitel wurde ein effektives Niederenergiemodell (4.20) für das Hubbardmodell abgeleitet. Dazu wurde die Methode der graphenbasierten kontinuierlichen unitären Transformationen verwendet. Dieses effektive Spinmodell sollte die relevante Niederenergiephysik des Hubbardmodells erfassen, solange $t/U \leq t/W$ ist, das heißt die Ladungsfluktuationen nicht zu stark sind. Dennoch ist es eine schwierige Aufgabe das resultierende Spinmodell zu lösen. Für den Starkkopplungslimes $t/U \rightarrow 0$ wird erwartet, dass der Grundzustand für $|t'/t| < 1.5873$ eine langreichweitige Néelordnung ausbildet, während er für größere Werte $|t'/t| > 1.5873$ ein Valenzbondkristall ist (siehe Gleichung (4.9)). Eine grundlegende Frage ist nun, ob es in Abhängigkeit von t/U für feste t'/t einen Quantenphasenübergang innerhalb der Mottphase zwischen dem Valenzbondkristall und der Néelordnung gibt. Dazu kann untersucht werden, wann der lückenbehaftete VBS zusammenbricht – das heißt wann die Triplonlücke schließt –, da die antiferromagnetisch geordnete Néelphase lückenlos ist.

Der Grundzustand des Valenzbondkristalls ist adiabatisch mit dem Produktzustand aus Singulettts auf den t' -Bonds verknüpft. Es ist deshalb möglich eine Reihenentwicklung um diesen Referenzzustand mittels pCUT durchzuführen. Die nächstnachbar Wechselwirkung der t' -Bonds wird im Spinmodell (4.20) durch H' (Gleichung (4.21)) beschrieben. Für die pCUT werden entsprechend die Entwicklungsparameter

$$x_{\kappa} := \frac{J_{\kappa}}{J'} \text{ mit } \kappa \in \{1, 2, 3, \parallel, =, \times\} \quad (4.23)$$

eingeführt, wobei explizit

$$x_4 := x_{\parallel} \quad (4.24)$$

$$x_5 := x_{=} \quad (4.25)$$

$$x_6 := x_{\times} \quad (4.26)$$

gesetzt werden. Das effektive Spinmodell lässt sich dann als

$$\frac{H_{\text{spin}}}{J'} = \frac{1}{J'} (E_0 + H') + \sum_{\kappa=1}^6 x_{\kappa} H_{\kappa} \quad (4.27)$$

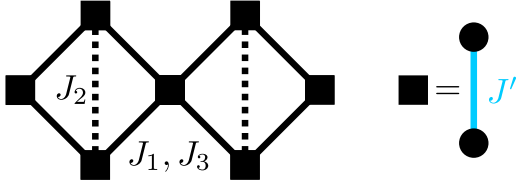


Abbildung 4.5: Effektives Dreiecksgitter, welches entsteht, wenn die t' -Bonds durch effektive Gitterplätze (schwarze Quadrate) ersetzt werden. Die durchgezogenen schwarzen Linien korrespondieren zu den Zweispinkopplungen J_1 und J_3 , während die gestrichelten schwarzen Linien zu der Zweispinkopplung J_2 korrespondieren.

schreiben. Die H_κ lassen sich durch einen Koeffizientenvergleich direkt aus Gleichung (4.22) ablesen. Für $x_\kappa = 0$ ergibt sich dann der Hamiltonoperator isolierter Dimere. Der Produktzustand von Singulettts auf den t' -Bonds ist dann der exakte Grundzustand und die elementaren Anregungen sind durch lokale Spin-1 Triplettts mit Anregungsenergie J' gegeben. Die zu x_κ proportionalen Operatoren induzieren dann Hüpf-, Wechselwirkungs- sowie Erzeugungs- und Vernichtungsterme der Triplettts. Für die pCUT wird eine Quasiteilchenbeschreibung in Triplonen, welche angezogene Triplettts sind, gewählt. Diese Triplonen stellen die elementaren Anregungen von lückenbehafteten VBS-Phasen dar [115]. Die t' -Bonds werden in dieser Beschreibung durch effektive Gitterplätze ν ersetzt, wodurch sich das in Abbildung 4.5 skizzierte effektive Dreiecksgitter ergibt.

Auf diese Weise wird H' als ungestörter, lokal auf die einzelnen Gitterplätze des effektiven Dreiecksgitters wirkender Anteil definiert und ist diagonal im Tripletzzähleroperator

$$Q_{\text{triplon}} = \sum_{\nu, \alpha} t_{\nu, \alpha}^\dagger t_{\nu, \alpha}. \quad (4.28)$$

Die Summe läuft dabei über alle Gitterplätze ν des effektiven Gitters und die drei Tripletttypen $\alpha \in \{-1, 0, +1\}$. Durch $t_{\nu, \alpha}^\dagger$ und $t_{\nu, \alpha}$ werden die Triplettterzeuger bzw. -vernichter definiert, die ein Triplett vom Typ α auf dem Gitterplatz ν erzeugen bzw. vernichten. Der ungestörte Diagonalanteil H' nimmt dann die Form

$$\frac{H'}{J'} = -\frac{3}{8}N + Q_{\text{triplon}} \quad (4.29)$$

an. Dabei spiegelt die Konstante $-3/8N$ die Gesamtenergie von Singulettts auf den $N/2$ t' -Bonds wider.

Nach diesen Überlegungen lässt sich der Gesamthamiltonoperator in der für die pCUT erforderlichen Form

$$\frac{H_{\text{spin}}}{J'} = \frac{\tilde{E}_0}{J'} + Q_{\text{triplon}} + \sum_{\kappa=1}^6 \sum_{j=-3}^3 x_\kappa T_\kappa^{(j)} \quad (4.30)$$

$$\tilde{E}_0 = E_0 - \frac{3}{8}NJ' \quad (4.31)$$

schreiben. Während die Zweispinterme lediglich zu Operatoren $T_\kappa^{(j)}$ mit $j \in \{0, \pm 1, \pm 2\}$ führen, so entstehen die $T_\kappa^{(\pm 3)}$ durch die Vierspinwechselwirkungen, welche drei t' -Bonds gleichzeitig koppeln (siehe Abbildung 4.3). Auf dem effektiven Dreiecksgitter (Abbildung 4.5) wirken die Vierspinterme also auf drei Gitterplätze. Wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, wird durch die pCUT der Hamiltonoperator H_{spin} in jeder Störungsordnung auf einen effektiven, mit Q_{triplon} kommutierenden, Hamiltonoperator H_{eff} abgebildet.

Um die Triplonlücke Δ/J' zu bestimmen, wird der Eintriplonblock, das heißt der Block mit einem Quasiteilchen, von H_{eff} betrachtet. Für die Berechnung ist es nötig die Hüpfelemente, das heißt die Änderung der (räumlichen) Position des Quasiteilchens auf dem Gitter, zu bestimmen. Dies gelingt, indem auf einem ausreichend großen Cluster die Anfangs- und Endposition des Quasiteilchens in den beiden Zuständen $|i\rangle$ und $|j\rangle$ festgelegt und das Matrixelement

$$h_{\text{eff},ij} = \langle i | H_{\text{eff}} | j \rangle \quad (4.32)$$

mittels pCUT berechnet wird. Ausreichend groß bedeutet in diesem Fall, dass alle verbundenen Prozesse, die das Quasiteilchen von seiner Anfangs- zu seiner Endposition bringen, auf diesem Cluster möglich sind. Alternativ könnte auch eine Graphenentwicklung gemäß dem Linked-Cluster Theorem (siehe Kapitel 2.1.2) durchgeführt werden, um die Hüpfelemente $h_{\text{eff},ij}$ zu bestimmen.

Nachdem alle Hüpfelemente, also der Eintriplonblock von H_{eff} , berechnet wurden, kann dieser Block mit einer Fouriertransformation diagonalisiert werden, wobei der Ortsvektor die Position des Quasiteilchens angibt. Hieraus resultiert dann die Eintriplondispersion $\omega(\mathbf{k})$ sowie die Triplonlücke

$$\Delta := \omega(\mathbf{k} = 0) \quad (4.33)$$

in Einheiten von J' .

Bevor die Ergebnisse diskutiert werden, werden noch einige technische Details zur Ausführung der pCUT gegeben. Dafür wird erst einmal festgestellt, dass eine Reihenentwicklung in den sechs Störparametern x_κ mit $\kappa \in \{1, 2, 3, \|, , \times\}$ sehr aufwendig ist. Deshalb wurde diese allgemeine Entwicklung des Spinmodells (4.27) nur bis Ordnung 5 durchgeführt. Die mittels gCUT bestimmten Parameter J_κ müssen hingegen für jeden Wert von t/U und t'/t numerisch bestimmt werden, können dann aber in die allgemeine Störungsreihe eingesetzt werden. Dies hat den großen Vorteil, dass die pCUT-Rechnung nur einmal durchgeführt werden muss.

Alternativ können die mit der gCUT ermittelten Parameter J_κ für jede pCUT-Rechnung konkret spezifiziert werden. Dazu werden alle Entwicklungsparameter x_κ in Abhängigkeit von einem dieser dargestellt. Zum Beispiel kann

$$x := x_1 \quad (4.34)$$

definiert werden, wodurch sich dann

$$x_\kappa = \frac{J_\kappa}{J_1} x \quad (4.35)$$

für die anderen Entwicklungsparameter ergibt. Dadurch muss die pCUT nur in einem Störparameter x durchgeführt werden, wodurch Ergebnisse bis Ordnung 6 erzielt werden konnten. Allerdings muss dies für alle Werte von t/U und t'/t individuell gemacht werden. Die mittels pCUT in Ordnung n ermittelten Resultate werden mit pCUT_n bezeichnet.

Zuletzt wird die Triplonlücke noch mithilfe der in Kapitel 2.3.2 beschriebenen dlog-Padé Approximationen extrapoliert, um mögliche Phasenübergänge zweiter Ordnung detektieren zu können. Für das hier betrachtete Problem wird ein Quantenphasenübergang erwartet, der in der $O(3)$ -Universalitätsklasse mit $z = 1$ und dem dynamischen kritischen Exponenten $\nu = 0.7112(5)$ liegt [146]. Weiterhin sollte sich die Qualität der Extrapolation mit zunehmender Ordnung stetig verbessern.

4.1.4 Ergebnisse

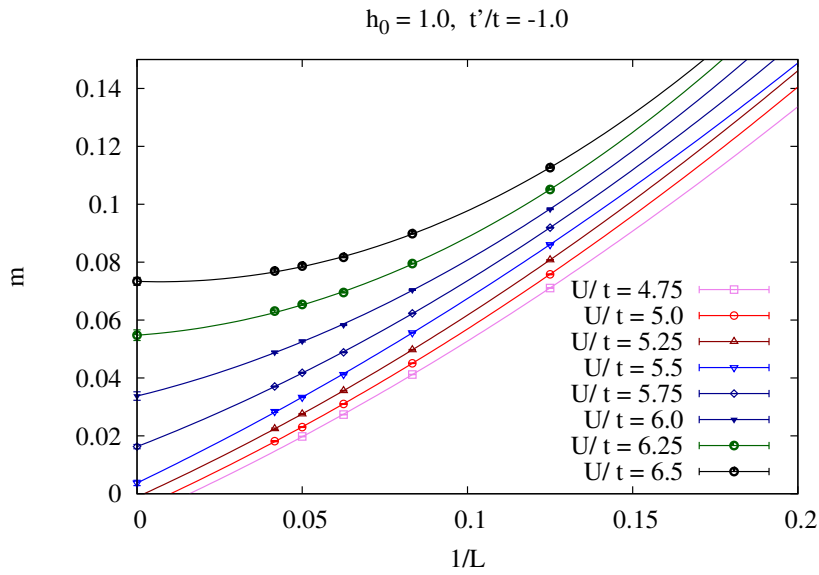
Der QMC-Ansatz funktioniert ausgehend vom Schwachkopplungslimes $t \gg U$ am Besten, während die Kombination von gCUT und pCUT für den Starkkopplungslimes $t \ll U$ ausgelegt ist. Zusätzlich wird erwartet, dass die Reihenentwicklung um den Valenzbondkristall nur für $|t'/t| > 1.5873$ gut funktioniert, da das störungstheoretisch bis zweiter Ordnung berechnete effektive Spinmodell erst für genügend große J' einen Valenzbondkristall ausbildet. Eine Kombination beider Methoden sollte daher eine Bestimmung des Phasendiagramms für das Hubbardmodell auf dem flussgefüllten Quadratgitter ermöglichen. Im Folgenden wird sich zuerst auf die Werte $t'/t \in \{-1, -2\}$ konzentriert und es werden repräsentative Ergebnisse für die verschiedenen Phasen des Modells gegeben. Im Anschluss wird der Zusammenbruch des Valenzbondkristalls in Abhängigkeit von kontinuierlichen t'/t und t/U studiert. Abschließend wird dann das Phasendiagramm angegeben.

Sämtliche QMC-Ergebnisse dieses Unterkapitels wurden von Fakher Assaad an der Universität Würzburg produziert und zusammen mit den im Rahmen dieser Doktorarbeit ermittelten CUT-Rechnungen in Referenz 40 publiziert. Sie werden deshalb ebenfalls hier präsentiert, um die Diskussion des Modells vollständig abzuschließen. Allerdings werden die methodischen Details nicht weiter erläutert und für eine detaillierte Erklärung sei an dieser Stelle auf Referenz 40 verwiesen.

Übergang vom Halbmetall zur Néelordnung: $t'/t = -1$

Der Fall $t'/t = -1$ korrespondiert zum π -Fluss Quadratgitter [110]. Die Ergebnisse aus Referenz 110 deuten auf eine ungeordnete nichtmagnetische isolierende Phase innerhalb des Mottisolators hin. Zuvor wurde die Existenz einer Quantenspinflüssigkeitsphase auf dem, ebenfalls unfrustrierten, Bienenwabengitter ($t' = 0$) in Aussicht gestellt [147]. Mithilfe verbesserter QMC-Berechnungen [148, 149] konnte dieses Szenario jedoch ausgeschlossen werden. Die in dieser Arbeit und Referenz 40 gezeigten Ergebnisse, profitieren ebenfalls von den verbesserten Berechnungen und liefern keinerlei Hinweise auf eine nichtmagnetische Zwischenphase, sondern deuten auf einen direkten Übergang von der antiferromagnetisch geordneten Néelphase zum Halbmetall hin, welcher im Rahmen der Gross-Neveu Kritikalität verstanden werden kann [150–152].

(a)



(b)

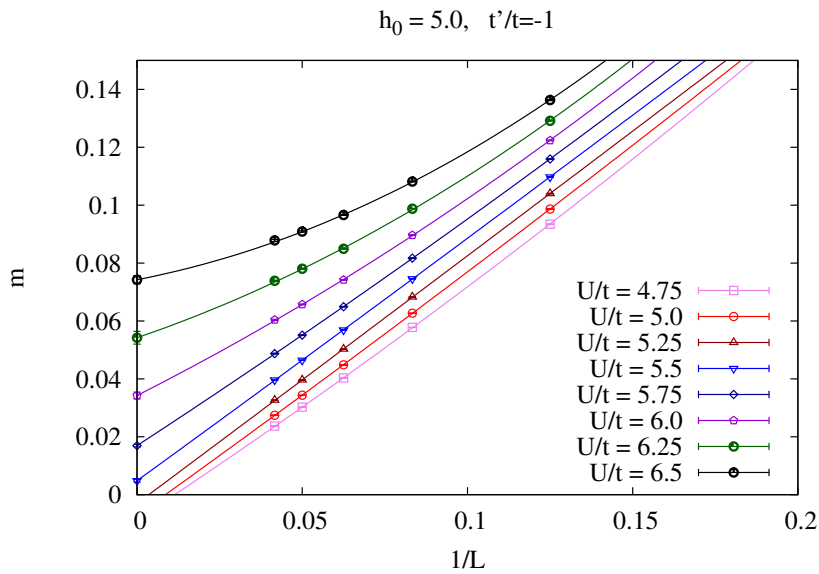


Abbildung 4.6: Pinning-Feld QMC Ergebnisse für das induzierte magnetische Moment m in Abhängigkeit von der inversen Längenskala $1/L$ für $t'/t = -1$. Beide Pinning-Felder (a) $h_0 = 1$ und (b) $h_0 = 5$ liefern denselben extrapolierten Wert für die Magnetisierung. Die durchgezogenen Linien sind Extrapolationen zum thermodynamischen Limes und die extrapolierten Werte sind als Symbol bei $1/L = 0$ dargestellt.

Für $t' = 0$ liegt die Rotationssymmetrie des zugrundeliegenden Dreiecksgitters vor, sodass die Dirackegel bei schwachen Wechselwirkungen bei festen, d.h. wechselwirkungsunabhängigen, Impulsen \mathbf{k} liegen. Für $t' \neq 0$ wird diese Symmetrie gebrochen und die Position der Dirackegel kann sich in Abhängigkeit von U verändern.

Interessanterweise weist das Gitter für $t'/t = -1$ ebenfalls eine erhöhte Symmetrie auf. Sie wird deutlich, wenn die Phase gleichmäßig auf alle Kopplungen des Gitters verteilt wird, sodass $t, t' \rightarrow t \exp(i\pi/4)$ wird. Die Dirackegel liegen dann wieder bei festen Impulsen $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$. Eine feste Position der Dirackegel ist vorteilhaft für die QMC-Rechnungen, da diese bei der Wahl der Gittergröße ausgenutzt werden können und so eine glatte Skalierung ermöglicht wird.

In Abbildung 4.6 ist die mittels Pinning-Feld QMC (engl. pinning field QMC) [40, 149] bestimmte Magnetisierung m in Abhängigkeit von U/t aufgetragen. Details wie dieses Verfahren für das hier untersuchte Modell und Gitter angewendet werden, finden sich in Referenz 40 und werden hier nicht erläutert. Aus Abbildung 4.6 wird klar, dass beide Werte für das Pinning-Feld zum selben Wert extrapolieren und ein magnetischer Übergang im Bereich $U_c/t \in (5.25, 5.5)$ erkennbar ist. Eine Berechnung der Einteilchenlücke Δ_{sp} mit QMC führt zu den in Abbildung 4.7 dargestellten Ergebnissen. Auch hier ist für $U_c/t \in (5.25, 5.5)$ ein kritischer Punkt erkennbar, was zu der Schlussfolgerung führt, dass die Energielücke aus der durch die, für die magnetische Ordnung inhärenten, Symmetriebrechungen der Untergitter und Zeitumkehrinvarianz hervorgeht. Folglich sind die Resultate für $t'/t = -1$ konsistent mit einem direkten Übergang vom Halbmetall zu einem Néel-geordneten magnetischen Isolator.

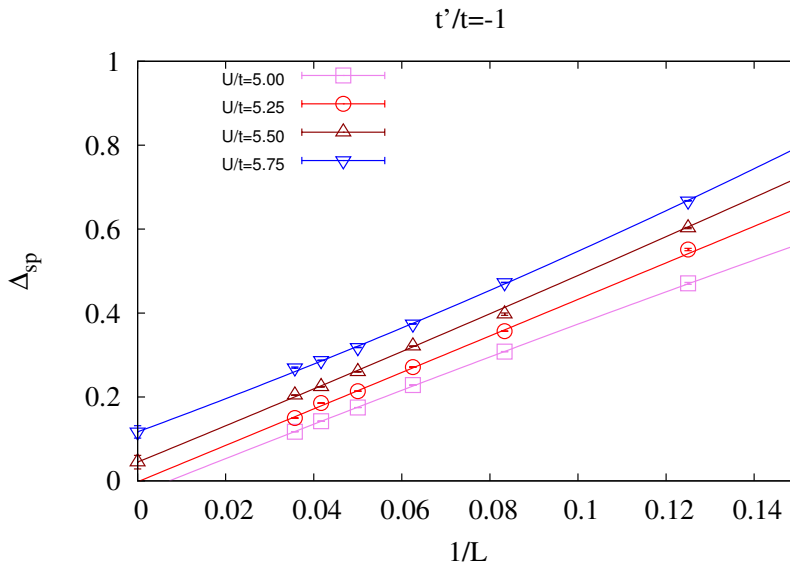


Abbildung 4.7: Mittels QMC bestimmte Einteilchenlücke Δ_{sp} in Einheiten von t als Funktion der inversen Längenskala $1/L$ für $t'/t = -1$. Die durchgezogenen Linien sind lineare Extrapolationen zum thermodynamischen Limes und die extrapolierten Werte sind als Symbol bei $1/L = 0$ dargestellt.

Übergang vom Halbmetall zur Néelordnung und zum VBS: $t'/t = -2$

Nun wird der Fall $t'/t = -2$ betrachtet, für den im Starkkopplungslimes – im Gegensatz zum π -Fluss Quadratgitter – ein Valenzbondkristall realisiert wird. Durch Kombination von QMC und CUT kann das Phasendiagramm, ausgehend vom Starkkopplungslimes, studiert werden und es zeigt sich, dass eine magnetische Néel-geordnete Phase zwischen Halbmetall und Valenzbondkristall existiert.

Für die QMC existiert keine Symmetrie mehr, die die Position der Diracpunkte festlegt, sodass eine präzise Berechnung der Einteilchenlücke schwierig ist. Es ist deshalb einfacher auch für die QMC-Berechnungen vom Grenzfall starker Wechselwirkungen auszugehen. Der VBS weist eine endliche Spinlücke zu den Triplonanregungen auf, welche sowohl mit QMC – analog zur Einteilchenlücke aus dem vorherigen Abschnitt – als auch mit dem CUT-Verfahren berechnet wird. Die pCUT liefert dabei die Triplonlücke als Potenzreihe in den magnetischen Austauschwechselwirkungen, welche zuvor mittels gCUT (siehe Kapitel 4.1.2) aus dem ursprünglichen Hubbardmodell bestimmt wurden.

In Abbildung 4.8 ist die mit QMC bestimmte Spinlücke

$$\Delta_s = E_0(S = 1) - E_0(S = 0), \quad (4.36)$$

welche die Energiedifferenz zwischen den niedrigsten Energien mit Gesamtspin $S = 1$ und $S = 0$ ist, für verschiedene Clustergrößen und U/t aufgetragen.

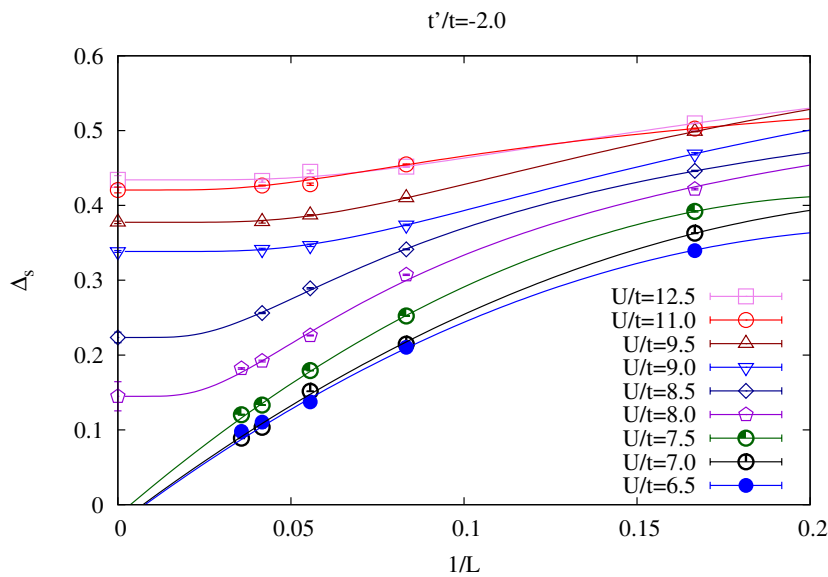


Abbildung 4.8: Mittels QMC bestimmte Spinlücke für $t'/t = -2$. Die durchgezogenen Linien sind Fits an die Datenpunkte und die Punkte bei $1/L = 0$ sind die extrapolierten Werte. Dabei ist zu beachten, dass die Extrapolationen empfindlich sind. In der lückenbehafteten Phase wurde die Spinlücke mit der Funktion $a + b \exp(-\xi/L)$ gefittet, welche für Korrelationslängen ξ die kleiner als die Systemgröße sind, eine sinnvolle Wahl darstellt. Wenn diese Interpretation nicht durch die Daten gestützt wurde, wurden sie stattdessen mit einem polynomiellen Fit extrapoliert.

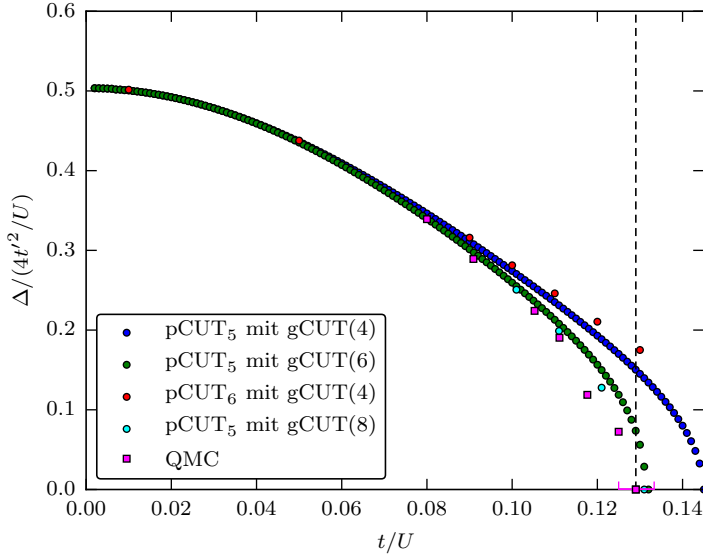


Abbildung 4.9: Mittels CUT (Kreise) und QMC (Quadrate) bestimmte Triplonlücke Δ in Einheiten von $4t'^2/U$ als Funktion von t/U für $t'/t = -2$. Für die CUT werden verschiedene Trunkierungen $gCUT(\nu)$ mit $\nu \in \{4,6,8\}$ der $gCUT$ sowie beide Maximalordnungen $pCUT_5$ und $pCUT_6$ der $pCUT$ gezeigt. Letztere wurden mit den $dlog$ -Padé Approximationen $D[2,2]_\Delta$ bzw. $D[2,3]_\Delta$ extrapoliert. Der voraussichtliche quantenkritische Punkt wird durch die gestrichelte vertikale Linie angezeigt.

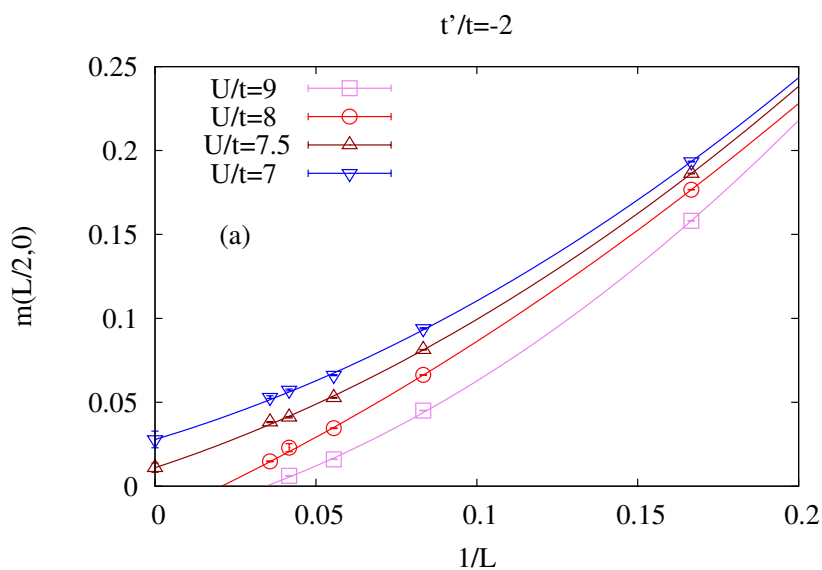
Es lässt sich erkennen, dass der VBS bis zu einem kritischen Wert $U_c/t \in (7.5, 8.0)$ existiert und dann zusammenbricht. Ein Vergleich mit den CUT-Daten für die Triplonlücke ist in Abbildung 4.9 dargestellt und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung.

Zusätzlich werden auch die Spin-Spin Korrelationen im Ortsraum berechnet und das lokale Moment

$$m(\mathbf{r}_i) = \sqrt{\langle (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})(n_{0,\uparrow} - n_{0,\downarrow}) \rangle}, \quad (4.37)$$

welches die Wurzel der Spin-Spin Korrelationen ist, extrahiert. In Abbildung 4.10 ist dieses für $\mathbf{r}_i = (L/2, 0)$ auf einem $L \times L$ Gitter dargestellt. Die x -Richtung wurde dabei gewählt, da die Dimerisierung entlang der y -Richtung stattfindet und deshalb dominante Spin-Spin Korrelationen entlang der x -Richtung erwartet werden. An den Ergebnissen in Abbildung 4.10 lässt sich erkennen, dass für $U \geq 8t$ keine Ordnung in der VBS-Phase nachweisbar ist. Unterhalb der VBS-Phase für z.B. $U = 7t$ unterstützen die Daten die Existenz von langreichweitiger magnetischer Ordnung, welche dann für $U < 6t$ in eine paramagnetische Phase übergeht. Demzufolge unterstützen die QMC-Daten folgendes Szenario für $t'/t = -2$: Zuerst entwickelt das Halbmetall eine Energielücke aufgrund der antiferromagnetischen Korrelationen und es wird erwartet, dass dieser Übergang in der Gross-Neveu Universalitätsklasse liegt. Danach geht, bei etwas größeren U/t , die magnetisch geordnete Phase in einen VBS über. Da dieser Übergang nicht mit den fermionischen Freiheitsgraden verknüpft ist, sollte er erwartungsgemäß zur $O(3)$ -Universalitätsklasse gehören.

(a)



(b)

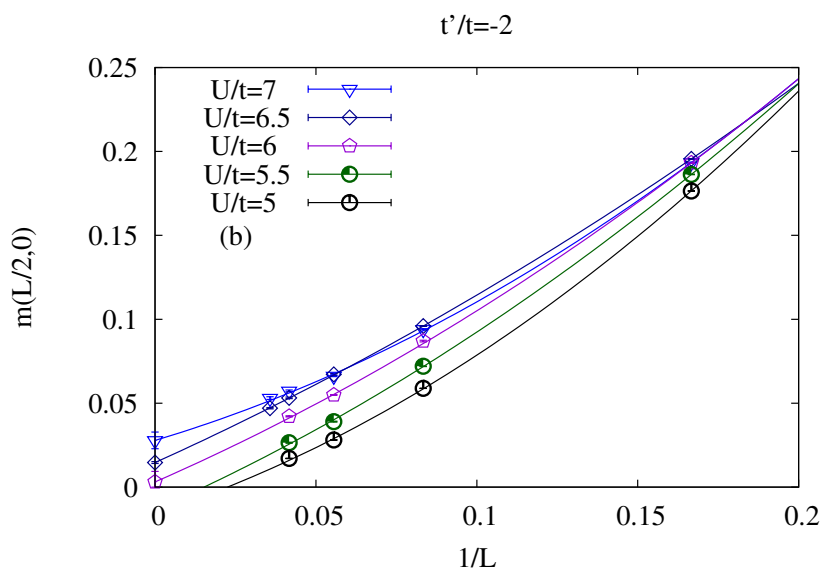


Abbildung 4.10: Mit QMC berechnetes lokales Moment der Spin-Spin Korrelationen im Ortsraum für (a) $U/t \geq 7$ und (b) $U/t \leq 7$ des flussgefüllten Quadratgitters mit $t'/t = -2$. Das lokale Moment wurde entlang der längsten Distanz in x -Richtung auf einem $L \times L$ Gitter berechnet. Durchgezogene Linien sind Fits der Form $a + b/L + c/L^2$ an die Datenpunkte.

Diese Analyse des zweiten Übergangs wird auch durch die CUT-Ergebnisse gestützt: Erstens befindet sich der Übergang zwischen VBS und Néelordnung bei $t/U \approx 0.13$ ($U/t \approx 7.69$), also $U/t \leq 8$, wo das Spinmodell gut konvergiert ist und zweitens verschwindet die Triplonlücke bei ähnlichen Werten und Impuls $\mathbf{k} = 0$. Da das Gitter eine zweielementige Einheitszelle besitzt, stimmt der Impuls mit dem der Néelordnung überein. Weiterhin ist auch der kritische Exponent $z\nu$ der Triplonlücke konsistent mit der erwarteten $O(3)$ -Universalitätsklasse, wie im nächsten Abschnitt genauer erläutert wird.

Triplonkondensation

Die Triplonkondensation wird für allgemeine $t'/t \geq -3$ untersucht, indem die mittels pCUT bestimmte Triplonlücke des effektiven Spinmodells (4.20), wie weiter oben beschrieben, bestimmt wird. Dabei wird die pCUT mit dem effektiven Spinmodell aus gCUT(6) bis Ordnung 5 durchgeführt. Höhere Ordnungen weichen von diesem Ergebnis nicht mehr stark ab, wie bereits in Abbildung 4.9 zu erkennen ist, allerdings erlaubt die pCUT₅ Rechnung mit gCUT(6) eine deutlich höhere Punktdichte, da zum einen die Bestimmung des effektiven Modells in gCUT(8) aufwendig ist und zum anderen die sechste Störungsordnung für alle Werte von t/U und t'/t einzeln durchgeführt werden muss. Die mit der dlog-Padé $D[2,2]_{\Delta}$ extrapolierten Werte für die Triplonlücke Δ , sind in Abhängigkeit von t/U und t'/t in Abbildung 4.11 aufgetragen.

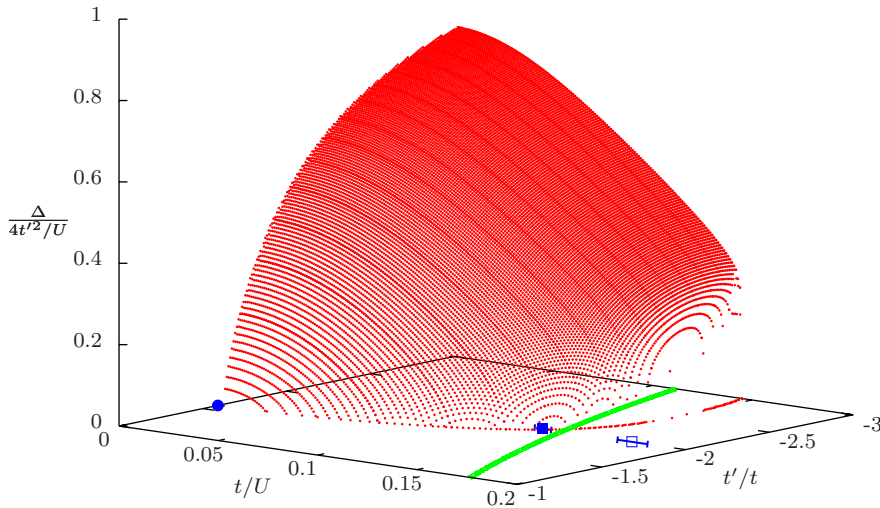


Abbildung 4.11: Mittels kombinierten CUT-Rechnungen (pCUT₅ mit gCUT(6)) bestimmte und mit dlog-Padé $D[2,2]_{\Delta}$ extrapolierte Triplonlücke Δ in Einheiten von $4t'^2/U$ als Funktion von t'/t und t/U (rote Punkte). Die durchgezogene grüne Linie stellt die charakteristische Energieskala t/W dar. Der quantenkritische Punkt für den Übergang zwischen Néelordnung und VBS [111] im Starkkopplungslimes $t/U \ll 1$ wird durch den blauen Punkt gekennzeichnet. Quadrate repräsentieren die QMC-Resultate für den Übergang des VBS zur Néelordnung (ausgefülltes blaues Quadrat) und den Übergang von der Néelordnung zum Halbmetall für $t'/t = -2$ (ungefülltes blaues Quadrat).

Für den Starkkopplungslimes $t/U \ll 1$ wird erwartet, dass die mit gCUT abgeleiteten effektiven Spinmodelle konvergiert sind und die Niederenergiephysik sollte, wie in Kapitel 4.1.1 beschrieben, durch ein J - J' Modell mit $J/J' = 1/4$ gut erfasst werden. Dennoch folgt daraus nicht, dass die Analyse der Störungsreihe einfach ist, aber in diesem Fall funktioniert sie tatsächlich sehr gut, obwohl die Störungsordnung nicht besonders groß ist. Für den quantenkritischen Punkt ergibt sich $t'/t \approx 1.6$, was mit dem QMC-Ergebnis $t'/t = \pm 1.5873$ (siehe Gleichung (4.9)) des J - J' Modells [111] gut übereinstimmt und sich auch in Abbildung 4.11 erkennen lässt. Gleichzeitig ergibt sich aus der dlog-Padé Extrapolation ein kritischer Exponent $z\nu \approx 0.73$, der nur leicht größer als der für die $O(3)$ -Universalitätsklasse erwarteten Exponenten [111, 146] von 0.7 ist. Dieses Verhalten, dass der kritische Exponent etwas zu groß ist, ist üblich für Reihenentwicklungen.

Die Resultate für $t'/t = -2$ suggerieren, dass der Zusammenbruch des Valenzbondkristalls immer zu einem Aufweichen der Eintriplonmode korrespondiert und sich so ein Quantenphasenübergang vom VBS zur Néelordnung innerhalb des Mottisolators ergibt. Deshalb ist es sinnvoll den kritischen Exponenten in Abhängigkeit von t'/t zu berechnen und zu überprüfen, ob dieser konstant ist. In Abbildung 4.12 ist der kritische Exponent $z\nu$ dargestellt und es lässt sich erkennen, dass dieser monoton von $z\nu \approx 0.73$ (bei $t'/t = -1.6$) bis fast 0 (bei $t'/t = -3$) abfällt. Dieses unphysikalische Verhalten sollte sich auf Unsicherheiten des CUT-Verfahrens zurückführen lassen, insbesondere die Trennung von Spin- und Ladungsfreiheitsgraden mittels gCUT. In der Tat liegt für $t'/t < -2$ der erwartete Quantenphasenübergang zwischen VBS und Néelordnung bei Werten von $t/U > t/W$, die größer als die inverse Bandbreite t/W sind. Wie bereits bei der Diskussion der Spinkopplungen (vergleiche Abbildung 4.4) diskutiert wurde, ist es anspruchsvoll die Spin- und Ladungsfreiheitsgrade in diesem Bereich zu trennen. Letztendlich lässt dies den Schluss zu, dass die verwendete gCUT-Implementierung für $t/U > t/W$ zusammenbricht und die Resultate nicht zuverlässig sind. Obwohl dieser Effekt vermutlich bereits für $t'/t \approx -2$ vorhanden ist, können gute Abschätzungen für den kritischen Punkt ermittelt werden. Hingegen ist der kritische Exponent eine deutlich empfindlichere Größe, weshalb die Resultate für den kritischen Exponenten auch deutlich stärker von den erwarteten Werten abweichen. Zusammenfassend kann die Eintriplonlücke in einem großen Parameterbereich des Valenzbondkristalls bestimmt werden, aber die quantenkritischen Punkte lassen sich nur für $-1.6 < t'/t < -2$ quantitativ gut beschreiben.

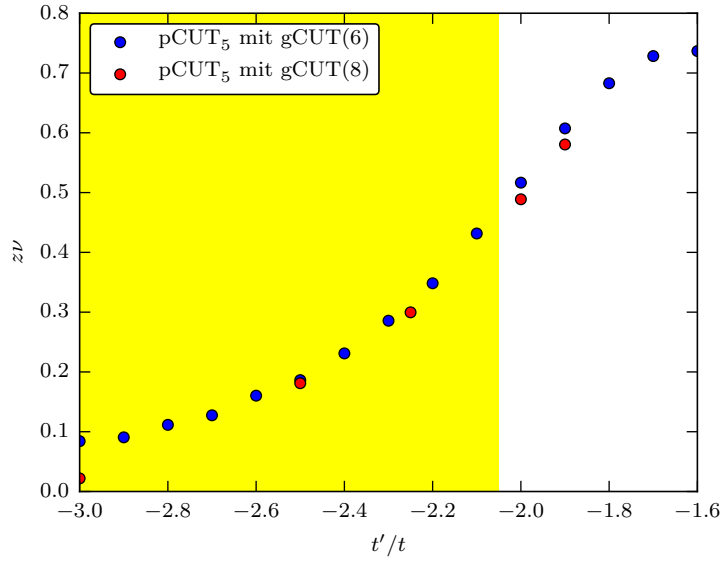


Abbildung 4.12: Mit der dlog-Padé Extrapolation aus der Triplonlücke Δ bestimmter kritischer Exponent $z\nu$ des Übergangs vom VBS zur Néelordnung in Abhängigkeit von t'/t . Für die CUT werden die beiden $gCUT(\nu)$ -Ergebnisse mit $\nu \in \{6,8\}$ gezeigt und die pCUT wurde bis Ordnung 5 durchgeführt. In dem gelben Bereich bricht der VBS bei großen Werten $t/U > t/W$ zusammen, wo die Entwicklung nicht mehr zuverlässig funktioniert.

4.1.5 Phasendiagramm und Schlussfolgerungen

Aus den mit QMC und CUT erzielten Ergebnissen (siehe Kapitel 4.1.4) lässt sich das in Abbildung 4.13 abgebildete Phasendiagramm für das Hubbardmodell auf dem flussgefüllten Quadratgitter ableiten. Es besteht aus einer halbmetallischen Phase (SM), einem magnetisch Néel-geordneten Antiferromagneten (AF), einem Valenzbondkristall und Bandisolator. Valenzbondkristall und Bandisolator sind kontinuierlich verknüpft und keine zwei verschiedenen Phasen. Die begriffliche Unterscheidung der beiden ist dennoch nützlich, wenn der Schwach- oder Starkkopplungslimes betrachtet wird. Im Schwachkopplungslimes verschmelzen die Dirackegel des Halbmetalls für $t'/t = -3$ und für kleinere $t'/t < -3$ öffnet sich eine Lücke, wodurch das Halbmetall in einen Bandisolator übergeht. Ausgehend vom Starkkopplungslimes bilden sich hingegen Singulettts auf den t' -Bonds, wenn $t'/t \lesssim -1.6$ ist. Dieser Valenzbondkristall hat Triplonen als Anregungen und bricht für $t'/t \gtrsim -1.6$ zusammen, sodass sich ein langreichweitig magnetisch geordneter Grundzustand mit lückenlosen Anregungen ergibt.

Das Phasendiagramm besitzt insgesamt die folgenden Übergänge:

1. Ein direkter Übergang von der Néelordnung zum Halbmetall für den Bereich $-1.6 \lesssim t'/t \leq 0$.
2. Ein Übergang vom Valenzbondkristall zum Bandisolator für ausreichend große Dimerisierung ($t'/t < -3$).
3. Zwei Quantenphasenübergänge vom Valenzbondkristall zur Néelordnung und von der Néelordnung zum Halbmetall im dazwischenliegenden Bereich $-3 < t'/t \lesssim -1.6$.

Insbesondere gibt es für das π -Fluss Quadratgitter ($t'/t = -1$) keine Anzeichen für eine Spinflüssigkeitsphase innerhalb des Mottisolators, wodurch die hier präsentierten Ergebnisse im Widerspruch zu den Ergebnissen aus Referenz 110 stehen.

Das CUT-Verfahren bestand aus zwei Teilen, welche gCUTs und pCUTs vereinen. Zuerst wurden die Spin- und Ladungsfreiheitsgrade mittels gCUT voneinander getrennt, um ein effektives nichtperturbativ bestimmtes Spinmodell innerhalb des Mottisolators zu erhalten. Sobald die Freiheitsgrade anfangen zu überlappen, wurde das Verfahren problematisch, welches für die größten Graphen oder große Werte von t'/t beobachtet werden konnte. Eine Verbesserung des verwendeten Generators, um die Spin- und Ladungsfreiheitsgrade für Parameterbereiche zu entkoppeln in denen die verwendete CUT versagt, aber die Niederenergiephysik noch durch Spinzustände beschrieben werden kann, wäre spannend, aber auch eine große Herausforderung. Die in dieser Arbeit verwendete Idee, die Lösung der Flussgleichung in einem Minimum der ROD zu stoppen, ist ein erster Schritt in diese Richtung, reicht offensichtlich aber noch nicht aus. Auf dieser Idee aufbauend wurde vor kurzem bereits ein verbesserter Generator vorgestellt [104], wodurch eine deutliche Verbesserung der gCUT-Methode erzielt werden kann, wenn die auf den endlichen Graphen gebrochene Translationssymmetrie zu einem energetischen Überlapp führt.

Zweitens wurde mittels pCUT für das effektive Spinmodelle die Triplonlücke als Potenzreihe abgeleitet. Es konnten durch die Einschränkung auf die relevanten Spinkopplungen, die

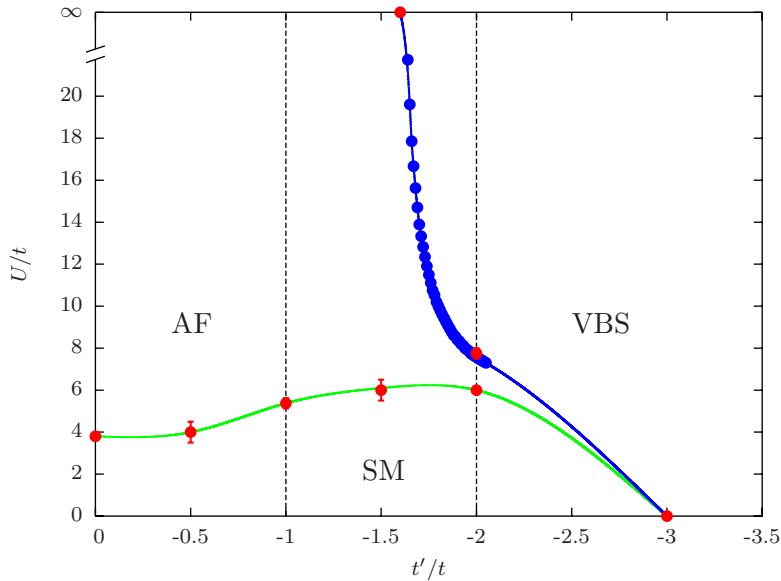


Abbildung 4.13: Phasendiagramm für den Grundzustand des flussgefüllten Quadratgitters in Abhängigkeit von t'/t und U/t . Rote Kreise sind QMC-Ergebnisse aus Referenz 40 und 153. Die blauen Kreise sind die durch die kombinierte g/pCUT-Methode gewonnenen Ergebnisse. Die durchgezogenen Linien sind Hilfslinien für die erwarteten Übergänge zwischen der antiferromagnetisch geordneten Néelphase (AF), dem Halbmetall (SM) und dem Valenzbondkristall (VBS).

auf einzelnen Quadraten definiert sind, die quantenkritischen Punkte für den Zusammenbruch des Valenzbondkristall quantitativ richtig bestimmt werden. Die präzise Bestimmung des kritischen Exponenten gestaltet sich hingegen, selbst in den Bereichen wo das Spinmodell anscheinend gut konvergiert ist, als deutlich schwieriger. Vermutlich liegt dies daran, dass in diesen t/U -Bereichen weitere Spinkopplungen, wie z.B. Sechsspinterme, eine erhöhte Wichtigkeit erlangen. Außerdem wurden die Störungsrechnungen nur bis fünfter Ordnung durchgeführt, welches keine besonders hohe Störungsordnung darstellt. Es wurde bereits gezeigt, dass die Verwendung von „weißen“ Graphen eine Optimierung der Störungsrechnung zulässt, wodurch höhere Ordnungen erreicht werden können [124]. Die Verwendung von „weißen“ Graphen bedeutet, dass die Kopplungstypen der einzelnen Graphen erst nach der Berechnung eingesetzt werden. Dazu muss allerdings während der pCUT festgehalten werden, auf welche Kopplungen die $T^{(n)}$ -Operatoren wirken. Dadurch reduziert sich jedoch die Anzahl an notwendigen Graphen deutlich und es können höhere Störungsordnungen berechnet werden. Für zukünftige Studien wäre dies ein sinnvoller Anknüpfungspunkt, um die Ergebnisse zu verfeinern.

4.2 Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter

Das Hubbardmodell [28] auf dem isotropen Dreiecksgitter realisiert bei Temperatur $T = 0$ und halber Füllung für kleine t/U eine antiferromagnetisch langreichweitig geordnete magnetische Phase, die sogenannte 120° -Ordnung [65–68]. Weiterhin wurden starke Anzeichen für einen Phasenübergang erster Ordnung von dieser magnetischen Phase zu einer exotischen nichtmagnetischen Phase – vermutlich ein lückenloses Spin-Bose-Metall – innerhalb des Mottisolators gefunden [38, 45–50]. Dabei kann dieser Phasenübergang durch ein effektives Niederenergiemodell für die Mottphase beschrieben werden und die relevanten Effekte treten schon in einem störungstheoretisch bis Ordnung 4 abgeleiteten Spinmodell auf [38]. Entscheidenden Einfluss besitzen dabei die Vierspinterme und eine Untersuchung des Spinmodells mittels exakter Diagonalisierung erfasst den Phasenübergang [38]. Der Phasenübergang zum Halbmetall für große Hüpfamplituden – wie er generisch für Hubbardmodelle vorliegt [31] – ist ebenfalls erster Ordnung [38, 47, 49, 50].

Für das Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter wird durch VCA-Rechnungen ebenfalls die Existenz einer exotischen Zwischenphase in Aussicht gestellt und es wird vorgeschlagen, dass auch hier die Vierspinterme entscheidend sind [51]. Gegenüber dem isotropen Dreiecksgitter wo der Übergang bei $t/U \approx 0.1$ auftritt [38], deuten die VCA-Rechnungen das Auftreten eines Übergangs bei noch kleineren $t/U \approx 0.07$ an [51]. Folglich sollten die Störungsreihen, die bei der Ableitung des effektiven Spinmodells auftreten, noch besser konvergiert sein. Im Unterschied zum isotropen Dreiecksgitter, wo die Übergänge zur Spinflüssigkeit und dem Halbmetall erster Ordnung sind, suggerieren die VCA-Rechnungen, dass beide Übergänge zweiter Ordnung sind [51]. Das mit der VCA in Referenz 51 bestimmte Phasendiagramm ist in Abbildung 4.14 dargestellt, aus dem unter anderem hervorgeht, dass die nichtmagnetische Zwischenphase (NMI) innerhalb des Mottisolators eine endliche Ladungslücke besitzt.

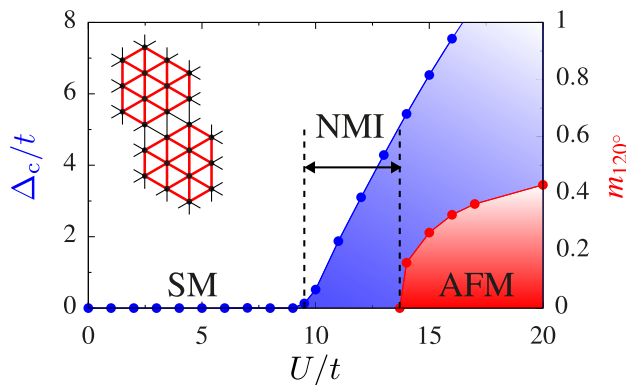


Abbildung 4.14: Mit der VCA bestimmtes Phasendiagramm für das Hubbardmodell auf dem π -Fluss Quadratgitter. m_{120° ist der Ordnungsparameter der antiferromagnetisch geordneten Néelphase (AFM) und Δ_c/t ist die Ladungslücke. Die VCA suggeriert, dass die Übergänge zwischen dem Halbmetall (SM), der nichtmagnetischen isolierenden Phase (NMI) und der Néelphase (AFM) zweiter Ordnung sind. Diese Abbildung wurde aus Referenz 51 entnommen.

In dieser Arbeit wird ein, mithilfe von perturbativen kontinuierlichen unitären Transformationen im Starkkopplungslimes abgeleitetes, effektives Spinmodell bis Ordnung 6 vorgestellt. Untersucht wird hingegen das Spinmodell in Ordnung 4, da, wie bereits angemerkt, die relevante Physik hier bereits erfasst sein sollte.

Die Analyse des Spinmodells in vierter Ordnung wird mit exakter Diagonalisierung (ED) auf einem großen endlichen Cluster durchgeführt. Dabei lassen sich keine Anzeichen für die Existenz einer Zwischenphase finden. Deshalb wurde noch ein reines Heisenbergmodell mit Vierspintermen (J_1 - J_4 Modell) untersucht, bei dem allerdings ebenfalls keine Anzeichen für eine Zwischenphase vorliegen. Dies steht im Gegensatz zum isotropen Dreiecksgitter, wo der Phasenübergang zur Spinflüssigkeitsphase durch genau diese Vierspinterme getrieben wird. Demzufolge stellt sich die Frage, ob ein anderer Mechanismus die Ausbildung einer Spinflüssigkeitsphase auf dem π -Fluss Dreiecksgitter antreibt.

Für das Heisenbergmodell mit übernächstnachbar Kopplungen (J_1 - J_2 Modell) wird bereits seit langem über die Natur der Phase zwischen der 120° -Ordnung und einer Streifenordnung (von engl. *striped order*) diskutiert [52–57, 78–80]. Während erste Arbeiten bereits einen Spin-ungeordneten Zustand (engl. *spin disordered state*) gefunden haben [78–80], so deuten neuere numerische Arbeiten auf die Existenz einer Spinflüssigkeitsphase hin [52–57]. Auch wenn diese Spinflüssigkeit vermutlich ausgebildet wird, so ist die tatsächliche Art ebendieser noch nicht abschließend geklärt. Das liegt daran, dass die Charakterisierung dieser Phase sehr subtil ist. Auch wenn das J_1 - J_2 Modell in Referenz 57 mit exakter Diagonalisierung untersucht wurde, so wurde diese mit einer variationellen Wellenfunktion verglichen, um Aussagen über die Natur der Spinflüssigkeit zu treffen.

Da das effektive Spinmodell für das Hubbardmodell ebenfalls einen übernächstnachbar Term aufweist, könnte es sein, dass die mit der VCA gefundene Zwischenphase zu der Spinflüssigkeit im J_1 - J_2 Modell korrespondiert. Aus diesem Grund wird das J_1 - J_2 Heisenbergmodell in dieser Arbeit ebenfalls untersucht und die Ergebnisse aus Referenz 57 können reproduziert werden. Der ermittelte Wert von J_2/J_1 für den Phasenübergang zur Spinflüssigkeit, entspricht allerdings recht großen Werten von t/U im Hubbardmodell, bei denen die Störungsreihen vermutlich nicht mehr konvergiert sind. Demzufolge sollten die Vierspinterme zusammen mit den übernächstnachbar-Termen die Ausbildung der Spinflüssigkeit weiter begünstigen, damit die Interpretation schlüssig ist.

Als erstes wird nun das effektive Spinmodell bis Ordnung 6 angegeben und anschließend das effektive Spinmodell in vierter Ordnung mittels exakter Diagonalisierung untersucht. Im Anschluss daran werden das J_1 - J_4 sowie das J_1 - J_2 Modell unabhängig vom Hubbardmodell untersucht.

4.2.1 Effektives Spinmodell

Mittels Graphenentwicklung und pCUT (siehe Kapitel 2) kann ein effektives Niederenergiemodell für das halbgefüllte Hubbardmodell (4.1) bei Temperatur $T = 0$ auf dem in Abbildung 4.15 dargestellten π -Fluss Dreiecksgitter abgeleitet werden. Dazu wird die pCUT auf allen Graphen $\mathcal{G}_\nu^{(i)}$ durchgeführt und liefert ein effektives Spinmodell $H_{\text{eff}}^{\mathcal{G}_\nu^{(i)}}$. Der Index

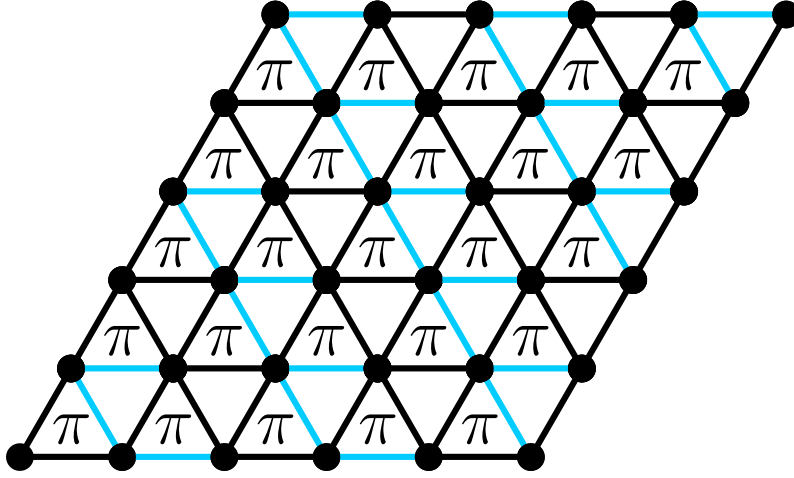


Abbildung 4.15: Ausschnitt aus dem π -Fluss Dreiecksgitter. Schwarze Kreise symbolisieren die Gitterplätze, während schwarze Linien die Kopplung t und blaue Linien die Kopplung $-t$ darstellen, wodurch sich ein π -Fluss in jedem zweiten Dreieck ergibt.

ν bezeichnet dabei die erste Störungsordnung bei der der reduzierte Beitrag (vergleiche Definition 10)

$$H_{\text{eff,red}}^{\mathcal{G}_\nu^{(i)}} := H_{\text{eff}}^{\mathcal{G}_\nu^{(i)}} - \sum_{\mathcal{G} \subset \mathcal{G}_\nu^{(i)}} H_{\text{eff,red}}^{\mathcal{G}} \quad (4.38)$$

nicht verschwindet und i nummeriert alle Graphen derselben Störungsordnung durch.

Wie bereits in Kapitel 4.1 über das Hubbardmodell auf dem flussgefüllten Quadratgitter erläutert wurde, wird durch das Lösen des Gleichungssystems

$$\langle i | H_{\text{eff}}^{\mathcal{G}_\nu^{(i)}} | j \rangle = \langle i | H_{\text{spin}}^{\mathcal{G}_\nu^{(i)}} | j \rangle \quad (4.39)$$

mit $H_{\text{spin}}^{\mathcal{G}}$ aus Gleichung (4.11) ein effektives Spinmodell in zweiter Quantisierung bestimmt. Im Gegensatz zu den Ergebnissen aus Kapitel 4.1 liegen die Spinkopplungen jedoch als Störungsreihe in t/U vor. Analog zu Gleichung (4.38) können auch die reduzierten Beiträge

$$H_{\text{spin,red}}^{\mathcal{G}_\nu^{(i)}} := H_{\text{spin}}^{\mathcal{G}_\nu^{(i)}} - \sum_{\mathcal{G} \subset \mathcal{G}_\nu^{(i)}} H_{\text{spin,red}}^{\mathcal{G}} \quad (4.40)$$

bestimmt werden. Durch Einbetten der reduzierten Beiträge kann dann ebenfalls das Spinmodell H_{spin} im thermodynamischen Limes bestimmt werden.

Mithilfe der pCUT wurde das effektive Spinmodell bis Ordnung $\nu = 6$ abgeleitet. Für das isotrope Dreiecksgitter wurde bereits gezeigt, dass die Quantenspinflüssigkeitsphase insbesondere durch die Vierspinwechselwirkungen beschrieben werden kann [38], weshalb für das π -Fluss Dreiecksgitter eine ähnliche Erwartungshaltung vorliegt. Angegeben werden nur die Operatoren, welche bereits in vierter Ordnung auftreten, die Kopplungen werden

aber bis Ordnung 6 angegeben. Das effektive Spinmodell für das Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter lautet dann

$$\begin{aligned}
 H_{\text{spin}} = & E_0 \cdot N + J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + J_3 \sum_{\langle\langle\langle i,j \rangle\rangle\rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \\
 & + \sum_{i,j,k,l \in \square} J_{\parallel} ((\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j) (\mathbf{S}_k \mathbf{S}_l) + J_{=} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_k) (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_l) + J_{\times} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_l) (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_k)) \quad (4.41)
 \end{aligned}$$

mit den Kopplungen

$$E_0 = -3 \frac{t^2}{U} - 6 \frac{t^4}{U^3} - \frac{561}{4} \frac{t^6}{U^5} \quad (4.42)$$

$$J_1 = 4 \frac{t^2}{U} + 12 \frac{t^4}{U^3} + 66 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.43)$$

$$J_2 = 12 \frac{t^4}{U^3} + 276 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.44)$$

$$J_3 = 4 \frac{t^4}{U^3} + 163 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.45)$$

$$J_{\parallel} = -80 \frac{t^4}{U^3} - 408 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.46)$$

$$J_{=} = -80 \frac{t^4}{U^3} - 408 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.47)$$

$$J_{\times} = 80 \frac{t^4}{U^3} + 296 \frac{t^6}{U^5} . \quad (4.48)$$

Die Kopplungen des effektiven Spinmodells für das Hubbardmodell auf dem isotropen Dreiecksgitter wurden ebenfalls abgeleitet und lauten bis Ordnung 6 (in Referenz 38 wurde das Spinmodell bis Ordnung 12 abgeleitet)

$$E_0 = -3 \frac{t^2}{U} - \frac{543}{4} \frac{t^6}{U^5} \quad (4.49)$$

$$J_1 = 4 \frac{t^2}{U} - 28 \frac{t^4}{U^3} + 406 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.50)$$

$$J_2 = 4 \frac{t^4}{U^3} + 288 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.51)$$

$$J_3 = 4 \frac{t^4}{U^3} + 149 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.52)$$

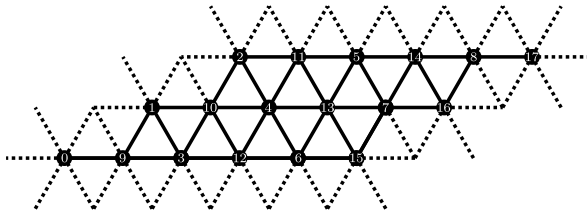
$$J_{\parallel} = 80 \frac{t^4}{U^3} - 1560 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.53)$$

$$J_{=} = 80 \frac{t^4}{U^3} - 1560 \frac{t^6}{U^5} \quad (4.54)$$

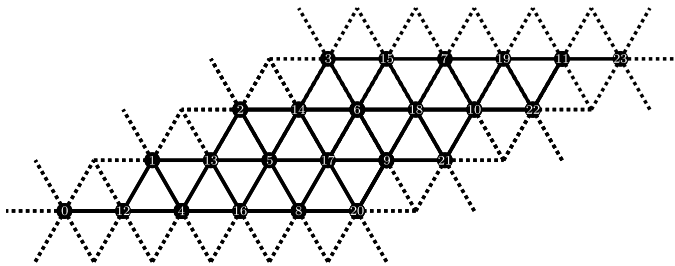
$$J_{\times} = -80 \frac{t^4}{U^3} + 300 \frac{t^6}{U^5} . \quad (4.55)$$

Die wichtigsten Unterschiede des effektiven Spinmodells für das π -Fluss Dreiecksgitter zum isotropen Dreiecksgitter ist das umgekehrte Vorzeichen vor den Vierspintermen in Ordnung 4 und die, ebenfalls in Ordnung 4, um einen Faktor 3 größere Übernächstnachbarkopplung J_2 .

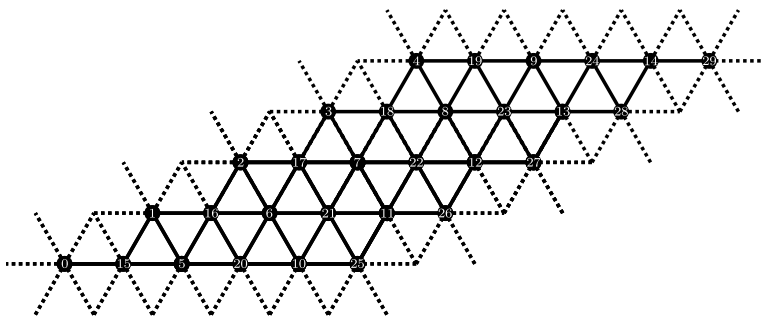
(a) Cluster mit 18 Gitterplätzen



(b) Cluster mit 24 Gitterplätzen



(c) Cluster mit 30 Gitterplätzen



(d) Cluster mit 36 Gitterplätzen

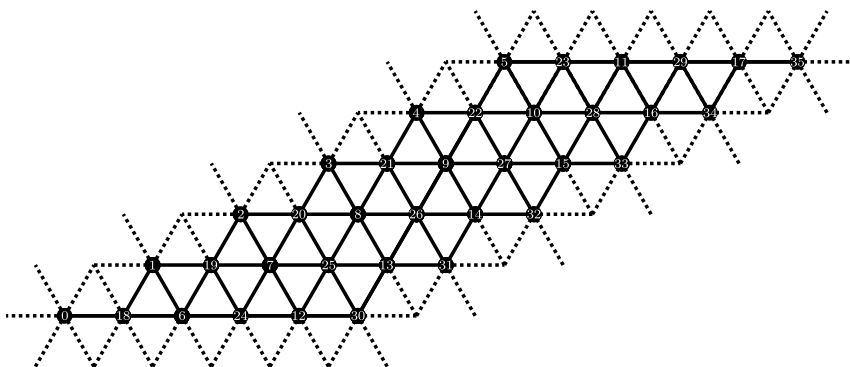


Abbildung 4.16: Für die ED verwendete Cluster mit (a) 18, (b) 24, (c) 30 und (d) 36 Gitterplätzen. Die gestrichelten Linien deuten die Periodizität an.

4.2.2 ED für das effektive Ordnung 4 Spinmodell

Als erstes wird das komplette effektive Spinmodell (4.41) in Ordnung 4 mit der in Kapitel 3 beschriebenen Methode zur exakten Diagonalisierung untersucht. Zuerst wird dazu ein kleiner Cluster mit 18 Gitterplätzen für sowohl das isotrope als auch das π -Fluss Dreiecksgitter betrachtet, um die Unterschiede beider Modelle deutlich zu machen. Darauffolgend wird dann das effektive Spinmodell des Hubbardmodells auf dem π -Fluss Dreiecksgitter auf einem aus 36 Gitterplätzen bestehenden Cluster mit exakter Diagonalisierung untersucht.

Ein Vergleich des Energiespektrums zwischen dem isotropen und π -Fluss Quadratgitter, für den in Abbildung 4.16 (a) dargestellten Cluster mit 18 Gitterplätzen, ist Abbildung 4.17 zu entnehmen. Dabei wird der jeweils niedrigste Eigenwert in allen Symmetriesektoren mit $\mathbf{k} \in \{0, \dots, 5\} \times \{0, 1, 2\}$, $f \in \{-1, 1\}$ und $S^z \in \{0, 1\}$ gezeigt. Es lässt sich für das isotrope Dreiecksgitter (siehe linke Seite in Abbildung 4.17) eindeutig erkennen, dass für $t/U \approx 0.1$ ein Phasenübergang erster Ordnung stattfindet. Dieser korrespondiert zu dem Übergang zur Spinflüssigkeit und lässt sich bereits auf diesem kleinen Cluster mit 18 Gitterplätzen erkennen. Für das π -Fluss Dreiecksgitter (siehe rechte Seite in Abbildung 4.17) ist hingegen ein sehr glattes Verhalten erkennbar und auch die zweite Ableitung der Grundzustandsenergie in Abbildung 4.18 weist keinerlei Indizien für einen Phasenübergang auf.

Sowohl für die 120° -Ordnung als auch für die symmetrieungebrochene Spinflüssigkeitsphase wird erwartet, dass der Grundzustand auf endlichen Systemen im Symmetriesektor mit

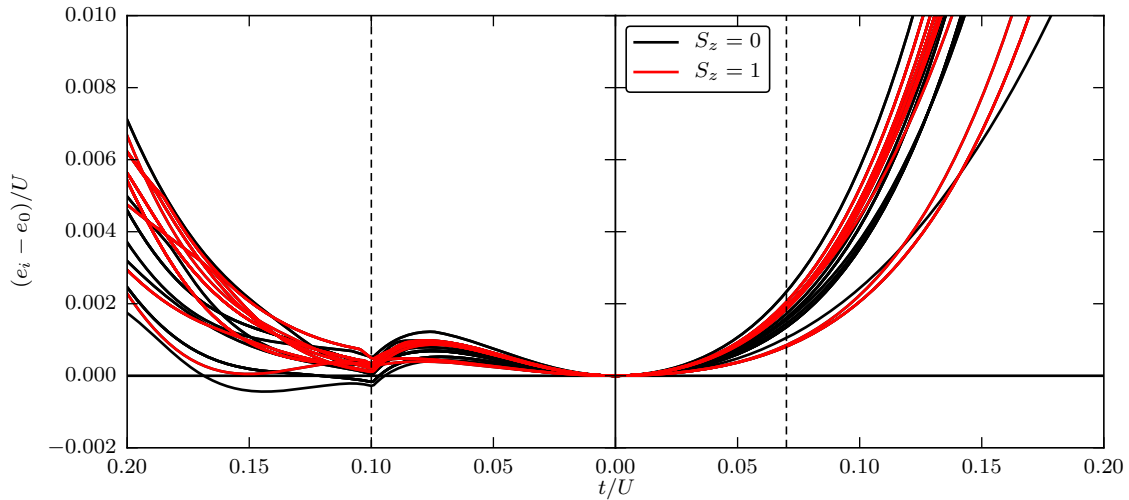


Abbildung 4.17: Energiedifferenz $(e_i - e_0)/U$ zur Grundzustandsenergie pro Gitterplatz für das effektive Spinmodell in Ordnung 4 des Hubbardmodells auf dem isotropen Dreiecksgitter (links) und dem π -Fluss Dreiecksgitter (rechts). Die Energieeigenwerte e_i wurden mit exakter Diagonalisierung auf einem Cluster mit 18 Gitterplätzen berechnet. Gezeigt sind die niedrigsten Eigenwerte aus sämtlichen Symmetriesektoren mit $\mathbf{k} \in \{0, \dots, 5\} \times \{0, 1, 2\}$ und $f \in \{-1, 1\}$ für $S^z = 0$ (schwarze Linien) und $S^z = 1$ (rote Linien). Die vertikalen gestrichelten Linien sind die mit ED [38] (isotropes Dreiecksgitter) und der VCA [51] (π -Fluss Dreiecksgitter) ermittelten ungefähren Positionen des Phasenübergangs zur Spinflüssigkeit.

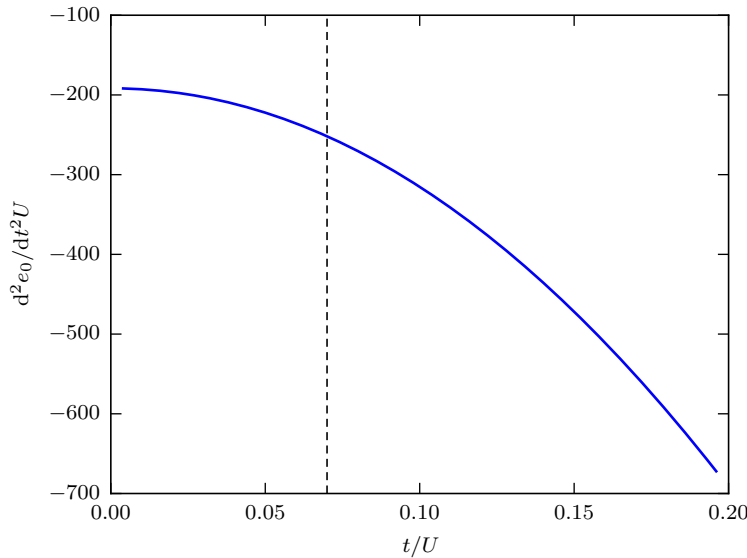


Abbildung 4.18: Zweite Ableitung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz des effektiven Spinmodells in Ordnung 4 des Hubbardmodells auf dem π -Fluss Dreiecksgitter. Die Grundzustandsenergie e_0 wurde mit exakter Diagonalisierung auf einem Cluster mit 18 Gitterplätzen berechnet. Die vertikale gestrichelte Linie ist die mit der VCA [51] ermittelte ungefähre Position des Phasenübergangs zur Spinflüssigkeit.

$\mathbf{k} = 0$ liegt. Zusätzlich ist der Grundzustand auf endlichen Clustern auch ein Singulett [154], sodass bei Ausnutzung der S^z -Symmetrie dieser $S^z = 0$ besitzt. Für den Cluster mit 36 Gitterplätzen (vergleiche Abbildung 4.16 (d)) wird sich deshalb auf $\mathbf{k} = 0$, $S^z = 0$ und die beiden niedrigsten Eigenwerte beider Spin-Flip Sektoren ($f = -1$ und $f = 1$) beschränkt. Abbildung 4.19 (a) zeigt die Energiedifferenzen $(e_i - e_0)/U$ zur Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0 für den Cluster mit 36 Gitterplätzen. Aus der Grundzustandsenergie, sowie den gezeigten Anregungen, lassen sich keine Hinweise für die Existenz einer Spinflüssigkeitsphase ableiten. Das einzige auffällige Merkmal ist eine Energieniveauekreuzung des kleinsten Energieeigenwertes im Symmetriesektor mit $f = -1$ und der ersten Anregung im Symmetriesektor mit $f = 1$ bei $t/U \approx 0.29$. Diese liegt allerdings bei sehr großen Werten von t/U – bei denen die Reihen vermutlich nicht mehr konvergiert sind – und gemäß den VCA-Rechnungen befindet sich hier bereits das Halbmetall. Die in Abbildung 4.19 (b) gezeigte zweite Ableitung der Grundzustandsenergie ist ebenfalls sehr glatt und weist keinerlei Resonanzen oder andere besondere Merkmale auf.

Da für das Spinmodell (4.41) in Abhängigkeit von t/U keine Anzeichen für die Existenz einer Spinflüssigkeitsphase auf dem π -Fluss Dreiecksgitter gefunden wurden, soll nun das entsprechende Spinmodell unabhängig vom Hubbardmodell diskutiert werden. Für das isotrope Dreiecksgitter wurde bereits gezeigt, dass die Spinflüssigkeitsphase maßgeblich von den Vierspintermen angetrieben wird [38] und auch für das π -Fluss Dreiecksgitter wurde ein ähnliches Szenario vorgeschlagen [51]. Als nächstes wird deshalb ein J_1 - J_4 Modell diskutiert, bei dem die Vierspinnkopplungen auf $J_4 = -J_{\parallel} = -J_{=} = J_{\times}$ gesetzt werden und

nicht mehr als Reihe in t/U angesehen, sondern als unabhängige Parameter betrachtet werden.

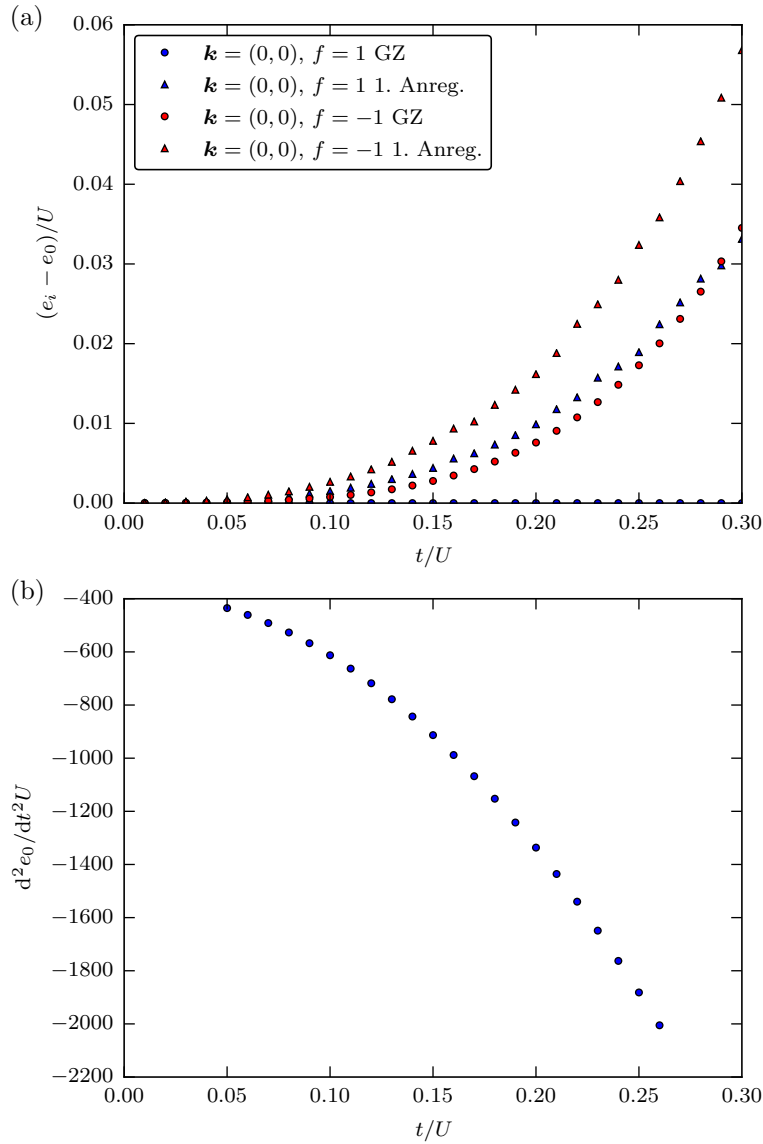


Abbildung 4.19: (a) Energiedifferenz $(e_i - e_0)/U$ zur Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0 für das effektive Ordnung 4 Spinmodell des Hubbardmodells auf dem π -Fluss Quadratgitter für die niedrigsten beiden Eigenwerte (GZ und 1. Anregung im jeweiligen Symmetriesektor) der Symmetriesektoren mit $\mathbf{k} = (0,0)$, $S^z = 0$ und $f \in \{-1,1\}$ sowie (b) zweite Ableitung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0 . Die Energieeigenwerte e_i wurden mit exakter Diagonalisierung auf einem Cluster mit 36 Gitterplätzen berechnet. Es ist zu beachten, dass nur der niedrigsten Eigenwert in jedem Symmetriesektor konvergiert ist, während die nächsthöheren Eigenwerte numerischen Ungenauigkeiten unterworfen sind.

4.2.3 J_1 - J_4 Modell

Der Hamiltonoperator des hier betrachteten J_1 - J_4 Modells lautet

$$\begin{aligned}
 H_{J_1-J_4} = & J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \\
 & - J_4 \sum_{i,j,k,l \in \mathbb{N}} ((\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j) (\mathbf{S}_k \mathbf{S}_l) + (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_k) (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_l) - (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_l) (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_k))
 \end{aligned} \tag{4.56}$$

mit $J_1, J_4 > 0$. Das negative Vorzeichen von J_4 folgt aus dem effektiven Spinmodell des Hubbardmodells auf dem π -Fluss Quadratgitter (siehe Gleichungen (4.41) bis (4.48)).

Zusätzlich zu den bereits im vorangegangenen Unterkapitel betrachteten Clustern mit 18 und 36 Gitterplätzen, werden in diesem Unterkapitel auch die in Abbildung 4.16 (b) und (c) dargestellten Cluster mit 24 und 30 Gitterplätzen untersucht. Als erstes wird die in Abbildung 4.20 (a) dargestellte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J_1 sowie ihre in Abbildung 4.20 (b) gezeigte zweite Ableitung diskutiert. Beide Größen zeigen keinerlei Auffälligkeiten im betrachteten Parameterbereich und sind damit konsistent zu den Ergebnissen aus dem vorherigen Unterkapitel 4.2.2. Während der Grundzustand bei allen Clustern bei $\mathbf{k} = 0$ und $S^z = 0$ liegt, so ist ein Paritätseffekt bei der Spin-Flip Symmetrie erkennbar: Für die Cluster mit 18 und 30 Gitterplätzen besitzt der Grundzustand $f = -1$, während er für die Cluster mit 24 und 36 Gitterplätzen $f = 1$ besitzt.

Um festzustellen welche Korrelationen auf den Clustern vorhanden sind, wird der Spinstrukturfaktor

$$S^{zz}(\mathbf{q}) := \frac{1}{N} \sum_{i,j=0}^{N-1} e^{2\pi i \left(\frac{q_x \cdot (x_i - x_j)}{x_{\max}} + \frac{q_y \cdot (y_i - y_j)}{y_{\max}} \right)} \langle S_i^z S_j^z \rangle \tag{4.57}$$

mit dem Impulsvektor $\mathbf{q} = (q_x, q_y)^T$ und den Koordinaten (x_i, y_i) des Spins am Gitterplatz i (vergleiche auch mit der Fouriertransformation in Gleichung (3.30)) berechnet. Der Spinstrukturfaktor (4.57) erlaubt die Detektion langreichweitiger Spinordnung. Da für kleine J_4/J_1 das Spinmodell eine langreichweitige antiferromagnetische 120° -Ordnung ausbildet, kann durch die Untersuchung des Spinstrukturfaktors untersucht werden, ob die Ordnung verschwindet.

Für alle betrachteten Cluster ist der Spinstrukturfaktor bei $\mathbf{q} = (2,0)$ und $\mathbf{q} = (4,0)$ maximal, welches, bei der hier getroffenen Clusterwahl, dem Impuls der 120° -Ordnung entspricht. In Anhang B.1 sind die Spinstrukturfaktoren $S^{zz}(\mathbf{q})$ für alle \mathbf{q} und alle Cluster in den Abbildung B.1 und B.2 dargestellt. Abbildung 4.21 zeigt den Spinstrukturfaktor pro Gitterplatz $S^{zz}(\mathbf{q} = (2,0))/N$ ausgewertet beim Impuls $\mathbf{q} = (2,0)$ der 120° -Ordnung. Dieser sollte mit wachsender Clustergröße in der geordneten Néelphase gegen einen festen Wert konvergieren. Wird angenommen, dass der Paritätseffekt für die Spin-Flip Symmetrie auch einen Paritätseffekt für diese Konvergenz besitzt, so lässt sich erkennen, dass die beiden Cluster mit 24 und 36 Gitterplätzen für kleine J_4/J_1 sehr ähnliche Werte für $S^{zz}(\mathbf{q} = (2,0))/N$ liefern. Bemerkenswert ist jedoch, dass $S^{zz}(\mathbf{q} = (2,0))/N$ mit wachsendem J_4/J_1 kaum abfällt, wie es bei einem Phasenübergang in eine ungeordnete Phase zu

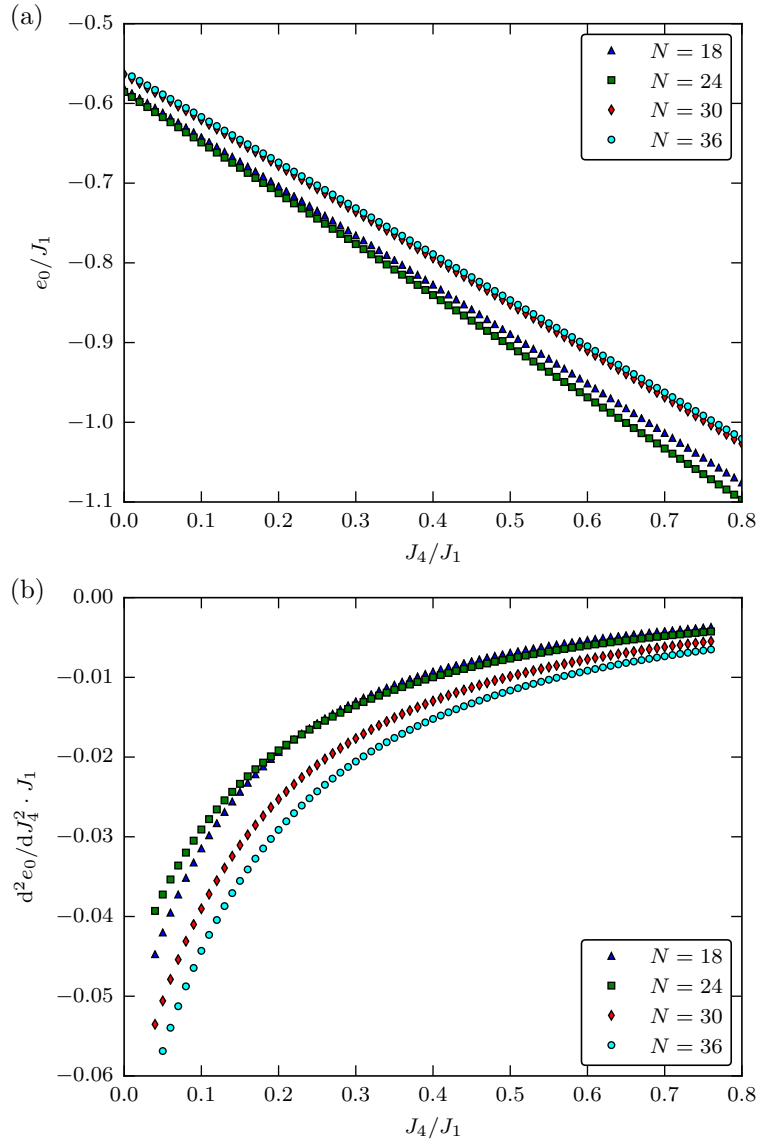


Abbildung 4.20: (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J_1 und (b) zweite Ableitung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz für verschiedene Clustergrößen N in Abhängigkeit von J_4/J_1 für das J_1 - J_4 Modell.

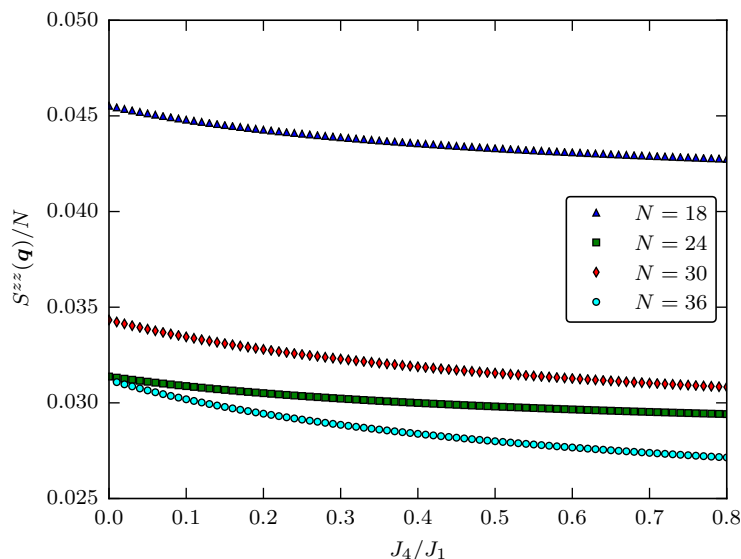


Abbildung 4.21: Spinstrukturfaktor $S^{zz}(\mathbf{q} = (2,0))/N$ pro Gitterplatz beim Impuls der 120° -Ordnung in Abhängigkeit von J_4/J_1 für verschiedene Clustergrößen N .

erwarten wäre. Insbesondere deuten die Ergebnisse darauf hin, dass die Vierspinterme auf dem π -Fluss Dreiecksgitter der 120° -Ordnung nicht entgegenwirken. Dies lässt sich für klassische Spins anschaulich verstehen. Im klassischen Limes wurde die klassische Energie der 120° -Ordnung für ein J_1 - J_4 Modell bereits bestimmt [155, 156]. In den hier angegebenen Parametern lautet sie dann

$$e_{120^\circ} = -\frac{3}{8}J_1 - \frac{3}{16}J_4 \quad (4.58)$$

und es ist erkennbar, dass für den dem π -Fluss Dreiecksgitter entsprechenden Fall $J_4 > 0$, die Vierspinterme die Energie der 120° -Ordnung weiter absenken, während für $J_4 < 0$, welches dem isotropen Dreiecksgitter entspricht, die Energie angehoben wird. Von einem klassischen Standpunkt aus betrachtet, ist es daher plausibel, dass die Vierspinterme der 120° -Ordnung nicht entgegenwirken. Es kann allerdings sein, dass die Vierspinterme eine andere Phase noch stärker begünstigen als die 120° -Ordnung, welches hier nicht weiter untersucht wird.

Nun sollen – analog zum effektiven Ordnung 4 Spinmodell – die niedrigsten beiden Eigenwerte in den beiden Spin-Flip Sektoren bei $\mathbf{k} = 0$ und $S^z = 0$ auf dem Cluster mit 36 Gitterplätzen betrachtet werden. Es ergeben sich die in Abbildung 4.22 dargestellten Energiedifferenzen bezüglich der Grundzustandsenergie. In Übereinstimmung mit den bisherigen Ergebnissen lassen sich auch hier keine Indizien für einen Quantenphasenübergang finden.

Zusammenfassend sind sämtliche hier präsentierten Ergebnisse mit der Abwesenheit einer Spinflüssigkeitsphase im reinen J_1 - J_4 Modell konsistent. Da die Identifizierung einer Spinflüssigkeit äußerst subtil ist und vor allem die untersuchten Cluster noch zu klein

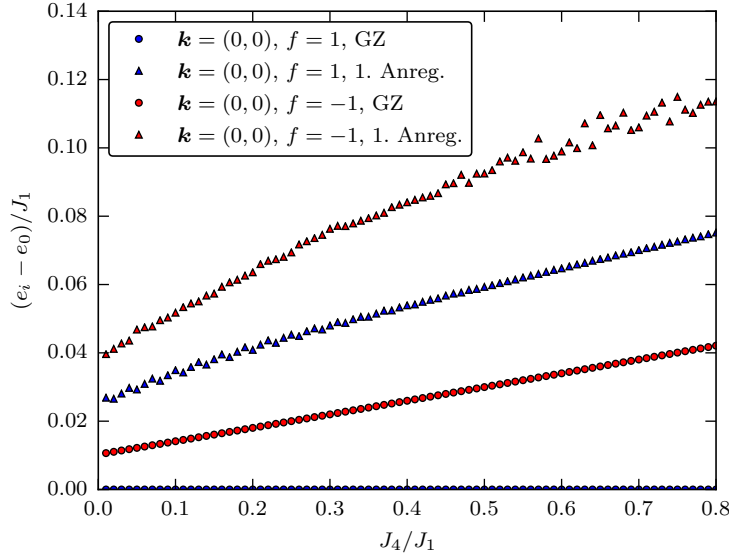


Abbildung 4.22: Energiedifferenz $(e_i - e_0)/J_1$ zur Grundzustandsenergie pro Gitterplatz für das J_1 - J_4 Modell für die niedrigsten beiden Eigenwerte (GZ und 1. Anregung im jeweiligen Symmetriesektor) der Symmetriesektoren mit $\mathbf{k} = (0,0)$, $S^z = 0$ und $f \in \{-1,1\}$. Die Energieeigenwerte e_i wurden mit exakter Diagonalisierung auf einem Cluster mit 36 Gitterplätzen berechnet. Es ist zu beachten, dass nur der niedrigsten Eigenwert in jedem Symmetriesektor konvergiert ist, während die nächsthöheren Eigenwerte numerischen Ungenauigkeiten unterworfen sind.

sein könnten, kann natürlich nicht ausgeschlossen werden, dass eine solche Phase auch im J_1 - J_4 Modell existiert. Es wurden ebenfalls nur einige Symmetriesektoren betrachtet, wodurch Änderungen im Anregungsspektrum eventuell nicht erkannt werden. Die Frage, die sich nun stellt, ist, ob ein anderer Mechanismus als die Vierspinwechselwirkungen für die Ausbildung einer Quantenspinflüssigkeitsphase im Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter verantwortlich ist. Zu diesem Zweck wird im nächsten Unterkapitel das J_1 - J_2 Modell untersucht.

4.2.4 J_1 - J_2 Modell

Es gibt starke Anzeichen dafür, dass das J_1 - J_2 Modell

$$H_{J_1-J_2} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (4.59)$$

auf dem Dreiecksgitter eine Spinflüssigkeitsphase besitzt [52–57]. Insbesondere konnte diese Phase durch einen Vergleich zwischen exakter Diagonalisierung und variationellen Wellenfunktionen im Bereich $0.08 \lesssim J_2/J_1 \lesssim 0.16$ nachgewiesen werden [57]. In Abbildung 4.23 findet sich das aus Referenz 57 entnommene Energiespektrum des Clusters mit 36 Gitterplätzen. Sollte die mit der VCA gefundene nichtmagnetische Zwischenphase der Spinflüssigkeit des J_1 - J_2 Modells entsprechen, so würde sich – wenn nur die Kopplungen J_1 und J_2

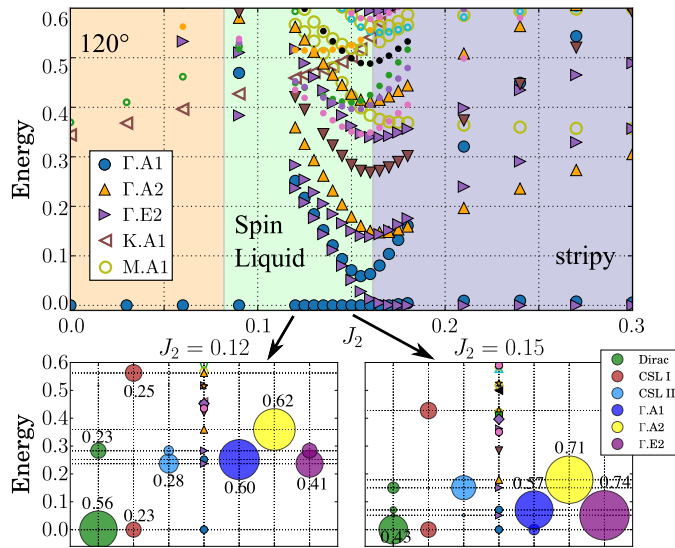


Abbildung 4.23: *Oberer Teil:* ED Spektrum des J_1 - J_2 Modells auf dem Cluster mit 36 Gitterplätzen für verschiedene Symmetriesektoren (unterschiedlich farbige Symbole) und $J_1 = 1$. Die Symmetriesektoren werden durch Γ , K und M für die entsprechenden Punkte in der ersten Brillouinzone sowie A1, A2 und E2 für die zugehörigen Punktgruppen bezeichnet. Gefüllte (ungefüllte) Symbole gehören zu geraden (ungeraden) Spinsektoren. Die ermittelten Phasenbereiche sind durch einen unterschiedlich farbigen Hintergrund dargestellt. *Unterer Teil:* Spektralzerlegung für verschiedene Wellenfunktionen $|\psi_{\text{Model}}\rangle$ für $J_2 = 0.12$ (linker unterer Teil) und $J_2 = 0.15$ (rechter unterer Teil). Der Durchmesser der Kreise entspricht dem quadratischen Überlapp $|\langle\psi_{\text{ED}}|\psi_{\text{Model}}\rangle|^2$ zwischen dem mit ED bestimmten Eigenzustand $|\psi_{\text{ED}}\rangle$ und $|\psi_{\text{Model}}\rangle$. Es wurden variationelle Wellenfunktionen für eine Dirac Spinflüssigkeit, chirale Spinflüssigkeit (CSL) sowie die Grundzustände im entsprechenden Symmetriesektor (Γ .A1, Γ .A2, Γ .E2) bei $J_2 = 0.3$ verwendet. Diese Abbildung wurde aus Referenz 57 entnommen, wo sich auch detaillierte Ausführungen finden lassen.

im effektiven Spinmodell betrachtet werden – mit den Spinkopplungen (4.43) und (4.44) in vierter Ordnung der Bereich

$$0.08 \lesssim \frac{J_2}{J_1} \lesssim 0.16 \quad (4.60)$$

$$\Leftrightarrow 0.08 \lesssim \frac{4\frac{t^4}{U^3}}{4\frac{t^2}{U} + 12\frac{t^4}{U^3}} \lesssim 0.16 \quad (4.61)$$

$$\Leftrightarrow 0.17 \lesssim \frac{t}{U} \lesssim 0.25 \quad (4.62)$$

ergeben. Dieser Bereich liegt bei sehr großen t/U -Werten, bei denen das Spinmodell üblicherweise nicht mehr konvergiert ist. Demzufolge sollten die anderen Kopplungen des effektiven Spinmodells oder höhere Ordnungen den Bereich zu kleineren Werten von t/U verschieben, sofern dies der gesuchte Übergang ist.

In diesem Unterkapitel soll nun die in Kapitel 3 beschriebene Methode zur exakten Diagonalisierung auf das J_1 - J_2 Modell angewendet werden und anschließend der Einfluss von zu-

sätzlichen Vierspinnkopplungen untersucht werden. Der dafür verwendete periodische Cluster besteht aus 36 Gitterplätzen und ist in Abbildung 4.16 (d) dargestellt. Während in Referenz 57 auch Raumsymmetrien für die exakte Diagonalisierung ausgenutzt werden, wird in dieser Arbeit nur die Translations-, Spin-Flip und S^z -Symmetrie ausgenutzt. Für jeden Symmetriesektor – das heißt festes \mathbf{k} , f und S^z – werden dann die niedrigsten Eigenwerte bestimmt. Die Energiedifferenz dieser Eigenwerte zur Grundzustandsenergie, welche bei $\mathbf{k} = 0$ und $f = 1$ liegt, ist in Abbildung 4.24 eingetragen. Ein Vergleich von Abbildung 4.24 mit Abbildung 4.23 zeigt, dass die grundlegenden Merkmale des Energiespektrums reproduziert werden.

Da nur der Sektor mit $S^z = 0$ betrachtet wird und deutlich weniger Symmetrien ausgenutzt werden, sind in Abbildung 4.24 zum Teil andere Energien gezeigt als in Abbildung 4.23. Dennoch kann insbesondere ein Phasenübergang erster Ordnung zur gestreiften Phase identifiziert werden. Bemerkenswert ist auch, dass bei $J_2/J_1 \approx 0.07$ sich das Anregungsspektrum deutlich verändert. Dies könnte auf den Übergang zur Spinflüssigkeit zurückzuführen sein, für eine genauere Analyse müsste allerdings untersucht werden, ob der sogenannte Tower of States [120, 157] vorliegt, wozu höhere S^z -Sektoren berechnet werden müssten.

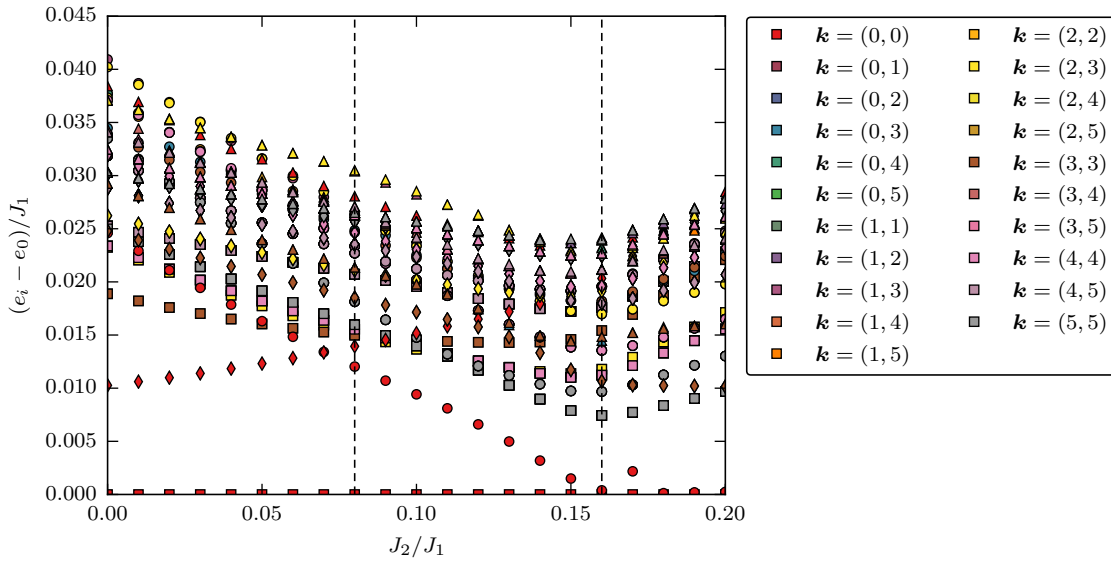


Abbildung 4.24: Energiedifferenz $(e_i - e_0)/J_1$ zur Grundzustandsenergie pro Gitterplatz für das J_1 - J_2 Modell für die niedrigsten beiden Eigenwerte aller Symmetriesektoren mit $\mathbf{k} \in \{0, \dots, 5\}^2$, $f \in \{-1, 1\}$ und $S^z = 0$. Die Energieeigenwerte e_i wurden mit exakter Diagonalisierung auf einem Cluster mit 36 Gitterplätzen berechnet. Unterschiedliche Farben gehören zu unterschiedlichen Impulsen \mathbf{k} . Die Quadrate (Kreise) korrespondieren zum niedrigsten Eigenwert im entsprechenden \mathbf{k} -Sektor mit Spin-Flip Quantenzahl $f = 1$ ($f = -1$) und die Rauten (Dreiecke) zum nächstgrößeren Eigenwert im entsprechenden Symmetriesektor mit $f = 1$ ($f = -1$). Es ist zu beachten, dass nur der niedrigste Eigenwert in jedem Symmetriesektor konvergiert ist, während die nächsthöheren Eigenwerte numerischen Ungenauigkeiten unterworfen sind. Die vertikalen gestrichelten Linien deuten die Phasenübergänge zur Spinflüssigkeit ($J_2/J_1 \approx 0.08$) und zur gestreiften Phase ($J_2/J_1 \approx 0.16$) an [57].

In Referenz 57 wurde dies überprüft und die Energieniveaus stimmen für kleine J_2/J_1 und große J_2/J_1 mit dem Tower of States der 120° -Ordnung [65] bzw. der gestreiften Ordnung [80] überein. Hinzu kommt, dass die Identifikation einer solchen Phase sehr subtil ist und in Referenz 57 insbesondere über einen Vergleich mit variationellen Wellenfunktionen angestrebt wird.

Der Phasenübergang zur gestreiften Phase ist weder im effektiven Spinmodell noch im J_1 - J_4 Modell erkennbar. Interessant ist jedoch, dass die Energieniveaukreuzung zwischen dem ersten angeregten Zustand bei $f = 1$ und dem niedrigsten Zustand bei $f = -1$ im effektiven Spinmodell bei sehr großen $t/U \approx 0.29$ sichtbar, im J_1 - J_4 Modell aber nicht vorhanden ist. Sollte der mittels VCA vorhergesagte Phasenübergang zur Spinflüssigkeit im Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter durch die übernächstnachbar Wechselwirkung J_2 getrieben werden, so sollten die Vierspinterme diesen Übergang unterstützen, das heißt zu kleineren, als den durch Gleichung (4.62) vorgegebenen, Werten von t/U verschieben. Die Ergebnisse aus den vorherigen Kapiteln deuten allerdings daraufhin, dass die Vierspinterme diesen Übergang zu größeren t/U -Werten verschieben.

Zum Abschluss soll dies noch weiter überprüft werden, indem das J_1 - J_2 Modell um die Vierspinterme des J_1 - J_4 Modells erweitert wird. In Abbildung 4.25 sind dazu die Energiedifferenzen zur Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von J_2/J_1 für feste $J_4/J_1 \in \{0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25\}$ aufgetragen. Wie sich eindeutig erkennen lässt, verschwinden die oben erwähnten Merkmale durch Einführen der Vierspinterme. Eine Erhöhung von J_4/J_1 lässt die Energiedifferenz zum Grundzustand weiter ansteigen, weshalb die Vermutung nahe liegt, dass die 120° -Ordnung stabilisiert wird.

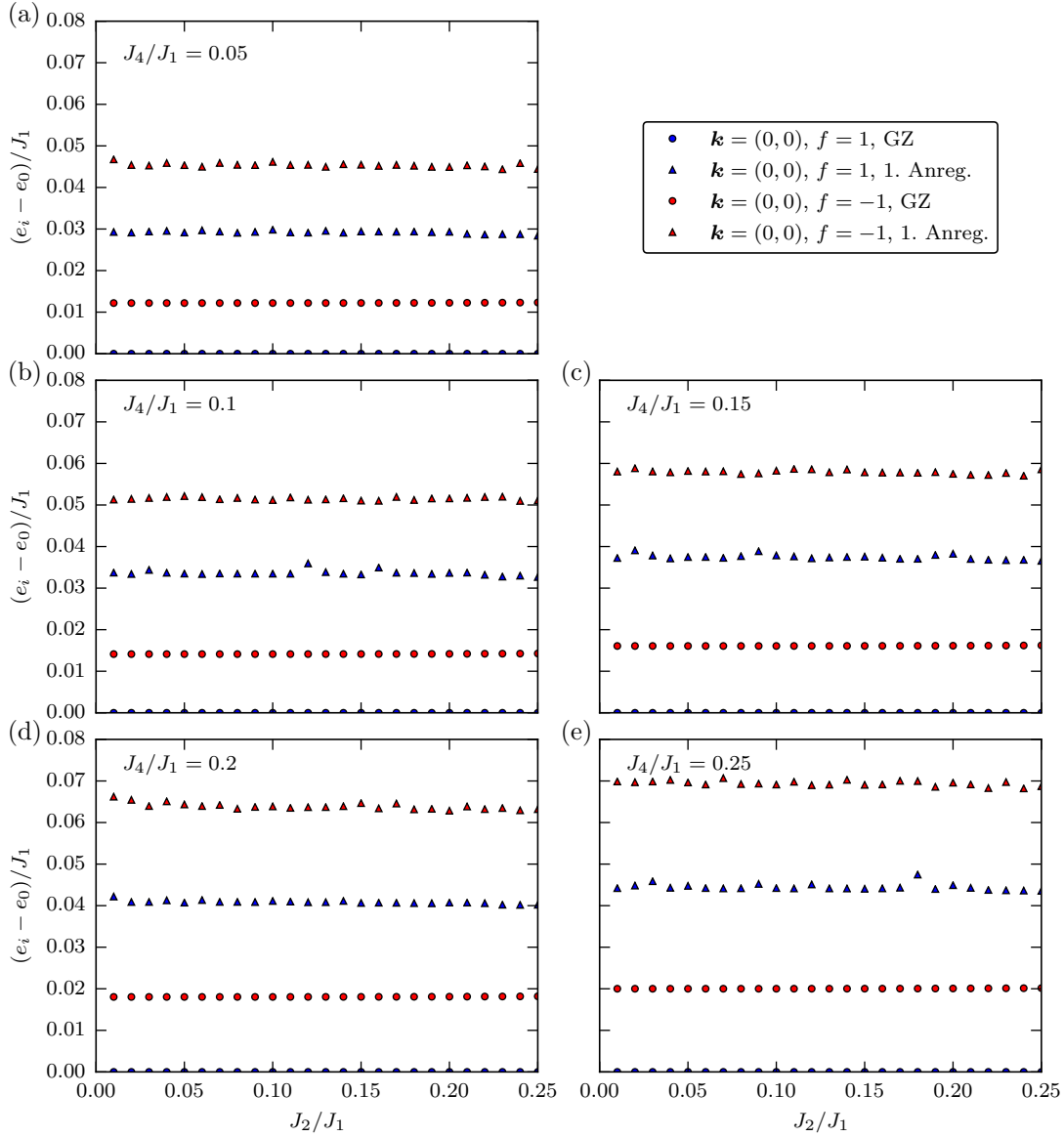


Abbildung 4.25: Energiedifferenz $(e_i - e_0)/J_1$ zur Grundzustandsenergie pro Gitterplatz für das J_1 - J_2 - J_4 Modell in Abhängigkeit von J_2/J_1 für (a) $J_4/J_1 = 0.05$, (b) $J_4/J_1 = 0.1$, (c) $J_4/J_1 = 0.15$, (d) $J_4/J_1 = 0.2$ und (e) $J_4/J_1 = 0.25$. Die Energieeigenwerte e_i wurden mit exakter Diagonalisierung für $\mathbf{k} = 0$, $f \in \{-1, 1\}$ und $S^z = 0$ auf einem Cluster mit 36 Gitterplätzen berechnet und es werden nur die niedrigsten beiden Eigenwerte jedes Symmetriesektors gezeigt. Es ist zu beachten, dass nur der niedrigste Eigenwert in jedem Symmetriesektor konvergiert ist, während die nächsthöheren Eigenwerte numerischen Ungenauigkeiten unterworfen sind.

4.2.5 Schlussfolgerungen

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die in dieser Arbeit produzierten ED-Ergebnisse für das J_1 - J_2 Modell auf einem Cluster mit 36 Gitterplätzen mit ähnlichen ED-Rechnungen [57] auf demselben Cluster übereinstimmen. Allerdings ist die Charakterisierung einer Spinflüssigkeit des Dreiecksgitters äußerst subtil und wird schon seit längerem für das J_1 - J_2 Modell diskutiert [52–57]. Dennoch konnten Indizien für entsprechende Phasenübergänge auch in den ED-Spektren des J_1 - J_2 Modells identifiziert werden, wobei insbesondere der Vergleich mit variationellen Wellenfunktionen Aufschluss über die Art der Spinflüssigkeit gibt [57]. Für das J_1 - J_4 Modell sowie das effektive Spinmodell in vierter Ordnung konnten keine Anzeichen für die Existenz eines Phasenübergangs gefunden werden. Sollte eine Spinflüssigkeit in dem durch VCA-Rechnungen vorgeschlagenen Bereich für das Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter [51] realisiert sein und durch die J_2 -Terme angetrieben werden, so wird auch erwartet, dass die Vierspinterme die Ausbildung der Spinflüssigkeit unterstützen. Die Rechnungen dieser Arbeit konnten dieses Szenario nicht stützen, sondern deuten eher darauf hin, dass die Vierspinterme der, im J_1 - J_2 Modell vorhandenen, Spinflüssigkeitsphase entgegenwirken. Demzufolge könnte es sein, dass ein anderer Mechanismus für die Ausbildung der Spinflüssigkeit im Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter zuständig ist. Es besteht auch die Möglichkeit, dass gar kein Phasenübergang existiert, sondern die gefundenen Anzeichen auf Artefakte der VCA zurückzuführen sind. Sollte der Phasenübergang, wie durch die VCA-Rechnungen suggeriert wird, tatsächlich zweiter Ordnung sein, so ist die Identifikation eines solchen deutlich schwieriger als beim isotropen Dreiecksgitter, wo der Phasenübergang erster Ordnung ist. Es sind deshalb weitere Untersuchungen notwendig, um die Existenz einer Spinflüssigkeitsphase für das Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter zu klären. In Solchen sollte vor allem auch der Einfluss von Sechsspintermen evaluiert und das Anregungsspektrum genauer analysiert werden.

Kapitel 5

NLCEs für Quantenspinmodelle

Um exotische Quantenphasen zu verstehen, ist es essentiell Techniken zu entwickeln, die diese Phasen quantitativ erfassen können. Da solche Phasen jedoch oft im Parameterraum nah an konventionellen Phasen liegen, ist es ebenso wichtig Methoden zu kennen, mit denen diese Phasen quantitativ untersucht werden können, um sie zum einen besser von den unkonventionellen Phasen abzugrenzen und zum anderen reale Systeme zu charakterisieren, wodurch Experimente in die Richtung exotischerer Phasen geleitet werden können.

Das antiferromagnetische Heisenbergmodell [64] in zwei Dimensionen bei Temperatur $T = 0$ ist ein gutes mikroskopisches Modell, um solche Methoden zu testen, da es, abhängig vom Grad der geometrischen Frustration und dem Wert des Gesamtspins, verschiedene geordnete und ungeordnete Phasen aufweist. So ist zum Beispiel der Grundzustand auf dem unfrustrierten Spin-1/2 Quadratgitter durch eine langreichweitige Néelordnung charakterisiert [158–160]. Das frustrierte Spin-1/2 Dreiecksgitter (siehe auch Kapitel 4.2) weist ebenfalls einen antiferromagnetisch geordneten Grundzustand auf – die sogenannte 120° -Ordnung – und wurde in den letzten Jahrzehnten intensiv studiert [65–68]. In beiden Fällen ist die $SU(2)$ -Symmetrie spontan gebrochen und die Anregungen sind gemäß des Goldstone-Theorems [142] lückenlose Spinwellen. Im Unterschied dazu steht das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter, wo der Grundzustand vermutlich eine Quantenspinflüssigkeit mit exotischer topologischer Ordnung ist [58, 59]. Die Spin-1 Variante auf dem Kagomegitter weist vermutlich eine spontane Trimerisierung mit langreichweitiger Singulettordnung und Energielücke auf [69–74]. Für noch größere $S > 1$ ist der Grundzustand des Heisenbergmodells auf dem Kagomegitter wieder langreichweitig magnetisch geordnet [73, 75–77].

Während die lückenlosen Systeme zu einer unendlichen Korrelationslänge führen, welche die nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen (NLCEs) deutlich erschwert, so wurde für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter bereits gezeigt, dass divergierende Teilsysteme zu einem nichtmonotonen Konvergenzverhalten führen [74]. In diesem Kapitel wird deshalb die in Kapitel 2.2.1 eingeführte Methode – welche die NLCE um Randfelder erweitert, die den einzelnen Graphen eine Referenzordnung vorgeben – angewendet, um zu überprüfen, ob dadurch die Konvergenzprobleme der konventionellen NLCEs behoben werden können. Dazu wird die Methode zuerst für lückenlose Systeme mit langreichweitiger magnetischer Ordnung angewendet, indem das Heisenbergmodell auf dem Quadrat- und Dreiecksgitter für jeweils Spin-1/2 und Spin-1 untersucht wird. Es stellt sich heraus, dass die Erweiterung der NLCE um Randfelder auch dort quantitativ richtige Resultate liefert,

wo die NLCE ohne Randfelder divergiert. Im Anschluss daran wird dieselbe Methode für das lückenbehaftete Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter angewendet, wodurch sich das nichtmonotone Konvergenzverhalten ebenfalls beheben lässt.

Die Inhalte dieses Kapitels wurden zum Großteil bereits in den Referenzen 74 und 109 publiziert.

5.1 Langreichweitig magnetisch geordnete Quantenphasen

In diesem Kapitel wird die NLCE-Methode mit Randfeldern (siehe Kapitel 2.2.1) auf Systeme mit einem langreichweitig magnetisch geordneten Grundzustand angewendet. Diese Systeme sind lückenlos und weisen somit eine divergierende Korrelationslänge auf. Mithilfe der Randfelder können allerdings dennoch gute Resultate erzielt werden, wie in diesem Kapitel gezeigt wird.

Zuerst wird dabei die Methode für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter getestet, da die Grundzustandseigenschaften dieses Systems ausgiebig untersucht wurden [158–160]. Im Anschluss daran wird die Methode auf das Spin-1 Heisenbergmodell auf demselben Gitter angewendet. In beiden Fällen liefert die NLCE mit Randfeldern sehr gute Resultate für die Grundzustandsenergie und Untergittermagnetisierung.

Ein deutlich anspruchsvolleres System ist das Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter, wo die starke Frustration zu einer reichhaltigeren Physik führt. Für dieses System werden ebenfalls die Spin-1/2 und Spin-1 Fälle durch eine NLCE mit Randfeldern behandelt und auch hier lassen sich gute Ergebnisse für die Grundzustandsenergie sowie Untergittermagnetisierung erzielen.

5.1.1 Graphenentwicklungen

Insgesamt werden vier verschiedene Graphenentwicklungen verwendet, um die Grundzustandsenergie und Untergittermagnetisierung mittels NLCE zu berechnen. Diese werden in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

Volle Graphenentwicklung

Eine volle Graphenentwicklung nutzt für eine gegebene Ordnung N der NLCE alle Graphen mit maximal N Knoten. Dabei werden, wie in Kapitel 2.2.1 beschrieben, nur vollständige (feste) Graphen betrachtet, was allerdings keine Näherung darstellt. In dieser Entwicklung wächst die Anzahl an Graphen sehr schnell an, während die Anzahl an Knoten recht klein bleibt, weshalb die exakte Diagonalisierung (ED) nicht den Flaschenhals für die NLCE darstellt. Es ist ebenfalls nicht möglich den Graphen eine Längenskala zuzuordnen, wodurch eine Skalierung erschwert wird.

In den Abbildungen und Tabellen wird die volle Graphenentwicklung mit „Voll“ abgekürzt.

Rechteckentwicklung

Im Gegensatz zu einer vollen Graphenentwicklung, bei der die Anzahl an Graphen sehr schnell wächst, lässt sich auch in rechteckigen Graphen entwickeln [104, 108, 116–118], wodurch die Anzahl an Graphen sehr langsam anwächst. Die Graphen besitzen dann die linearen Dimensionen L_x und L_y , sodass die Anzahl an Knoten $N = L_x \cdot L_y$ ist. Die exakte Diagonalisierung wird jetzt zum limitierenden Faktor für die Entwicklung.

Ein weiterer Vorteil der Rechteckentwicklung ist, dass die Berechnung der reduzierten Beiträge und Einbettungsfaktoren trivial ist. Für den Graphen \mathcal{G}_{L_x, L_y} mit den Ausdehnungen L_x und L_y ergibt sich dann der reduzierte Beitrag

$$P_{\text{red}}^{\mathcal{G}_{L_x, L_y}} = P^{\mathcal{G}_{L_x, L_y}} - \sum_{L'_x, L'_y} P_{\text{red}}^{\mathcal{G}_{L'_x, L'_y}}, \quad (5.1)$$

wobei die Summe über alle L'_x und L'_y mit

$$1 \leq L'_x \leq L_x \quad (5.2)$$

$$1 \leq L'_y \leq L_y \quad (5.3)$$

$$(L'_x, L'_y) \neq (L_x, L_y) \quad (5.4)$$

läuft [118] und der Einbettungsfaktor offensichtlich immer gleich 1 ist.

Diese Entwicklung sollte insbesondere für das Quadratgitter gut geeignet sein, da die Graphen deutlich mehr Raumsymmetrien des Gitters respektieren als bei einer vollen Graphenentwicklung. Die Ordnung der NLCE ist weiterhin durch die Anzahl N an Gitterplätzen definiert. Es ist auch möglich eine typische Längenskala

$$l_{\text{recht}} := \sqrt{N} \quad (5.5)$$

zu definieren [108], wodurch Skalierungen zu unendlicher Ordnung ermöglicht werden. Dennoch gestaltet sich – wie in Kapitel 5.1.3 genauer erläutert wird – eine Skalierung als schwierig, da die Rechteckentwicklung kein glattes Verhalten bezüglich der NLCE-Ordnung zeigt.

Arithmetische Graphenentwicklung

Ein weiteres Schema, welches arithmetische Graphenentwicklung [161, 162] genannt wird, definiert die Ordnung über die zugeordnete Längenskala entlang der Diagonalen (im Sinne der Manhattan-Metrik). Die Ordnung M mit den Ausdehnungen L_x und L_y ist dann durch

$$M := L_x + L_y - 2 \quad (5.6)$$

definiert. Die -2 ist so gewählt, dass ein einzelner Bond aus 2 Gitterplätzen die Ordnung $M = 1$ besitzt und weicht somit leicht von der durch Kallin [161] und Clever [162] gegebenen Definition ab. Folglich ist die arithmetische Ordnung identisch zur Anzahl an Kanten entlang der beiden Richtungen eines rechteckigen Graphen.

Für alle Skalierungen ist allerdings die Anzahl an Gitterplätzen (Knoten der Graphen) von Relevanz und obwohl die Anzahl an Knoten für die Graphen einer arithmetischen Ordnung nicht gleich ist, wird für alle Skalierungen die Längenskala

$$l_{\text{arith}} := \frac{L_x + L_y}{2} \quad (5.7)$$

verwendet, da dies der durchschnittlichen linearen Ausdehnung des größten quadratischen Graphen der Ordnung entspricht. Wie sich in den folgenden Unterkapiteln zeigen wird, werden nur gerade NLCE-Ordnungen für die Skalierungen verwendet, sodass l_{arith} eine ganze Zahl ist.

Die arithmetische Graphenentwicklung wird in den Abbildungen und Tabellen mit „Arith.“ abgekürzt.

Quadratentwicklung

In der Rechteckentwicklung sind die Graphen mit der längsten Ausdehnung in eine Richtung stets Kettengraphen. Dies kann für zweidimensionale Systeme problematisch werden, da so eindimensionale Effekte einen zu großen Einfluss haben. Dies wurde in der arithmetischen Graphenentwicklung teilweise behoben, da dort der längste Kettengraph die gleiche Länge hat wie die Manhattan-Distanz der quadratischeren Cluster. Die Quadratentwicklung geht noch einen Schritt weiter und definiert die Ordnung M in der ein Graph beiträgt als Maximum der beiden Ausdehnungen:

$$M := \max\{L_x, L_y\} . \quad (5.8)$$

Es sollte beachtet werden, dass aufgrund der Forderung nach Schnittstabilität (siehe Kapitel 2.1.2) alle Schnittgraphen ebenfalls benötigt werden. Dadurch sind nicht alle Graphen quadratisch, aber die Definition der Ordnung ist so gewählt, dass der Graph mit den meisten Knoten immer quadratisch ist.

Die Kettengraphen sind in dieser Entwicklung niemals länger als eine Seite der quadratischen Graphen. Wie in der arithmetischen Entwicklung ist die Anzahl an Gitterplätzen für die Graphen einer Ordnung nicht immer gleich, allerdings hat der quadratische Graph der Ordnung mit $L = L_x = L_y$ immer die meisten Gitterplätze, weshalb

$$l_{\text{quad}} := L \quad (5.9)$$

für alle Skalierungen verwendet wird.

Abgekürzt wird die Quadratentwicklung in den Abbildungen und Tabellen mit „Quad.“.

5.1.2 Skalierungen für NLCEs

NLCEs werden aufgrund der Einbettung auf das Gitter direkt im thermodynamischen Limes durchgeführt, weshalb es keine finite-size Effekte gibt. Allerdings korrespondiert jede NLCE-Ordnung zu einer Trunkierung in den Realraumfluktuationen des unendlichen

Systems. Aus diesem Grund ist es interessant Skalierungen der NLCE-Ergebnisse zu unendlichen Ordnungen durchzuführen. Dies ist jedoch eine herausfordernde Aufgabe, da keine aus grundsätzlichen Prinzipien abgeleiteten Skalierungsgesetze für NLCEs bekannt sind. In dieser Arbeit werden deshalb zwei verschiedene Skalierungen getestet: Die erste (i) Skalierungsvorschrift ist aus konventionellen finite-size Skalierungen für lückenlose magnetisch geordnete Heisenbergmodelle bekannt [163], während die zweite (ii) verwendete Skalierungsvorschrift heuristisch für die Coupled-Cluster Methode (CCM) gefunden wurde (siehe Referenzen 164, 165, 166, 167 und die dort enthaltenen Referenzen). Die CCM ist, wie NLCEs auch, eine Methode, welche direkt im thermodynamischen Limes arbeitet. Grundlage der CCM ist es, ausgehend von einer Anfangswellenfunktion, den Grundzustand des Systems systematisch anzunähern. Dazu wird eine Transformation auf den Ausgangszustand angewendet und in den Operatoren dieser Transformation trunziert (eine gute Einführung in die CCM findet sich zum Beispiel in Referenz 168).

(i) Für einen langreichweitig antiferromagnetisch geordneten Grundzustand mit lückenlosen Goldstone-Anregungen ergeben sich in zwei Dimensionen die finite-size Skalierungen [163]

$$e_0(l) = e_{0,\text{skal}(i)} + \frac{a_1}{l^3} + \frac{a_2}{l^4} + \dots \quad (5.10)$$

$$m_0^2(l) = m_{0,\text{skal}(i)}^2 + \frac{b_1}{l} + \frac{b_2}{l^2} + \dots \quad (5.11)$$

für die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0 und die Untergittermagnetisierung m_0 . Mit $e_{0,\text{skal}(i)}$, a_1 , a_2 , $m_{0,\text{skal}(i)}^2$, b_1 und b_2 werden die Parameter der Ausgleichsrechnungen bezeichnet und $e_{0,\text{skal}(i)}$ und $m_{0,\text{skal}(i)}$ stellen dann die für $l \rightarrow \infty$ skalierten Werte dar. Die Punkte deuten Terme höherer Ordnung in $1/l$ an. Diese Skalierung wird in dieser Arbeit als Skalierung vom Typ (i) bezeichnet und mit „Skal. (i)“ abgekürzt.

(ii) Im Rahmen der CCM wurden die Skalierungsgesetze

$$e_0(l) = e_{0,\text{skal}(ii)} + \frac{\bar{a}_1}{l^4} + \frac{\bar{a}_2}{l^8} + \dots \quad (5.12)$$

$$m_0(l) = m_{0,\text{skal}(ii)} + \frac{\bar{b}_1}{l^2} + \frac{\bar{b}_2}{l^4} + \dots \quad (5.13)$$

heuristisch gefunden (siehe Referenzen 164, 165, 166, 167 und die dort enthaltenen Referenzen), wobei $e_{0,\text{skal}(ii)}$, \bar{a}_1 , \bar{a}_2 , $m_{0,\text{skal}(ii)}$, \bar{b}_1 , \bar{b}_2 wieder Parameter der Ausgleichsrechnung sind und die Punkte höhere Ordnungen in $1/l$ andeuten. Mit Typ (ii) wird diese Skalierung in dieser Arbeit bezeichnet und mit „Skal. (ii)“ wird sie abgekürzt.

Beide Skalierungsgesetze werden in dieser Arbeit für die NLCEs mit Randfeldern bei Anwendung der verschiedenen Graphenentwicklungen (siehe Kapitel 5.1.1) überprüft, indem die Längenskala l mit der typischen Längenskala l_{recht} , l_{arith} bzw. l_{quad} der Entwicklungen identifiziert wird.

In den nächsten Unterkapiteln wird die NLCE mit Randfeldern für das Spin-1/2 und Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Quadrat- und Dreiecksgitter sowie dem zugehörigen Spin-1/2

XXZ-Modell angewendet und die Skalierungsgesetze werden genutzt, um die Grundzustandsenergie und Untergittermagnetisierung bis zu unendlichen Ordnungen zu extrapolieren. Begonnen wird mit einer Diskussion der Methode für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter, welches bereits ausgiebig studiert wurde und aufgrund der fehlenden Frustration ein idealer Kandidat für das Testen der Methode darstellt. Aus den so erzielten Ergebnissen können dann optimale Kombinationen von Graphenentwicklung und Bestimmungsmethode für K ermittelt werden, auf welche sich dann für die darauffolgenden Modelle konzentriert wird.

5.1.3 Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter

Der Hamiltonoperator des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Quadratgitter ist durch

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (5.14)$$

mit antiferromagnetischem $J > 0$ gegeben. Die Summe $\sum_{\langle i,j \rangle}$ läuft dabei über alle Paare von nächsten Nachbarn auf dem Quadratgitter. Es ist bekannt, dass dieses System bei Temperatur $T = 0$ einen langreichweitig magnetisch geordneten Néelzustand ausbildet [158–160], wodurch dieses Modell einerseits aufgrund der lückenlosen Anregungen und der unendlichen Korrelationslänge eine große Herausforderung für jede ortsraumbasierte Methode darstellt. Andererseits ist das System geometrisch unfrustriert, welches die Konvergenz einer NLCE begünstigt.

Durch eine Untergitterrotation – wie sie für die Spinwellentheorie üblich ist [120, 158] – geht der Hamiltonoperator, dann in

$$H_{\text{rot}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(-S_i^z S_j^z - S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y \right) \quad (5.15)$$

über. Durch Einführen des Parameters λ , welcher zwischen dem Ising ($\lambda = 0$) und Heisenberg ($\lambda = 1$) Grenzfall interpoliert, ergibt sich der Hamiltonoperator

$$H_{\text{rot}}^{\text{XXZ}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-S_i^z S_j^z + \lambda \left(S_i^y S_j^y - S_i^x S_j^x \right) \right] \quad (5.16)$$

des XXZ-Modells und hat damit genau die Form aus Gleichung (2.28). Der Referenzzustand kann nun als der vollständig in z -Richtung polarisierte Ferromagnet gewählt werden und die Randfelder können, wie durch Gleichung (2.31) definiert, eingeführt werden. Zuerst wird sich in diesem Unterkapitel auf den lückenlosen – und daher anspruchsvollsten – Fall $\lambda = 1$ konzentriert. Der einfachere – da lückenbehaftete – Fall $\lambda < 1$ (XXZ-Modell) wird im nächsten Unterkapitel behandelt.

Sämtliche Resultate für die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0 und die Untergittermagnetisierung m_0 des Grundzustands werden mit den Quanten-Monte-Carlo (QMC)

Werten [163]

$$e_0^{\text{QMC}} = -0.669437(5)J \quad (5.17)$$

$$m_0^{\text{QMC}} = 0.3070(3) \quad (5.18)$$

verglichen, um die NLCE mit Randfeldern zu testen. Diese QMC-Werte sind aus einer Skalierung vom Typ (i), gemäß den Gleichungen (5.10) und (5.11), hervorgegangen.

In Abbildung 5.1 ist die mit der vollen Graphenentwicklung bis $N = 8$ Gitterplätzen ermittelte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J aufgetragen. Es lässt sich gut erkennen, dass die Entwicklung für kleine K/J – insbesondere auch $K = 0$ – divergiert und es lässt sich bereits feststellen, dass es wichtig ist, die langreichweitige magnetische Ordnung zu berücksichtigen. Für große K/J wird die Entwicklung wie erwartet stabilisiert und größere Ordnungen liegen näher am QMC-Wert. Dennoch ist die Entwicklung nicht besonders gut konvergiert und für $K/J \lesssim 0.6$ ist ein Paritätseffekt, bei dem sich die geraden und ungeraden Ordnungen anders verhalten, vorhanden. Während die geraden Ordnungen kein Energieminimum besitzen, aus denen sich ein optimaler K -Wert mit der Minimummethode ableiten lässt, so besitzen die ungeraden Ordnungen ein wohldefiniertes Minimum, welches für die Wynn-Extrapolationen und Skalierungen zum thermodynamischen Limes verwendet wird.

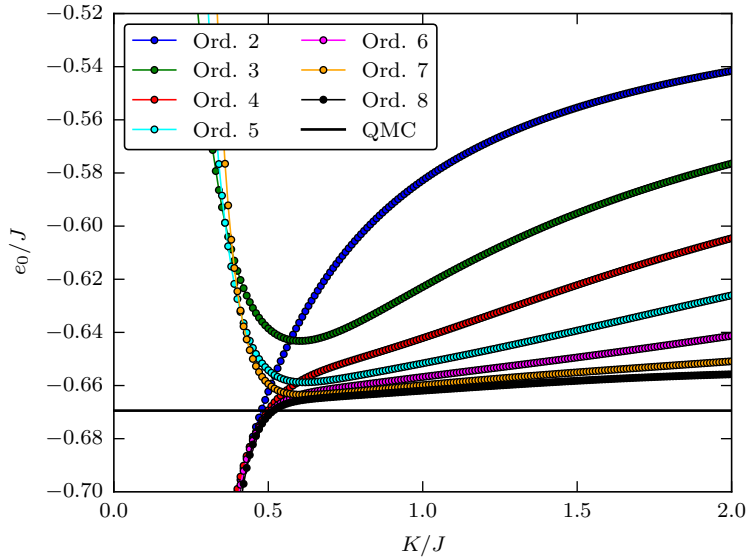


Abbildung 5.1: Mit der Randfeldmethode und der vollen Graphenentwicklung bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J in Abhängigkeit von K/J für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter. Verschiedenfarbige Symbole repräsentieren unterschiedliche Ordnungen und die horizontale schwarze Linie stellt das QMC-Ergebnis [163] dar. Durchgezogene farbige Linien sind Hilfslinien.

Die mit der Rechteckentwicklung bis $N = 25$ Gitterplätzen bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz ist in Abbildung 5.2 in Abhängigkeit von K/J dargestellt. Diese Entwicklung liefert deutlich besser konvergierte Ergebnisse, welche allerdings auf die deutlich größere Anzahl an Gitterplätzen der höheren Ordnungen zurückzuführen sind. Nun bilden sowohl ungerade als auch gerade Ordnungen Minima aus, allerdings besitzt weiterhin nicht jede Ordnung ein Minimum. Ein genauerer Blick auf die Minima in Abbildung 5.2 zeigt, dass diese gut zum QMC-Ergebnis konvergieren. Eine vernünftige Skalierung der Minimalwerte ist jedoch problematisch, wie bereits in vorherigen Rechteckentwicklungen für NLCEs festgestellt wurde [104, 108]. Da die typische Längenskala $l_{\text{rect}} = \sqrt{N}$ über die Wurzel der Ordnung definiert ist (siehe Gleichung (5.5)), treten Ordnungen auf bei denen sich die Energie kaum ändert. Beispielsweise unterscheidet sich Ordnung 13 nur durch einen Kettengraphen mit 13 Gitterplätzen von Ordnung 12 und da die Energie von Kettengraphen üblicherweise sehr schnell abfällt, hat dieser fast keinen Einfluss auf die Grundzustandsenergie. Die Grundzustandsenergie in Ordnung 12 und 13 ist also nahezu identisch. Dies führt zur Ausbildung sogenannter „Energieplateaus“ (vergleiche auch mit dem Bildeinschub in Abbildung 5.5), welche eine Skalierung erschweren. Nichtsdestotrotz erfasst eine Skalierung von Typ (i) (siehe durchgezogene Linie im Bildeinschub von Abbildung 5.5) die richtige Größenordnung für die Energie im thermodynamischen Limes.

Ein solcher Plateaueffekt ist in der arithmetischen Entwicklung nicht mehr vorhanden, wie sich Abbildung 5.3 entnehmen lässt. Die Grundzustandsenergie ist weiterhin sehr gut konvergiert, allerdings ist immer noch ein Paritätseffekt sichtbar, sodass Energieminima nur

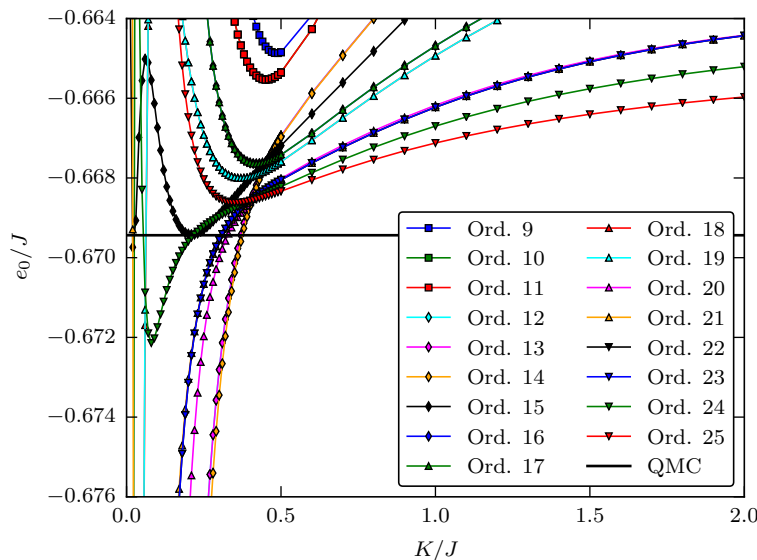


Abbildung 5.2: Mit der Randfeldmethode und der Rechteckentwicklung bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J in Abhängigkeit von K/J für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter. Verschiedenfarbige Symbole repräsentieren unterschiedliche Ordnungen und die horizontale schwarze Linie stellt das QMC-Ergebnis [163] dar. Durchgezogene farbige Linien sind Hilfslinien.

für gerade Ordnungen vorhanden sind. Bemerkenswert ist, dass genau die Ordnungen ein Minima aufweisen, in welcher ein quadratischer Graph hinzukommt. Es wird erwartet, dass diese quadratischen Cluster die Physik des zweidimensionalen Quadratgitters in optimaler Weise erfassen und sie sollten folglich wichtig für die Entwicklung sein.

Infolgedessen werden die Resultate durch die Quadratentwicklung noch einmal verbessert, wie sich an der in Abbildung 5.4 dargestellten Grundzustandsenergie erkennen lässt. Bereits die Minima von Ordnung 4 und 5 sind sehr nah am QMC-Wert. So weicht das mit der Quadratentwicklung in Ordnung 5 bestimmte Energieminimum

$$e_0^{\min}(l_{\text{quad}} = 5) = -0.66874J \quad (5.19)$$

nur um $0.0007J$ vom QMC-Wert (5.17) ab. Wird das Ergebnis von Ordnung 2 ausgeschlossen (Ordnung 2 besteht nur aus einem einzelnen Bond mit zwei Gitterplätzen und einem Quadrat mit vier Gitterplätzen, welches beides sehr kleine Cluster sind), so wird erwartet, dass wieder ein Paritätseffekt auftritt, und zwar sollten die geraden und ungeraden Ordnungen separat gegen den Wert im thermodynamischen Limes konvergieren. In diesem Zusammenhang wäre ein Ergebnis für Ordnung 6 sehr hilfreich, dieses erfordert jedoch einen offenen Cluster mit $N = 36$ Gitterplätzen. Die Berechnung der Grundzustandsenergie eines solchen Clusters ist ohne eine beträchtliche Ausnutzung von Symmetrien nicht möglich.

Für die arithmetische Graphenentwicklung und die Quadratentwicklung wird die Grundzustandsenergie in jeder Ordnung – zusätzlich zur Bestimmung über die Energiemini-

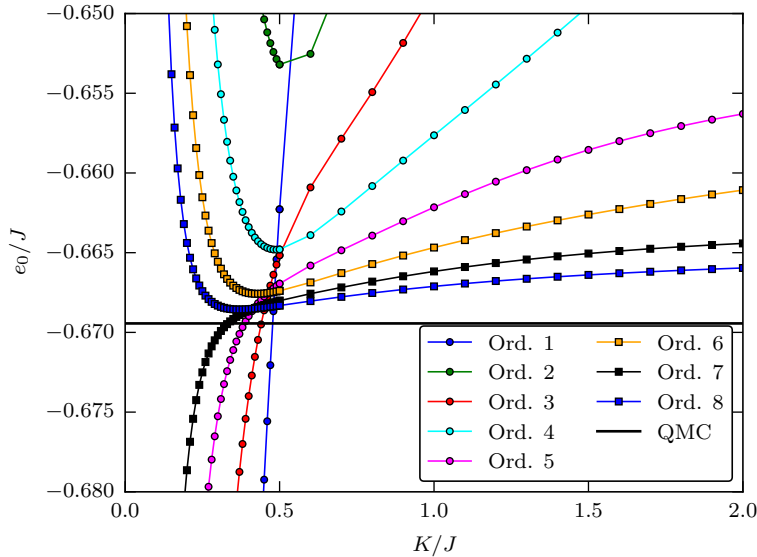


Abbildung 5.3: Mit der Randfeldmethode und der arithmetischen Graphenentwicklung bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J in Abhängigkeit von K/J für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter. Unterschiedlich farbige Symbole repräsentieren unterschiedliche Ordnungen und die horizontale schwarze Linie stellt das QMC-Ergebnis [163] dar. Durchgezogene farbige Linien sind Hilfslinien.

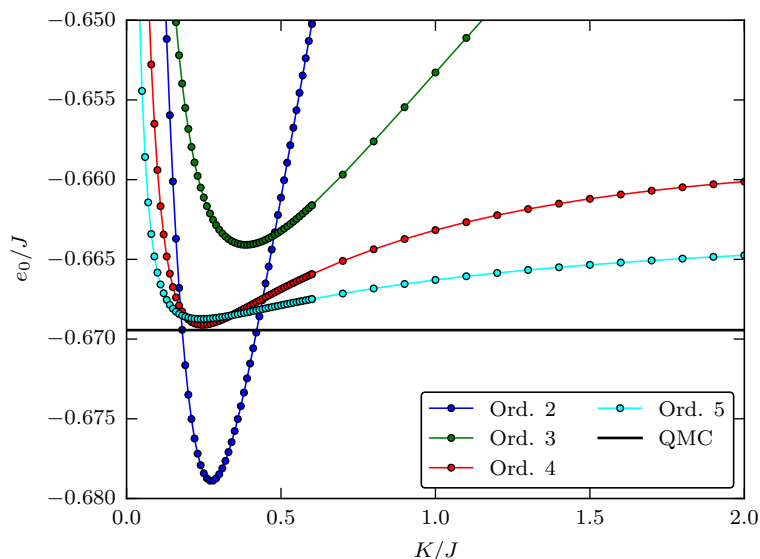


Abbildung 5.4: Mit der Randfeldmethode und der Quadratentwicklung bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J in Abhängigkeit von K/J für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter. Unterschiedlich farbige Symbole repräsentieren unterschiedliche Ordnungen und die horizontale schwarze Linie stellt das QMC-Ergebnis [163] dar. Durchgezogene farbige Linien sind Hilfslinien.

ma – ebenfalls mit der Fixpunktmethod (siehe Kapitel 2.2.1) ermittelt. Durch die erhaltenen Energien der Fixpunkt- und Minimumsmethode werden dann die Skalierungen von Typ (i) (Gleichung (5.10)) und Typ (ii) (Gleichung (5.12)) durchgeführt sowie der Wynn-Algorithmus (siehe Kapitel 2.3.1) angewendet, um verbesserte Resultate für die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz im thermodynamischen Limes zu erhalten. Die volle Graphenentwicklung und Rechteckentwicklung werden dabei nicht betrachtet, da für die volle Graphenentwicklung die Ordnung offensichtlich nicht besonders hoch ist und der Plateaueffekt eine wohldefinierte Skalierung, der mittels Rechteckentwicklung bestimmten Energiewerte, erschwert. Es wäre spannend die volle Graphenentwicklung für größere Ordnungen durchzuführen, was jedoch nicht Fokus dieser Arbeit ist. Die Extrapolationen sind zusammen mit den verwendeten Ordnungen in Tabelle 5.1 eingetragen und Abbildung 5.5 stellt die Skalierungen grafisch dar. Angemerkt sei an dieser Stelle, dass nicht jede Ordnung einen Fixpunkt $m_0(K) = K$ besitzt, wie sich in den Abbildungen 5.6 und 5.7 erkennen lässt. Die Ordnungen, welche ein klar definiertes Minimum der Untergittermagnetisierung aufweisen, haben auch einen Fixpunkt.

Die Skalierungen sind in Abbildung 5.5 gezeigt, wobei die Skalierungen durch die jeweils „besten“ Ordnungen durchgeführt wurden. Damit ist gemeint, dass die Ordnungen unter Berücksichtigung der Paritätseffekte so groß wie möglich gewählt werden sollten. Für die arithmetische Graphenentwicklung werden dazu die drei größten Ordnungen 4, 6 und 8 verwendet, während für die Quadratentwicklung die Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 durchgeführt werden. Selbstverständlich werden bei weniger als drei Werten nur die füh-

Methode	Extrapolation	e_0/J	$\Delta e_0/J$	m_0	Δm_0
Arith. (Fix.)	Skal. (i) (4, 6, 8)	-0.669567	0.00013	0.3077	0.0007
Arith. (Fix.)	Skal. (ii) (4, 6, 8)	-0.669486	0.000049	0.3220	0.015
Arith. (Fix.)	Wynn (4, 6, 8)	-0.669081	0.00036	0.3319	0.025
Quad. (Fix.)	Skal. (i) (3, 5)	-0.669692	0.00025	0.3038	0.0032
Quad. (Fix.)	Skal. (ii) (3, 5)	-0.669134	0.00030	0.3336	0.027
Quad. (Fix.)	Wynn (3-5)	-0.668482	0.00096	0.3476	0.041
Arith. (Min.)	Skal. (i) (4, 6, 8)	-0.669588	0.00015	0.3059	0.0011
Arith. (Min.)	Skal. (ii) (4, 6, 8)	-0.669301	0.00014	0.3316	0.025
Arith. (Min.)	Wynn (4, 6, 8)	-0.669102	0.00034	0.3277	0.021
Quad. (Min.)	Skal. (i) (3, 5)	-0.670022	0.00058	0.2877	0.019
Quad. (Min.)	Skal. (ii) (3, 5)	-0.669433	0.000004	0.3252	0.018
Quad. (Min.)	Wynn (3-5)	-0.668765	0.00067	0.3435	0.037

Tabelle 5.1: Vergleich der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und der Untergittermagnetisierung m_0 für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter bei Verwendung der arithmetischen Graphenentwicklung (Arith.) sowie der Quadratentwicklung (Quad.). Die Methode zur Bestimmung von K ist in Klammern hinter der verwendeten Graphenentwicklung angegeben (Fix. für die Fixpunktmethode und Min. für die Minimumsmethode). Die für die Extrapolation verwendeten Ordnungen stehen in Klammern hinter dem Extrapolationsschema. Ebenfalls eingetragen sind die Abweichungen $\Delta e_0 := |e_0 - e_0^{\text{QMC}}|$ und $\Delta m_0 := |m_0 - m_0^{\text{QMC}}|$ zu den QMC-Werten [163].

renden Terme der Skalierungsvorschriften berücksichtigt, sodass die Skalierung eindeutig ist.

Alle verwendeten Extrapolationsverfahren liefern Grundzustandsenergien, welche sehr nah am QMC-Wert (5.17) liegen und die reinen NLCE-Ergebnisse um etwa eine Größenordnung verbessern, wie sich aus Tabelle 5.1 entnehmen lässt. Sowohl die Fixpunkt- als auch die Minimumsmethode liefern vergleichbar gute Resultate für die arithmetische Graphenentwicklung und Quadratentwicklung. Gleichzeitig liefern beide Skalierungsverfahren etwas bessere Ergebnisse als die Wynn-Extrapolationen. Die Qualität der beiden Skalierungen ist jedoch sehr ähnlich, sodass ein Vergleich schwierig ist.

Abschließend werden noch die Ergebnisse für die Untergittermagnetisierung m_0 diskutiert. Die Untergittermagnetisierung ist der Ordnungsparameter des Néelzustands und eine Bestimmung von m_0 ist nur möglich wenn die NLCE in der symmetriebrochenen Phase durchgeführt wird. Dies wird durch die Randfelder erreicht und die Abbildungen 5.6 und 5.7 zeigen m_0 in Abhängigkeit von K/J für die vier Entwicklungen.

Die generellen – bereits für die Grundzustandsenergie diskutierten – Eigenschaften lassen sich ebenfalls in der Untergittermagnetisierung wiederfinden, auch wenn die reinen Ergebnisse nicht so gut konvergiert sind wie bei der Grundzustandsenergie. Wichtig ist, dass die Magnetisierung ein Minimum aufweist, welches an ungefähr derselben Stelle liegt wie das Energieminimum. Es lässt sich weiterhin feststellen, dass die Minimalwerte der Magnetisierung stets größer als der QMC-Wert (5.18) sind, da der klassische vollständig polarisierte Zustand ein zu großes Randfeld für die betrachteten Graphen generiert.

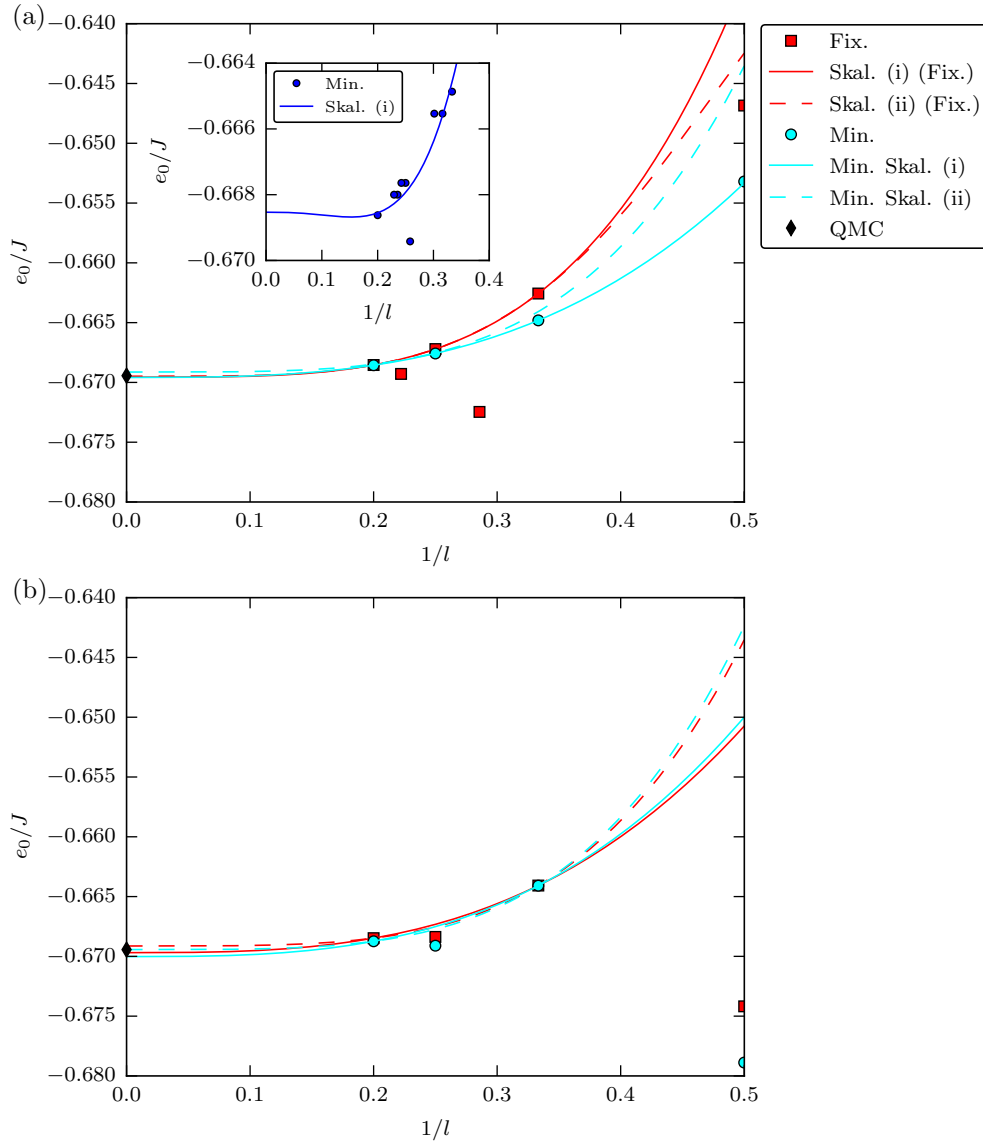


Abbildung 5.5: Skalierung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Quadratgitter für die (a) arithmetische Graphenentwicklung und (b) Quadratentwicklung in Abhängigkeit von der inversen Längenskala $1/l$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise stellen die Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode dar und die schwarze Raute ist der QMC-Wert [163]. Durchgezogene und gestrichelte Linien sind Skalierungen von Typ (i) bzw. Typ (ii). *Bildeinschub:* Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J in Abhängigkeit von $1/l$ für die Rechteckentwicklung. Die durchgezogene blaue Linie ist eine Skalierung von Typ (i).

Analog zur Skalierung der Grundzustandsenergie wird eine Skalierung der Untergittermagnetisierung gemäß der beiden Skalierungstypen (i) und (ii) durchgeführt (siehe Gleichungen (5.11) und (5.13)) und die Ergebnisse sind in Abbildung 5.8 grafisch dargestellt. Um das Schema konsistent durchzuführen, werden für die Skalierung jedoch nicht die Minima der Magnetisierung verwendet, sondern die Werte der Magnetisierung bei den K -Werten, an denen die Grundzustandsenergie ein Minimum aufweist. Bei der Fixpunktmethod entsprechen die Magnetisierungen dem ermittelten Fixpunkt. Die ermittelten Magnetisierungen sind zusammen mit den Abweichungen vom QMC-Wert (5.18) in Tabelle 5.1 eingetragen. Die Abweichungen sind, wie erwartet, größer als bei der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz, da die Untergittermagnetisierung eine deutlich empfindlichere Größe darstellt. Nichtsdestotrotz liegt die Übereinstimmung in der Größenordnung 10^{-2} . An den Abweichungen vom QMC-Wert in Tabelle 5.1 lässt sich erkennen, dass die arithmetische Entwicklung bessere Ergebnisse erzielt. Dies ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass bei der Quadratentwicklung nur zwei Datenpunkte für die Skalierung verwendet werden, wodurch die Skalierungsverfahren ungenauer sind. Ein Vergleich der beiden Skalierungstypen zeigt, dass Typ (i) überzeugendere Ergebnisse produziert als Typ (ii), bei welchem die Extrapolationen stets über dem QMC-Wert liegen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die NLCE mit Randfeldern quantitativ vergleichbare Ergebnisse für die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und die Untergittermagnetisierung des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Quadratgitter liefert, obwohl der Néel-geordnete Grundzustand eine unendliche Korrelationslänge besitzt. Die Fixpunkt- und Minimumsmethode liefern dabei ähnlich gute Ergebnisse. In den folgenden Unterkapiteln wird sich auf das Skalierungsverhalten konzentriert und diskutiert wie sich die beiden Skalierungstypen verhalten. Der Wynn-Algorithmus wird demzufolge nicht mehr angewendet.

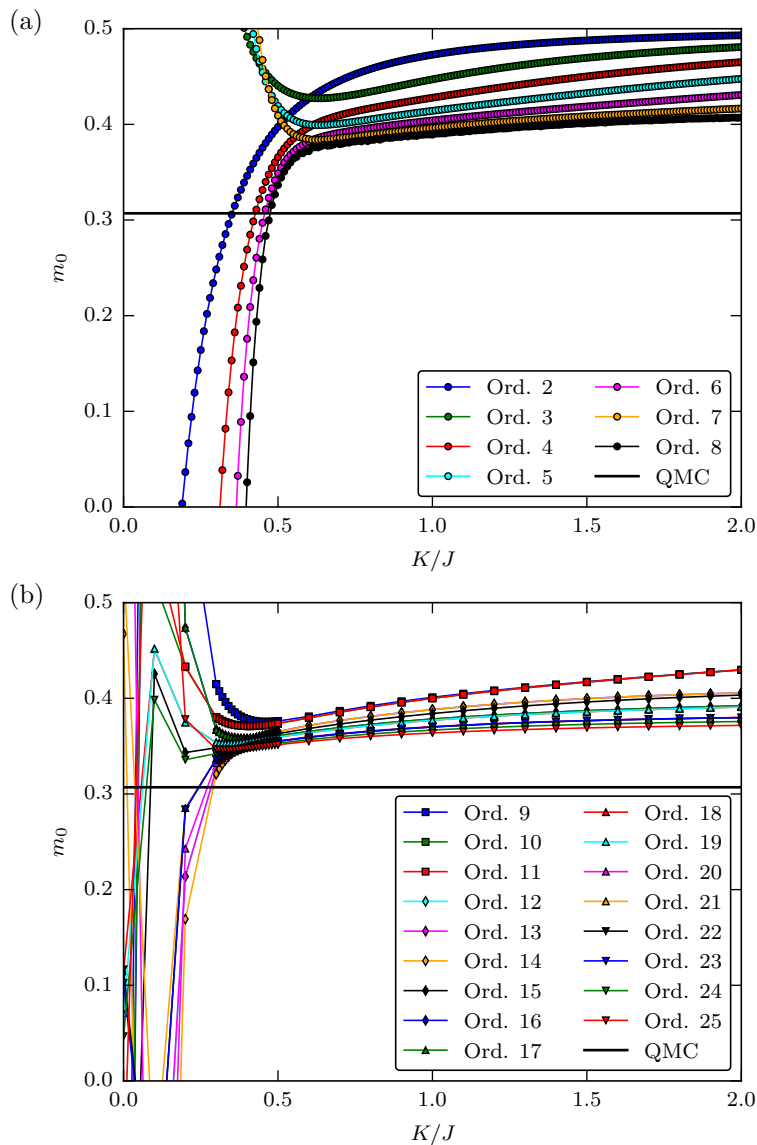


Abbildung 5.6: Mit der Randfeldmethode und der (a) vollen Graphenentwicklung sowie der (b) Rechteckentwicklung bestimmte Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von K/J für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter. Verschiedenfarbige Symbole repräsentieren unterschiedliche Ordnungen und die horizontale schwarze Linie stellt das QMC-Ergebnis [163] dar. Durchgezogene farbige Linien sind Hilfslinien.

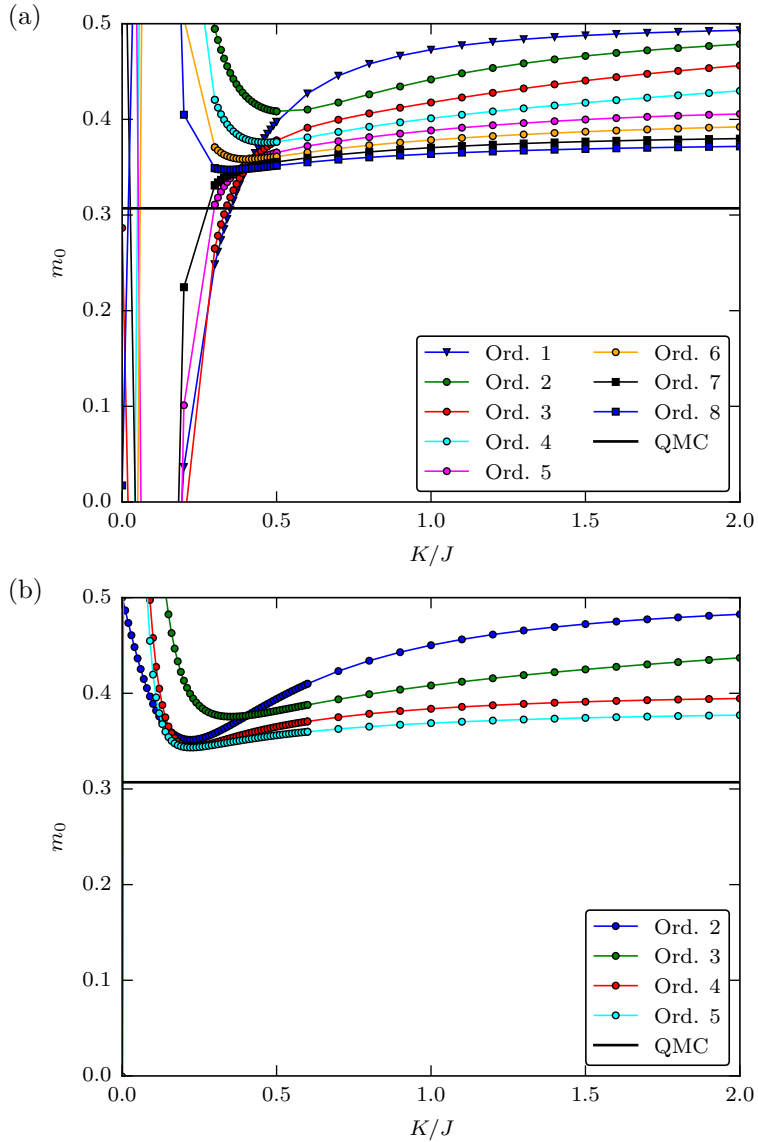


Abbildung 5.7: Mit der Randfeldmethode und der (a) arithmetischen Graphenentwicklung sowie der (b) Quadratentwicklung bestimmte Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von K/J für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter. Verschiedenfarbige Symbole repräsentieren unterschiedliche Ordnungen und die horizontale schwarze Linie stellt das QMC-Ergebnis [163] dar. Durchgezogene farbige Linien sind Hilfslinien.

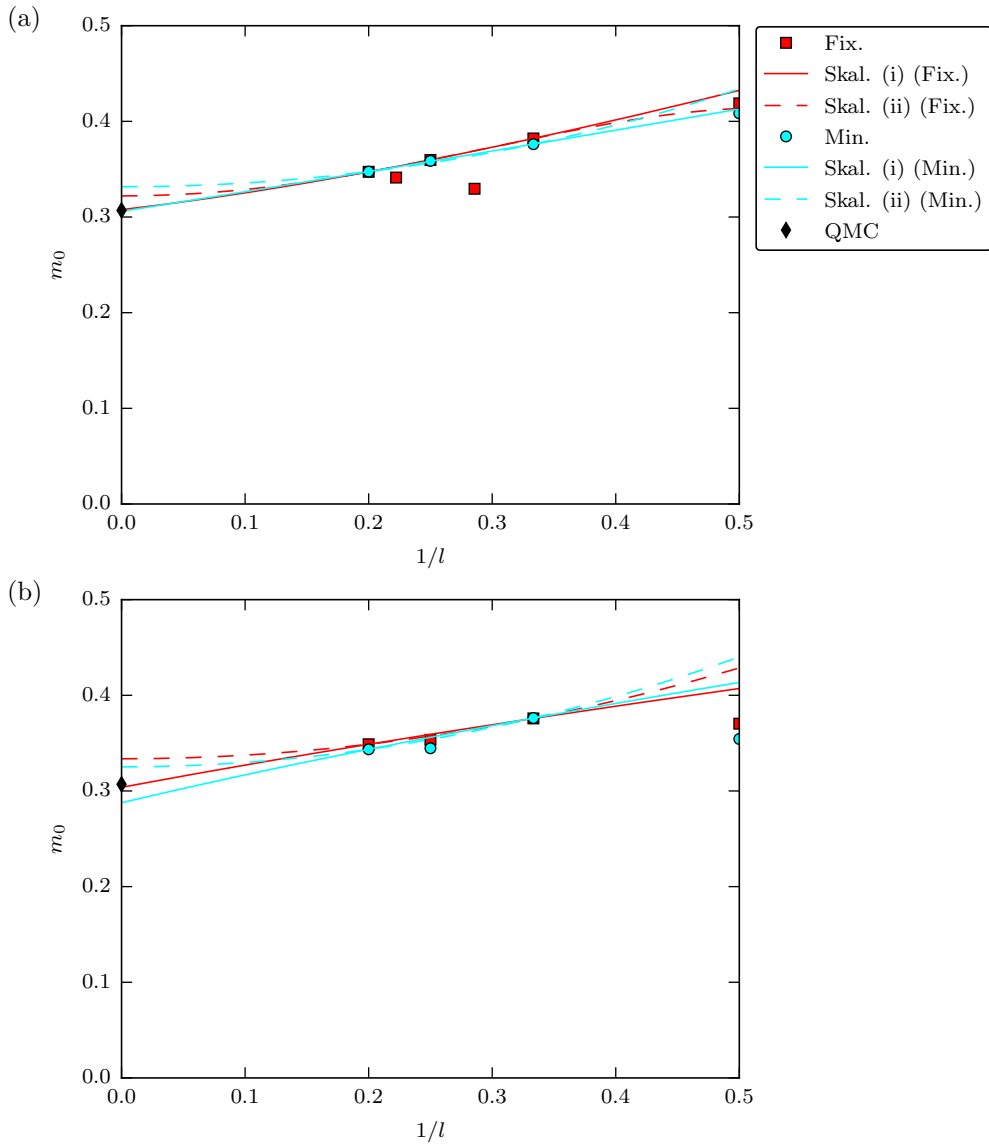


Abbildung 5.8: Skalierung der Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter für die (a) arithmetische Graphenentwicklung und (b) Quadratentwicklung in Abhängigkeit von der inversen Längenskala $1/l$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise stellen die Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode dar und die schwarze Raute ist der QMC-Wert [163]. Durchgezogene und gestrichelte Linien sind Skalierungen von Typ (i) bzw. Typ (ii).

5.1.4 Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Quadratgitter

In diesem Unterkapitel wird die NLCE mit Randfeldern für das durch den Hamiltonoperator (5.16) definierte Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Quadratgitter untersucht. Der Parameter λ wird dazu im Bereich $\lambda \in [0,1]$ variiert, um zwischen dem Ising-Grenzfall $\lambda = 0$ und dem Heisenbergmodell bei $\lambda = 1$ zu interpolieren. Im Gegensatz zum, im vorherigen Unterkapitel diskutierten, Heisenbergmodell besitzt das XXZ-Modell für $\lambda < 1$ eine endliche Energielücke. Die NLCE sollte deshalb schneller konvergieren und für kleine λ mit perturbativen Reihenentwicklungen übereinstimmen.

Für die Diskussion wird sich auf die Quadratentwicklung beschränkt, da diese für das Heisenbergmodell die besten Ergebnisse erzielt hat. Abbildung 5.9 zeigt eine repräsentative Darstellung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und der Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.85$. Die dazugehörigen Skalierungen von Typ (i) und (ii) durch die mit der Fixpunkt- und Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J und m_0 lassen sich Abbildung 5.10 entnehmen. Bereits die nichtextrapolierten Werte der NLCE sind sehr gut konvergiert und wie schon beim Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter, führen die Skalierungen von Typ (i) und (ii) durch Ordnung 3 und 5 zu einer weiteren Verbesserung der NLCE-Ergebnisse für die Grundzustandsenergie als auch die Untergittermagnetisierung (vergleiche Abbildung 5.10). Es sollte beachtet werden, dass der in Abbildung 5.10 dargestellte Wert für die Reihenentwicklung nicht extrapoliert ist und deshalb – insbesondere bei der Untergittermagnetisierung – etwas zu groß ist. Grafische Darstellungen der Grundzustandsenergie und Untergittermagnetisierung sowie die entsprechenden Skalierungen für andere λ -Werte finden sich in den Abbildungen B.3 bis B.18 in Anhang B.2.

In Abbildung 5.11 sind die skalierten Werte für e_0/J und m_0 entlang der λ -Achse aufgetragen. Ein Vergleich mit Hochordnungsreihenentwicklungen [118, 169, 170] bis Ordnung 14 in λ zeigt, dass die Reihenentwicklungs- und NLCE-Ergebnisse für kleine λ quantitativ übereinstimmen. Dies muss so sein, da die NLCE in Ordnung 5 sämtliche Beiträge einer Störungsrechnung bis Ordnung 8 exakt enthält. Im Allgemeinen ist dies für größere λ nicht mehr der Fall, da die reine Reihenentwicklung nicht konvergieren muss, während eine NLCE durchaus konvergent sein kann. Für das unfrustrierte XXZ-Modell auf dem Quadratgitter sind jedoch alle Reihenentwicklungen monoton und selbst die nichtextrapolierten perturbativen Ergebnisse liefern zufriedenstellende Resultate. In Kapitel 5.1.7 wird das XXZ-Modell auf dem Dreiecksgitter untersucht, wo die Reihen aufgrund der geometrischen Frustration alternierend sind und deshalb die nichtextrapolierten NLCE und Reihenentwicklungen für große λ stärker voneinander abweichen.

Die Grundzustandsenergie stimmt im gesamten λ -Bereich sehr gut mit der Reihenentwicklung überein und auch die Skalierungen liefern nahezu identische Werte. Für die Untergittermagnetisierung hingegen sind für große λ -Werte Abweichungen erkennbar. Die Ordnung 5 der NLCE stimmt weiterhin sehr gut mit dem Ergebnis der Reihenentwicklung überein, da beide aber nicht extrapoliert sind, weichen diese am Heisenbergpunkt deutlich vom QMC-Resultat ab. Die Skalierungen von Typ (i) und Typ (ii) liefern hingegen sehr gute Ergebnisse, wie bereits in Kapitel 5.1.3 erläutert wurde. Insgesamt liefert die

NLCE mit Randfeldern konvergente und gute Resultate für die gesamte λ -Achse des unfrustrierten Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Im nächsten Unterkapitel wird das Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter für Spin-1 untersucht.

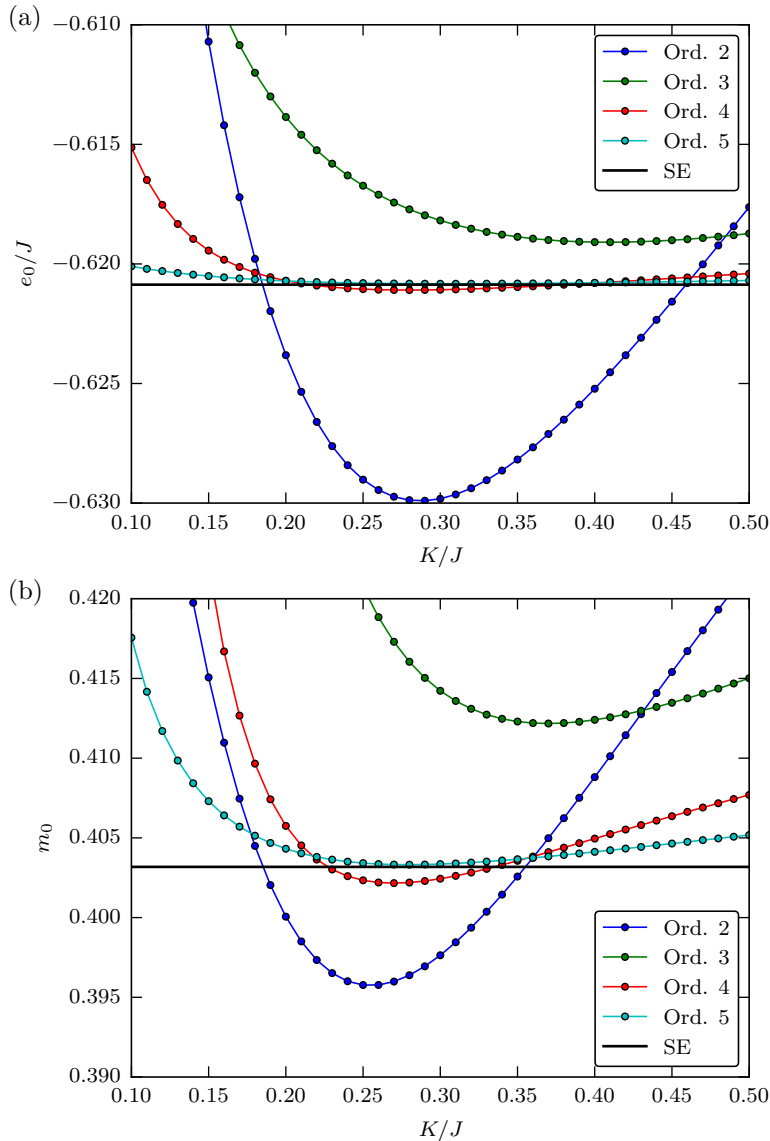


Abbildung 5.9: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.85$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der nichtextrapolierte durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmte Wert [118, 169, 170]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

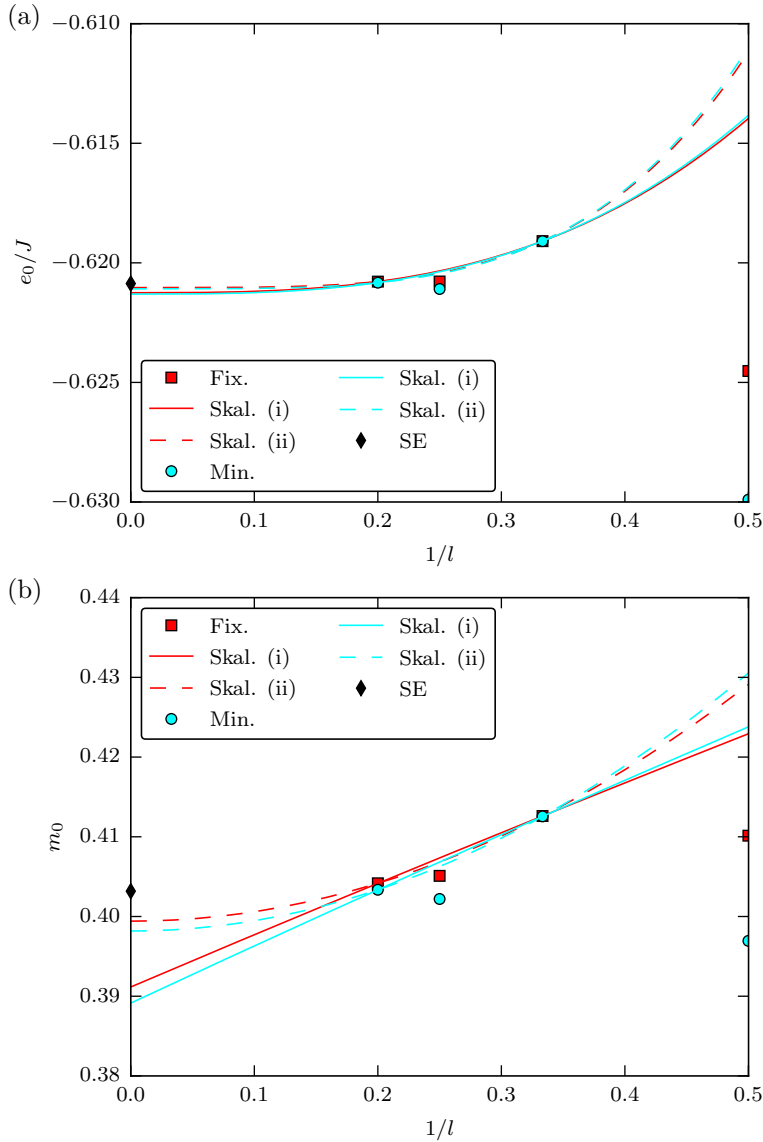


Abbildung 5.10: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.85$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die nichtextrapolierten durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmten Werte [118, 169, 170] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

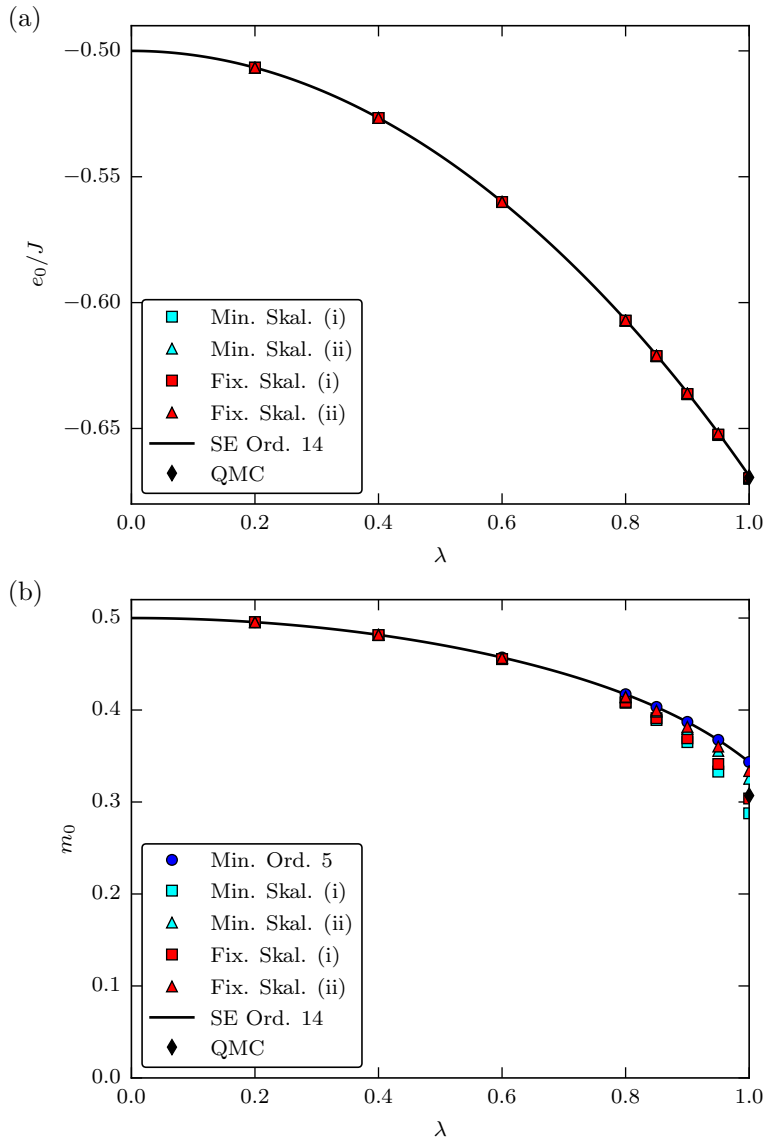


Abbildung 5.11: Durch Skalierungen von Typ (i) (Quadrate) und Typ (ii) (Dreiecke) aus der Quadratentwicklung für das Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Quadratgitter ermittelte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) Untergittermagnetisierung m_0 . Rote Symbole korrespondieren zur Fixpunktmethode, während cyanfarbene Symbole zur Minimumsmethode gehören. Ebenfalls aufgetragen sind die nichtextrapolierten Ergebnisse einer Hochordnungsreihenentwicklung (SE) [118, 169, 170] in λ bis Ordnung 14 (schwarze durchgezogene Linie). Die blauen Kreise sind die nichtextrapolierten Werte für die Untergittermagnetisierung der NLCE in Ordnung 5 und die schwarzen Rauten entsprechen den QMC-Werten [163] für den Heisenbergpunkt $\lambda = 1$.

5.1.5 Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter

Für das Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Quadratgitter konnte gezeigt werden, dass die NLCE mit Randfeldern eine systematische, nichtperturbative Entwicklung um die langreichweitig geordnete klassische Néelphase ist. Als nichtperturbative Methode werden alle Quantenfluktuationen auf allen in der Ordnung auftretenden Clustern vollständig miteinbezogen. Es zeigte sich in den vorherigen Kapiteln, dass der Heisenbergfall $\lambda = 1$ am herausforderndsten ist, da die Korrelationslänge aufgrund der Lückenlosigkeit des Modells divergiert. In diesem Unterkapitel wird wiederum das Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter betrachtet, aber der Spin auf $S = 1$ erhöht. Das System ist weiterhin langreichweitig geordnet und lückenlos, aber die Quantenfluktuationen werden aufgrund des größeren Spins reduziert. Demzufolge ändert sich der Néel-geordnete Referenzzustand nicht, aber die Entwicklung sollte aufgrund der geringeren Quantenfluktuationen schneller konvergieren, da die Randfelder aus der Molekularfeldentkopplung eines klassisch geordneten Referenzzustands entstanden sind. Gleichzeitig ist jedoch die exakte Diagonalisierung auf den einzelnen Clustern anspruchsvoller, da der lokale Hilbertraum für Spin-1 größer ist. Folglich können nicht so große Cluster wie für das Spin-1/2 System betrachtet werden.

Die Quadratentwicklung stellte sich für den Spin-1/2 Fall als beste der vier betrachteten Entwicklungen heraus, weshalb für das Spin-1 Heisenbergmodell nur diese Entwicklung genutzt wird. Insgesamt konnte Ordnung 4 der Quadratentwicklung erreicht werden, das heißt der größte Cluster besitzt 16 Gitterplätze. Für die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und die Untergittermagnetisierung m_0 ergeben sich die in Abbildung 5.12 gezeigten Abhängigkeiten von der Randfeldstärke K/J . Analoge Skalierungen wie im Spin-1/2 Fall wurden ebenfalls durchgeführt und sind in Abbildung 5.13 gegen die inverse typische Längenskala $1/l$ aufgetragen. Ein direkter Vergleich der ermittelten Werte ist in Tabelle 5.2 eingetragen. Zusätzlich wurden die Werte noch mit den durch die CCM ermittelten Werten [166]

$$e_0^{\text{CCM}} = -2.32975J \quad (5.20)$$

$$m_0^{\text{CCM}} = 0.7938 \quad (5.21)$$

verglichen und die Abweichungen sind ebenfalls in Tabelle 5.2 zu finden. Der recht große Wert für die Untergittermagnetisierung – klassisch sollte sich $m_0 = 1$ ergeben – zeigt schon, dass die Quantenfluktuationen gegenüber dem Spin-1/2 Modell reduziert sind, wo die Untergittermagnetisierung aufgrund von Quanteneffekten auf etwa 60% ihres klassischen Wertes gesenkt wird.

Wie sich anhand von Abbildung 5.12 (a) erkennen lässt, sind die nichtextrapolierten NLCE-Werte für die Grundzustandsenergie recht gut konvergiert. Lediglich die Ordnung 2 Ergebnisse passen nicht – wie schon im Spin-1/2 Fall – zum generellen Konvergenzverhalten der NLCE und werden folglich nicht für die Skalierungen verwendet. Bereits das Ergebnis in Ordnung 4 liefert einen minimalen Wert

$$e_0^{\min}(l_{\text{quad}} = 4) = 2.32744J \quad (5.22)$$

Methode	Extrapolation	e_0/J	$\Delta e_0/J$	m_0	Δm_0
Quad. (Fix.)	Skal. (i) (3, 4)	-2.32779	0.0020	0.8112	0.017
Quad. (Fix.)	Skal. (ii) (3, 4)	-2.32645	0.0033	0.8387	0.045
Quad. (Min.)	Skal. (i) (3, 4)	-2.33133	0.0016	0.7630	0.031
Quad. (Min.)	Skal. (ii) (3, 4)	-2.32992	0.00017	0.8057	0.012

Tabelle 5.2: Vergleich der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und der Untergittermagnetisierung m_0 für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter bei Verwendung der Quadratentwicklung. Die Methode zur Bestimmung von K ist in Klammern hinter der verwendeten Graphenentwicklung angegeben (Fix. für die Fixpunktmethode und Min. für die Minimumsmethode). Die für die Extrapolation verwendeten Ordnungen stehen in Klammern hinter dem Extrapolationschema. Ebenfalls eingetragen sind die Abweichungen $\Delta e_0 := |e_0 - e_0^{\text{CCM}}|$ und $\Delta m_0 := |m_0 - m_0^{\text{CCM}}|$ zu den CCM-Werten [166].

und weicht damit nur um $0.0023J$ vom CCM-Wert (5.20) ab. Dies bedeutet, dass die Ordnung 4 (16 Gitterplätze) der NLCE für das Spin-1 Modell so gut wie die Ordnung 5 (25 Gitterplätze) für den Spin-1/2 Fall ist. Eine Skalierung durch Ordnung 3 und 4 (siehe Tabelle 5.2 und Abbildung 5.13 (a)) führt nur zu einer leichten Verbesserung der Grundzustandsenergie, was sich vermutlich auf die geringe Ordnung der NLCE zurückführen lässt.

Analog zum Spin-1/2 Modell ist die Qualität der Methoden zur Bestimmung der Untergittermagnetisierung etwas schlechter als bei der Grundzustandsenergie, wie aus Tabelle 5.2 und Abbildung 5.13 (b) hervorgeht. Wie für die Grundzustandsenergie konvergieren die einzelnen Ordnungen monoton zum CCM-Wert (5.21), aber auch hier fällt das Ergebnis in Ordnung 2 etwas heraus. Es lässt sich ebenfalls feststellen, dass die Skalierung der Minima von Typ (i) zu einem, mit dem CCM-Wert (5.21) verglichenen, kleineren Wert für die Untergittermagnetisierung führt, während die Skalierung von Typ (ii) einen zu großen Wert liefert. Diese Abweichungen folgen aus Ungenauigkeiten bei der Skalierung, da nur die zwei Datenpunkte von Ordnung 3 und 4 zur Verfügung stehen und zusätzlich ein Paritätseffekt wie bei den Spin-1/2 Daten erwartet wird.

Insgesamt funktioniert die NLCE mit Randfeldern auch für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter gut, obwohl die erreichbare NLCE-Ordnung aufgrund des größeren lokalen Hilbertraums gegenüber dem Spin-1/2 Modell reduziert ist.

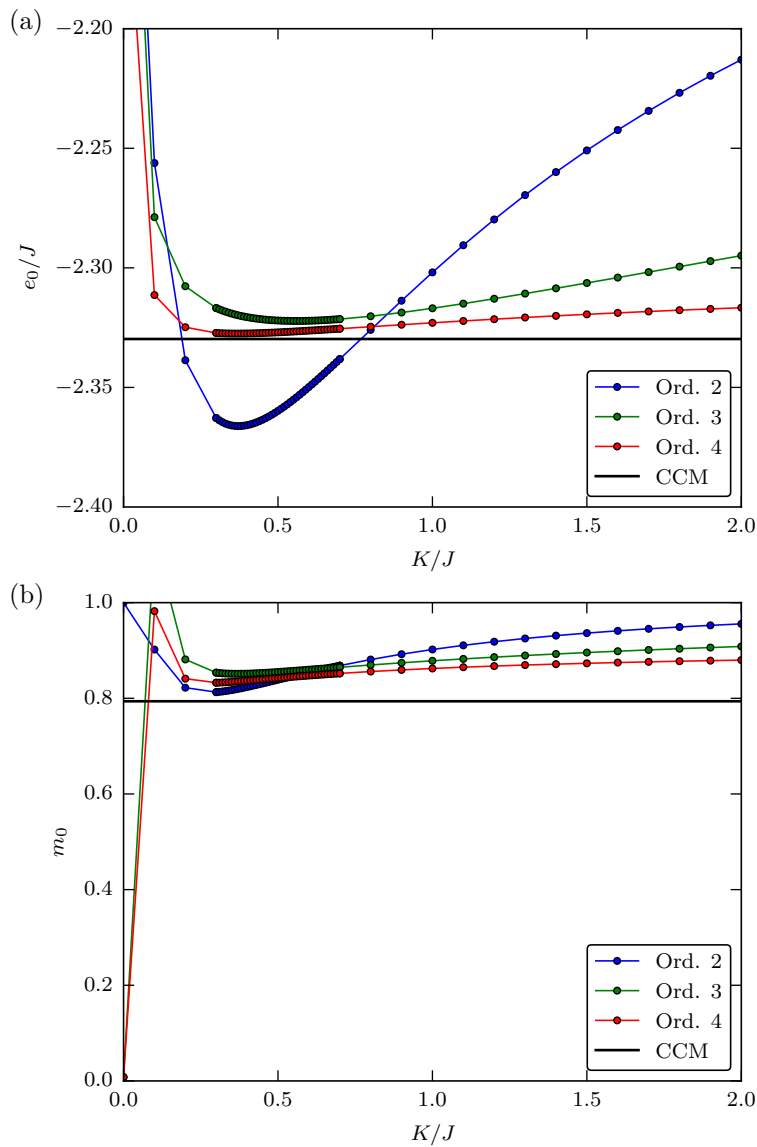


Abbildung 5.12: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J des Spin-1 Heisenbergmodells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der durch die CCM bestimmte Wert [166]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

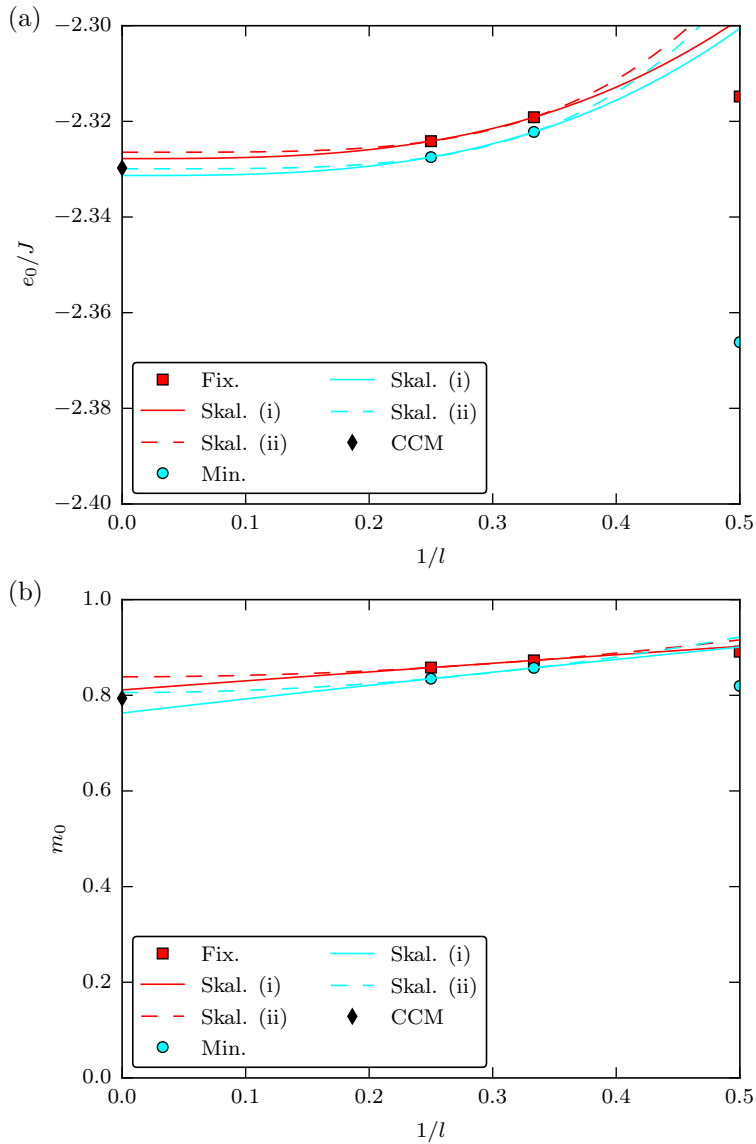


Abbildung 5.13: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1 Heisenbergmodells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die mit der CCM bestimmten Werte [166] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 4 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

5.1.6 Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter

Das Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter ist für beliebige Werte des Spins unfrustriert. Dies sollte die Konvergenz der NLCE mit Erhöhen der Ordnung verbessern, da der Referenzzustand von H_0 (siehe Kapitel 2.2.1) auf jedem Cluster unfrustriert ist und so auf den meisten Clustern keine energetisch naheliegenden Grundzustände konkurrieren. Im Gegensatz dazu ist die Situation bei geometrisch frustrierten Systemen, wie dem antiferromagnetischen Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter, deutlich komplizierter und es ist nicht klar, wie gut die NLCE mit Randfeldern funktioniert. Dies soll in diesem Unterkapitel anhand des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Dreiecksgitter untersucht werden.

Genau wie der Grundzustand des Heisenbergmodells auf dem Quadratgitter, bricht der Grundzustand auf dem Dreiecksgitter ebenfalls die kontinuierliche $SU(2)$ -Symmetrie. Das System besitzt daher ebenfalls lückenlose Goldstonebosonen als Anregungen, wodurch die NLCE erschwert wird. Der Grundzustand ist für alle Spinwerte durch die sogenannte 120° -Ordnung gegeben [65–68] (siehe dazu auch Kapitel 4.2 über das Hubbardmodell auf dem Dreiecksgitter), welche eine Struktur aus drei Untergittern ausbildet. Er kann dann als angezogene (von engl. dressed) Variante der klassischen 120° -Ordnung des zugehörigen Ising-Modells verstanden werden und die NLCE mit Randfeldern kann – der Argumentation für die Néelordnung auf dem Quadratgitter folgend – angewendet werden.

Eine für die 120° -Ordnung passende Untergitterrotation ist ebenfalls aus Arbeiten zur Spinwellentheorie auf dem Dreiecksgitter bekannt [121, 171–173] und führt auf den rotierten Hamiltonoperator

$$H_{\text{rot}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^y S_j^y + \cos(\theta_i - \theta_j) (S_i^z S_j^z + S_i^x S_j^x) + \sin(\theta_i - \theta_j) (S_i^z S_j^x - S_i^x S_j^z), \quad (5.23)$$

wobei θ_i den Werten $\theta_A = 0$, $\theta_B = 2\pi/3$, $\theta_C = 4\pi/3$ entspricht, je nachdem ob Gitterplatz i zu Untergitter A, B oder C gehört. Durch Einführen des Parameters λ vor allen, bezüglich des ferromagnetischen Referenzzustandes, nichtdiagonalen Termen, ergibt sich der Hamiltonoperator

$$H_{\text{rot}}^{\text{XXZ}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} -\frac{1}{2} S_i^z S_j^z + \lambda \left(S_i^y S_j^y - \frac{1}{2} S_i^x S_j^x + \frac{\sqrt{3}}{2} S_i^z S_j^x - \frac{\sqrt{3}}{2} S_i^x S_j^z \right), \quad (5.24)$$

welcher die gewünschte Form aus Gleichung (2.28) aufweist. Die Reihenfolge von i und j wurde in Gleichung (5.24) so gewählt, dass der Term $S_i^z S_j^x$ einen positiven Vorfaktor hat. Verglichen werden die Ergebnisse dieses Unterkapitels mit den Werten

$$e_0^{\text{GFQMC}} = -0.5458(1)J \quad (5.25)$$

$$e_0^{\text{SE}} = -0.5502(4)J \quad (5.26)$$

$$m_0^{\text{GFQMC}} = 0.205(10) \quad (5.27)$$

$$m_0^{\text{SE}} = 0.19 \quad (5.28)$$

$$(5.29)$$

aus Greensfunktionen QMC (GFQMC) [67] und extrapolierte Reihenentwicklung (SE) [174]. Die Untergittermagnetisierung ist noch geringer als für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter, woran sich die erhöhten Quantenfluktuationen aufgrund der geometrischen Frustration erkennen lassen.

Begonnen wird mit der Diskussion der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J für den Heisenbergfall $\lambda = 1$. Es wurde sowohl die Fixpunkt- als auch die Minimummethode verwendet, wobei wie zuvor beide Verfahren ähnlich gute Resultate erzielen. In den Abbildungen 5.14 und 5.15 sind die Ergebnisse der NLCE mit Randfeldern für die mit der Quadratentwicklung und der arithmetischen Graphenentwicklung bestimmten Grundzustandsenergie pro Gitterplatz gegen die Randfeldstärke K/J aufgetragen. Ähnlich wie beim Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter sind die Randfelder auch hier notwendig, um sinnvolle Resultate für beide Entwicklungen zu erhalten, da diese sonst zu divergieren scheinen. Bei der Quadratentwicklung lassen sich wohldefinierte Minima erkennen (siehe Abbildung 5.14), welche sehr gut konvergieren und im Gegensatz zum Quadratgitter keinen Paritätseffekt zeigen. Bereits das Minimum der Quadratentwicklung in Ordnung 5 weicht mit

$$e_0^{\min}(l_{\text{quad}} = 5) = -0.548258J \quad (5.30)$$

nur um etwa $0.002J$ vom GFQMC-Wert (5.25) und dem Wert aus der extrapolierten Reihenentwicklung (5.26) ab.

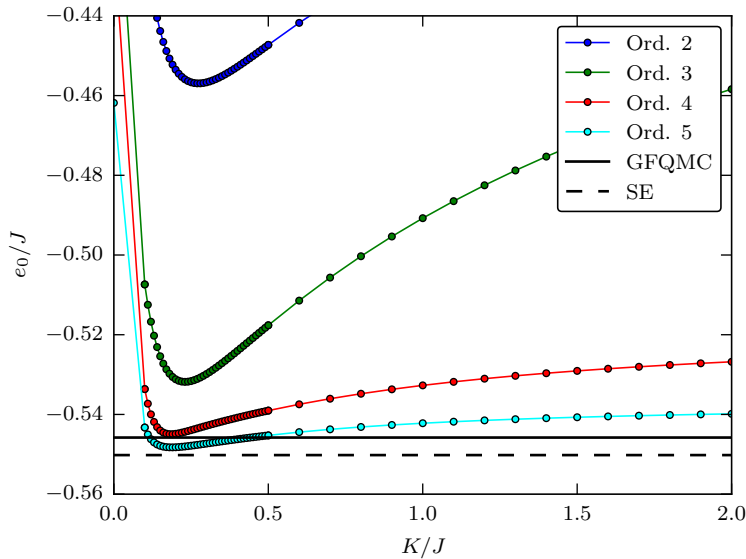


Abbildung 5.14: Mit der Randfeldmethode und der Quadratentwicklung bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J in Abhängigkeit von K/J für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter. Unterschiedlich farbige Symbole repräsentieren unterschiedliche Ordnungen. Die durchgezogene und die gestrichelte horizontale schwarze Linie stellen die Ergebnisse aus Greensfunktionen QMC (GFQMC) [67] bzw. extrapolierte Reihenentwicklung (SE) [174] dar. Durchgezogene farbige Linien sind Hilfslinien.

Für die arithmetische Graphenentwicklung (siehe Abbildung 5.15) ist die Konvergenz nicht ganz so gut und das Minimum von Ordnung 5 liegt etwas höher. Interessanterweise befindet sich das Minimum von Ordnung 5 der Quadratentwicklung bereits niedriger als der GFQMC-Wert und da die Minima aus der NLCE mit Randfeldern für die Quadratentwicklung monoton mit der Ordnung abfallen, wird angedeutet, dass der extrapolierte Wert aus der Reihenentwicklung näher am Wert des unendlichen Systems liegt als der mit GFQMC bestimmte Wert.

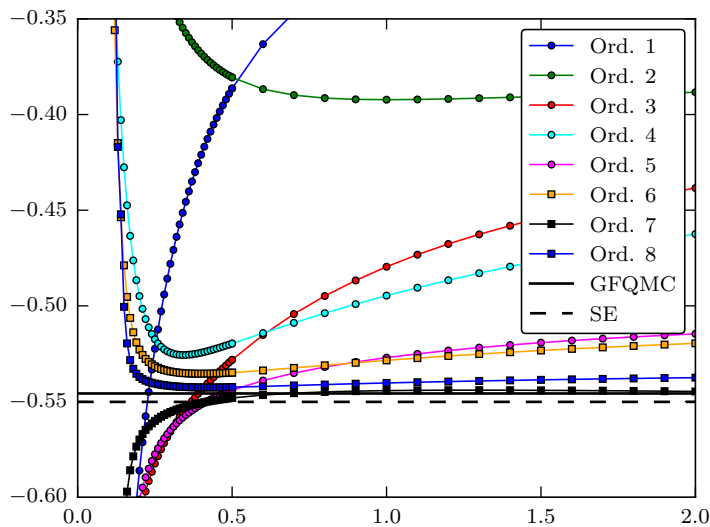


Abbildung 5.15: Mit der Randfeldmethode und der arithmetischen Graphenentwicklung bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J in Abhängigkeit von K/J für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter. Unterschiedlich farbige Symbole repräsentieren unterschiedliche Ordnungen. Die durchgezogene und die gestrichelte horizontale schwarze Linie stellen die Ergebnisse aus Greensfunktionen QMC (GFQMC) [67] bzw. extrapolierten Reihenentwicklung (SE) [174] dar. Durchgezogene farbige Linien sind Hilfslinien.

Diese Schlussfolgerung wird durch die in Abbildung 5.16 und Tabelle 5.3 gezeigten Skalierungen von Typ (i) und Typ (ii) weiter unterstützt. Die beiden Skalierungstypen liefern für die arithmetische Entwicklung qualitativ unterschiedliche Werte. Während die Skalierung von Typ (ii) Werte ergibt, welche sehr nah an der extrapolierten Reihenentwicklung (5.26) liegen, so ergeben die Skalierungen von Typ (i) etwas zu niedrige Energiewerte. Im Unterschied dazu führen beide Skalierungen für die Quadratentwicklung zu sehr guten Ergebnissen, welche sich innerhalb der Fehlerabschätzung für den extrapolierten Wert (5.26) aus der Reihenentwicklung befinden.

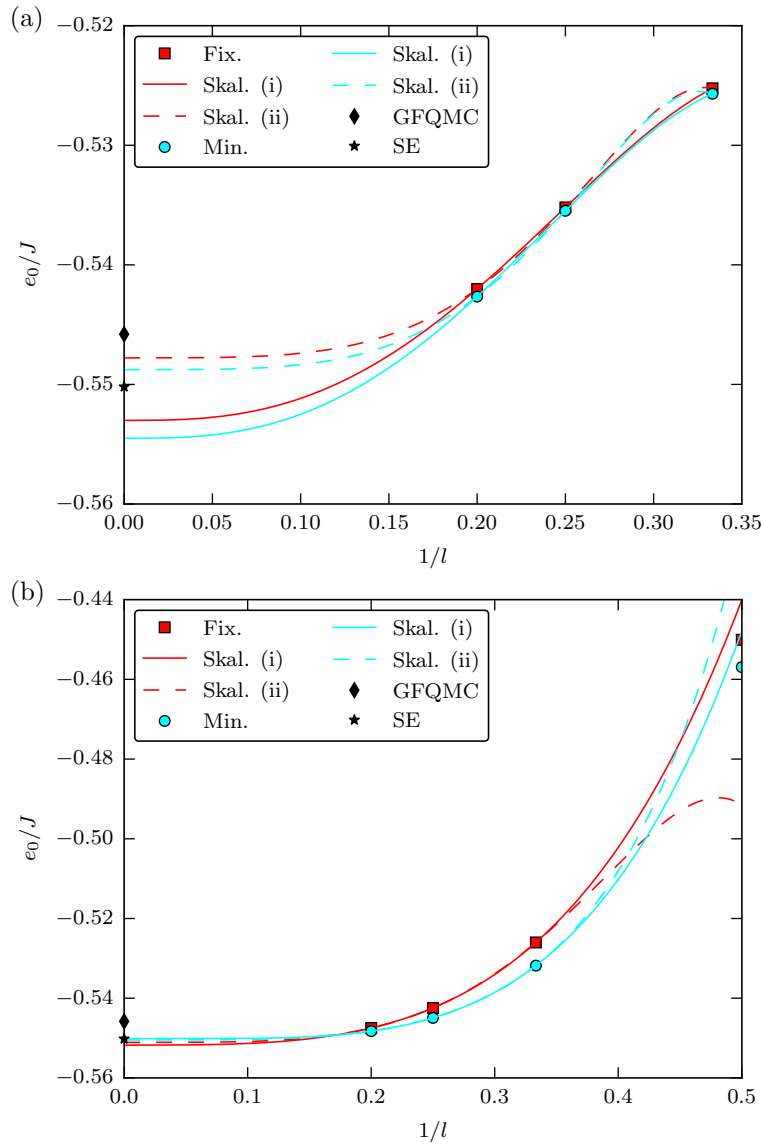


Abbildung 5.16: Skalierung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Dreiecksgitter für die (a) arithmetische Graphenentwicklung und (b) Quadrantenwicklung in Abhängigkeit von der inversen Längenskala $1/l$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise stellen die Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode dar. Die schwarzen Rauten und Sterne sind die Ergebnisse aus Greensfunktionen QMC (GFQMC) [67] bzw. extrapolierte Reihenentwicklung (SE) [174]. Durchgezogene und gestrichelte Linien sind Skalierungen von Typ (i) bzw. Typ (ii).

Methode	Extrapolation	e_0/J	$\Delta e_0/J$	m_0	Δm_0
Arith. (Fix.)	Skal. (i) (4, 6, 8)	-0.55301	0.0028	-	-
Arith. (Fix.)	Skal. (ii) (4, 6, 8)	-0.54778	0.0024	0.0438	0.15
Quad. (Fix.)	Skal. (i) (3-5)	-0.55178	0.0016	0.0898	0.10
Quad. (Fix.)	Skal. (ii) (3-5)	-0.55110	0.00090	0.2104	0.020
Arith. (Min.)	Skal. (i) (4, 6, 8)	-0.55451	0.0043	-	-
Arith. (Min.)	Skal. (ii) (4, 6, 8)	-0.54877	0.0014	0.0646	0.13
Quad. (Min.)	Skal. (i) (3-5)	-0.55015	0.00005	0.1949	0.0049
Quad. (Min.)	Skal. (ii) (3-5)	-0.55049	0.00029	0.2196	0.030

Tabelle 5.3: Vergleich der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und der Untergittermagnetisierung m_0 für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter bei Verwendung der arithmetischen Graphenentwicklung (Arith.) sowie der Quadratentwicklung (Quad.). Die Methode zur Bestimmung von K ist in Klammern hinter der verwendeten Graphenentwicklung angegeben (Fix. für die Fixpunktmethode und Min. für die Minimummethode). Die für die Extrapolation verwendeten Ordnungen stehen in Klammern hinter dem Extrapolationsschema. Ebenfalls eingetragen sind die Abweichungen $\Delta e_0 := |e_0 - e_0^{\text{SE}}|$ und $\Delta m_0 := |m_0 - m_0^{\text{SE}}|$ zu den extrapolierten Werten aus der Reihenentwicklung [174].

Als nächstes wird die Untergittermagnetisierung m_0 der langreichweitigen 120° -Ordnung des Heisenbergmodells auf dem Quadratgitter untersucht. Auch hier sind die Randfelder essentiell, um eine stabile NLCE zu erhalten. Wohldefinierte Minima in Abhängigkeit von K/J sind in Abbildung 5.17 für die arithmetische Graphenentwicklung und die Quadratentwicklung erkennbar. Wie für die Grundzustandsenergie fallen diese monoton in Richtung der mit GFQMC und Reihenentwicklung ermittelten Werte (5.27) bzw. (5.28) ab. Sie sind allerdings – wie bereits bei der Diskussion des Heisenbergmodells auf dem Quadratgitter festgestellt wurde – nicht so gut konvergiert wie die Grundzustandsenergie. So ist das Minimum der Quadratentwicklung in Ordnung 5 etwa

$$m_0^{\min}(l_{\text{quad}} = 5) \approx 0.27 \quad (5.31)$$

und damit deutlich vom Reihenentwicklungswert (5.28) entfernt, während die zugehörige Grundzustandsenergie lediglich um etwa 10^{-3} vom Reihenentwicklungswert (5.26) abweicht. Entsprechende Skalierungen der Untergittermagnetisierung von Typ (i) und (ii) sind für beide Entwicklungen in Abbildung 5.18 dargestellt. Für die arithmetische Entwicklung ist in Abbildung 5.18 (a) ganz deutlich erkennbar, dass beide Skalierungstypen ziemlich schlechte Ergebnisse liefern. Die Skalierung von Typ (i) versagt sogar vollständig. Aus diesem Grund ist noch eine Ausgleichsgerade in $1/l$ eingetragen, welche einen plausiblen Wert für m_0 liefert. Ganz im Gegensatz dazu steht die Quadratentwicklung (siehe Abbildung 5.18 (b)), wo die Skalierung zu guten Werten für die Untergittermagnetisierung führt, wie auch ein Vergleich der in Tabelle 5.3 eingetragenen Werte, mit dem GFQMC-Wert (5.27) und dem extrapolierten Reihenentwicklungswert (5.28), offenbart. Die einzige Ausnahme ist die Skalierung von Typ (i) für die mit der Fixpunktmethode bestimmten Werte, worin sich die Sensibilität der Skalierung aufgrund der geringen Anzahl an Datenpunkten zeigt, da die erwartete Krümmung von den drei Datenpunkten nicht gestützt wird.

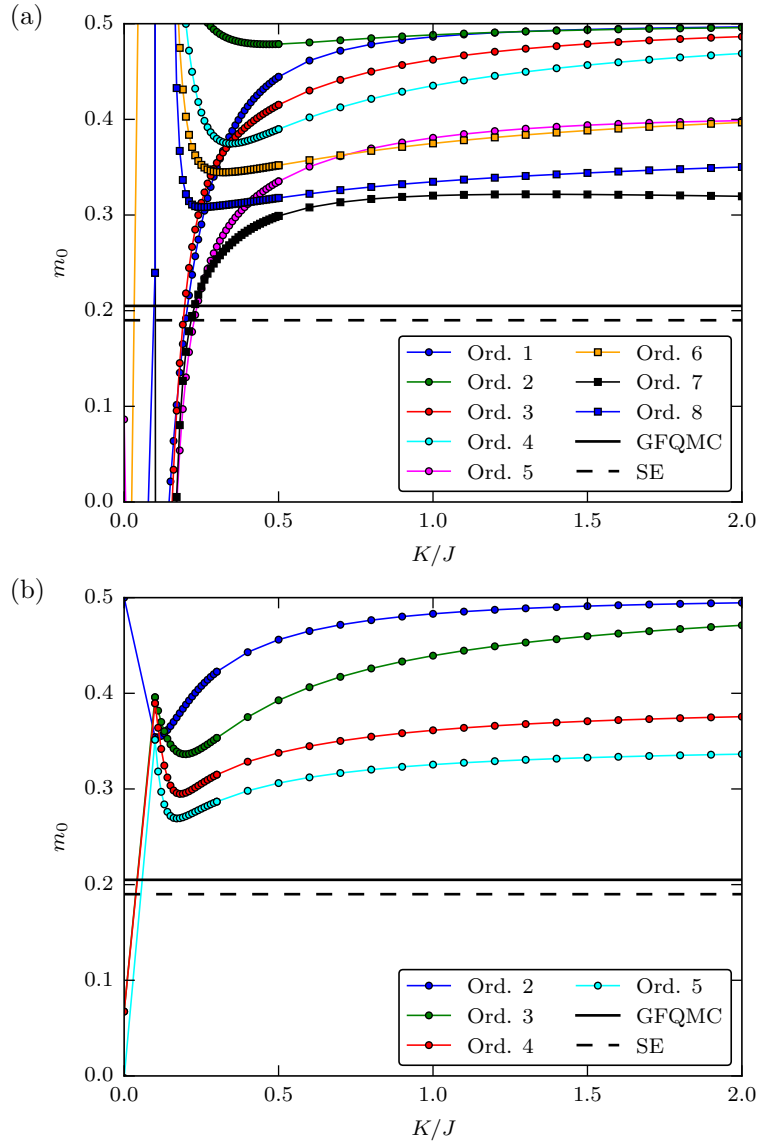


Abbildung 5.17: Mit der Randfeldmethode und der (a) arithmetischen Graphenentwicklung sowie (b) Quadratentwicklung bestimmte Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von K/J für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter. Verschiedenfarbige Symbole repräsentieren unterschiedliche Ordnungen. Die durchgezogene und die gestrichelte horizontale schwarze Linie stellen die Ergebnisse aus Greensfunktionen QMC (GFQMC) [67] bzw. extrapolierten Reihenentwicklung (SE) [174] dar. Durchgezogene farbige Linien sind Hilfslinien.

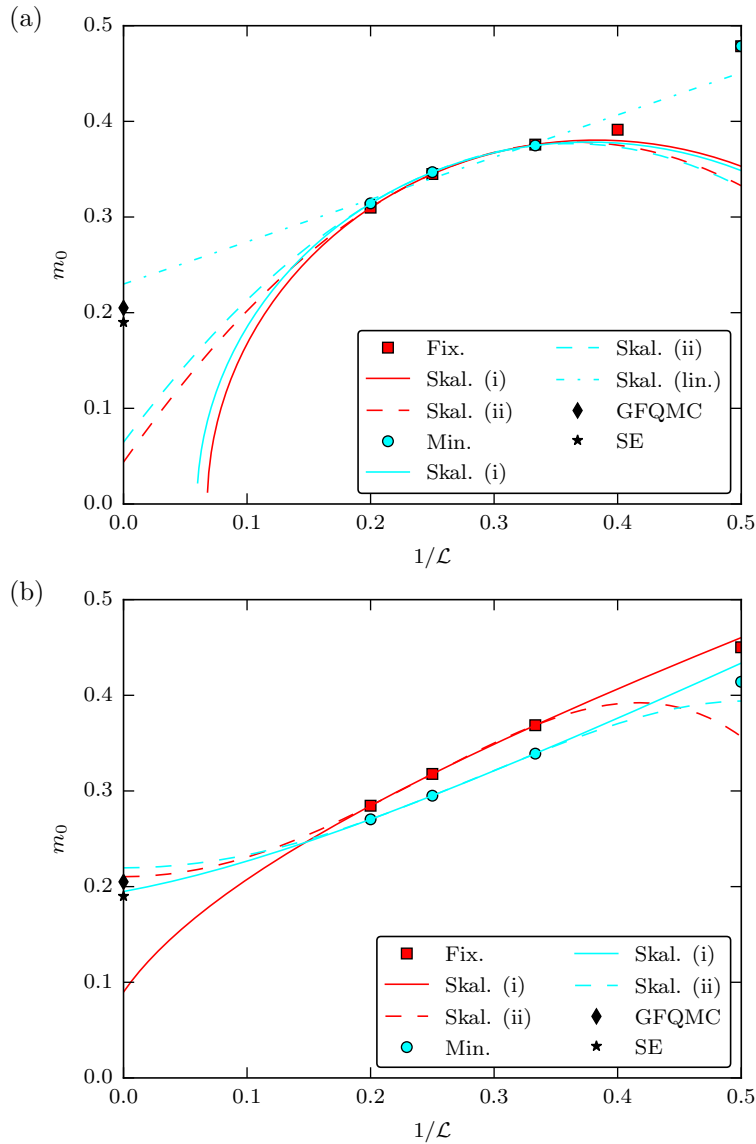


Abbildung 5.18: Skalierung der Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 Heisenbergmodells auf dem Dreiecksgitter für die (a) arithmetische Graphenentwicklung und (b) Quadratentwicklung in Abhängigkeit von der inversen Längenskala $1/l$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise stellen die Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode dar. Die schwarzen Rauten und Sterne sind die Ergebnisse aus Greensfunktionen QMC (GFQMC) [67] bzw. extrapolierte Reihenentwicklung (SE) [174]. Durchgezogene und gestrichelte Linien sind Skalierungen von Typ (i) bzw. Typ (ii). Die gepunktet-gestrichelte Linie in (a) ist eine lineare Ausgleichsgerade durch die Ordnungen 4, 6 und 8 der arithmetischen Graphenentwicklung.

Eine Erklärung für die schlechte Qualität der arithmetischen Graphenentwicklung folgt aus den unterschiedlichen Längenskalen, der in einer Ordnung betrachteten Graphen. Während der reine Beitrag einer NLCE Ordnung bei der arithmetischen Entwicklung Graphen mit gleicher typischer Längenskala l_{arith} enthält, so können die Graphen ein ganz unterschiedliches Längenverhältnis L_x/L_y aufweisen. Dies kann durchaus zu einem komplizierten Skalierungsverhalten führen. Anders verhält sich dabei die Quadratentwicklung, wo jede NLCE-Ordnung durch die Längenskala l_{quad} des größten quadratischen Graphen dominiert wird. Folglich wird ein besseres Skalierungsverhalten in der Längenskala erwartet. Diese Argumentation gilt auch für das Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter, wo diese Eigenschaften vermutlich aufgrund des Paritätseffektes, welcher auf dem Dreiecksgitter nicht vorhanden ist, nicht beobachtet werden. Weiterhin ist eine Skalierung aufgrund der geringen Anzahl an Datenpunkten herausfordernd und es wäre interessant das Skalierungsverhalten in Abhängigkeit von der Längenskala l weiter zu untersuchen, wozu allerdings mehr Datenpunkte hilfreich wären.

5.1.7 Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Dreiecksgitter

Nun wird die λ -Achse zwischen 0 und 1 für das Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Dreiecksgitter untersucht. Der Hamiltonoperator nach der für die 120° -Ordnung entsprechenden Untergitterrotation ist durch Gleichung (5.24) gegeben. Aufgrund der endlichen Energielücke und der daraus folgenden endlichen Korrelationslänge wird für $\lambda < 1$, wie beim Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Quadratgitter, ein besseres Konvergenzverhalten erwartet. Da sich für den Heisenbergfall $\lambda = 1$ die arithmetische Entwicklung als kompliziert erwiesen hat und die Quadratentwicklung sehr gute Ergebnisse erzielte, wird hier nur Letztere betrachtet.

In Abbildung 5.19 sind die skalierten Werte der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J sowie der Untergittermagnetisierung m_0 gemäß der Skalierungen von Typ (i) und Typ (ii) für die Fixpunkt- und Minimumsmethode eingetragen. Ebenfalls eingetragen sind die Störungsreihen [174] bis Ordnung 13 in λ , die extrapolierten Werte der Reihenentwicklung [174] bei $\lambda = 1$ und die GFQMC-Werte [67]. Die Abhängigkeiten der Grundzustandsenergie und der Untergittermagnetisierung von der Randfeldstärke sowie die Skalierungen für alle betrachteten λ -Werte, finden sich in den Abbildungen B.19 bis B.34 in Anhang B.3 und werden hier nicht weiter diskutiert. Generell zeigen sie ein ähnliches Verhalten wie für das XXZ-Modell auf dem Quadratgitter, auch wenn die Skalierungen etwas sensibler und damit anspruchsvoller sind. Insbesondere wurden die Werte b_1 und \bar{b}_1 der Skalierungen für die Untergittermagnetisierung (siehe Gleichungen (5.11) und (5.13)) für $\lambda < 1$ auf positive Werte eingeschränkt¹⁾.

In der Tat konvergiert die Entwicklung für kleine λ sehr gut und ist nicht von der Reihenentwicklung zu unterscheiden, wie dies bereits für das XXZ-Modell auf dem Quadratgitter der Fall war. Allerdings ist das XXZ-Modell auf dem Dreiecksgitter frustriert und die Störungsreihe ist alternierend in λ , wodurch die Reihenentwicklung für große $\lambda > 0.6$ problematisch wird. Um weiterhin sinnvolle Resultate mit einer perturbativen Reihenentwicklung zu erhalten, kann diese mittels Padé-Approximationen (siehe Kapitel 2.3.2) extrapoliert werden. Die Minima der NLCE mit Randfeldern in Ordnung 5 verhalten sich hingegen entlang der gesamten λ -Achse sehr glatt und beschreiben bereits das grundlegende Verhalten. Für $\lambda > 0.6$, das heißt im selben Bereich wo die Reihenentwicklungen nicht mehr zuverlässig funktionieren, werden die Skalierungen zu unendlichen Ordnungen auch für die NLCE mit Randfeldern wichtig. Alles in allem wird die Physik des XXZ-Modells durch die NLCE mit Randfeldern und die Quadratentwicklung gut erfasst. Lediglich die Skalierung der Untergittermagnetisierung wird nahe $\lambda = 1$ herausfordernd, wie bereits für den Heisenbergfall in Unterkapitel 5.1.6 diskutiert wurde.

¹⁾Für die Einschränkung der Parameter wurde die Funktion `curve_fit` aus SciPy 0.17.1 verwendet.

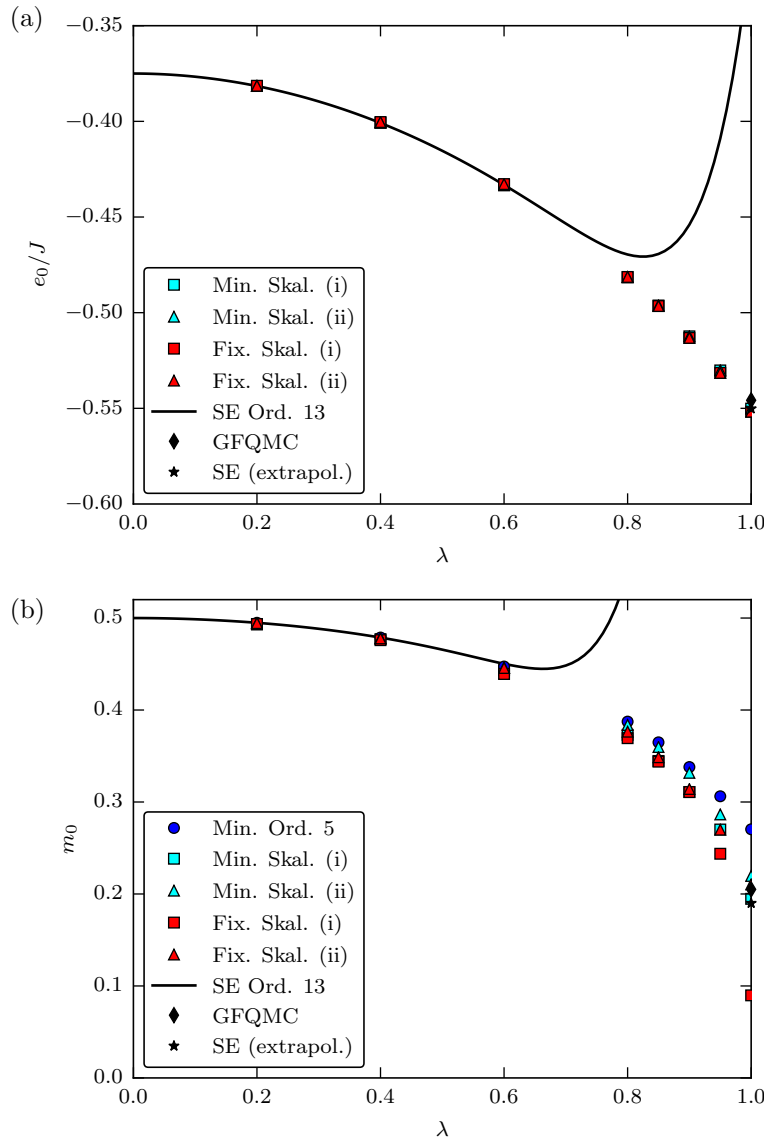


Abbildung 5.19: Durch Skalierungen von Typ (i) (Quadrate) und Typ (ii) (Dreiecke) aus der Quadratentwicklung für das Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Dreiecksgitter ermittelte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) Untergittermagnetisierung m_0 . Rote Symbole korrespondieren zur Fixpunktmethode, während cyanfarbene Symbole zur Minimumsmethode gehören. Ebenfalls aufgetragen sind die nichtextrapolierten Ergebnisse einer Hochordnungsreihenentwicklung (SE) [174] in λ bis Ordnung 13 (schwarze durchgezogene Linie) und den extrapolierten Werten bei $\lambda = 1$. Die blauen Kreise sind die nichtextrapolierten Werte für die Untergittermagnetisierung der NLCE in Ordnung 5 und die schwarzen Rauten entsprechen den GFQMC-Werten [67] für den Heisenbergpunkt $\lambda = 1$.

5.1.8 Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter

Abschließend soll noch das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter diskutiert werden. Da im Spin-1/2 Fall mit der Quadratentwicklung gute Ergebnisse erzielt werden konnten, wird für Spin-1 auch nur diese Entwicklung verwendet. Zum Vergleich der Ergebnisse werden die CCM-Resultate [166]

$$e_0^{\text{CCM}} = -1.83968J \quad (5.32)$$

$$m_0^{\text{CCM}} = 0.7086 \quad (5.33)$$

verwendet.

In Abbildung 5.20 sind die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und die Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J dargestellt. Das vom Spin-1/2 Dreiecksgitter bekannte und daher erwartete Verhalten ist auch für den Spin-1 Fall erkennbar. Es sind klar definierte Minima vorhanden, welche sich monoton den CCM-Werten annähern. Einzig die Untergittermagnetisierung in Ordnung 2 fällt etwas heraus, was, wie beim Quadratgitter, der kleinen NLCE Ordnung zugeschrieben werden kann. Leider ist wegen des größeren lokalen Hilbertraums die maximale Ordnung der NLCE auf Ordnung 4 beschränkt und die Minima in Ordnung 4 sind nicht so nah am CCM-Wert wie im Falle des unfrustrierten Quadratgitters. Ein Grund dafür könnte sein, dass die Quadratentwicklung aufgrund der geometrischen Frustration nicht so gut konvergiert. Dies ist allerdings bereits für das Spin-1/2 Modell der Fall, wo die Quantenfluktuationen sogar noch größer sind.

Die Skalierungen von Typ (i) und (ii) durch die Daten der Fixpunkt- und Minimumsmethode sind in Abbildung 5.21 gegen die inverse Längenskala $1/l$ aufgetragen. Weiterhin sind die skalierten Werte zusammen mit ihrer Abweichung zu den CCM-Werten (5.32) und (5.33) in Tabelle 5.4 eingetragen. Beide Skalierungen liefern sowohl für die Fixpunkt- als auch für die Minimumsmethode gute Resultate, wobei die Skalierung von Typ (i) für die Daten aus der Minimumsmethode das beste Ergebnis für die Untergittermagnetisierung liefert.

Methode	Extrapolation	e_0/J	$\Delta e_0/J$	m_0	Δm_0
Quad. (Fix.)	Skal. (i) (3, 4)	-1.84689	0.0072	0.6961	0.012
Quad. (Fix.)	Skal. (ii) (3, 4)	-1.83704	0.0026	0.7862	0.078
Quad. (Min.)	Skal. (i) (3, 4)	-1.84180	0.0021	0.7175	0.0089
Quad. (Min.)	Skal. (ii) (3, 4)	-1.83502	0.0047	0.7790	0.070

Tabelle 5.4: Vergleich der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und der Untergittermagnetisierung m_0 für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Dreiecksgitter bei Verwendung der Quadratentwicklung. Die Methode zur Bestimmung von K ist in Klammern hinter der verwendeten Graphenentwicklung angegeben (Fix. für die Fixpunktmethode und Min. für die Minimumsmethode). Die für die Extrapolation verwendeten Ordnungen stehen in Klammern hinter dem Extrapolationsschema. Ebenfalls eingetragen sind die Abweichungen $\Delta e_0 := |e_0 - e_0^{\text{CCM}}|$ und $\Delta m_0 := |m_0 - m_0^{\text{CCM}}|$ zu den CCM-Werten [166].

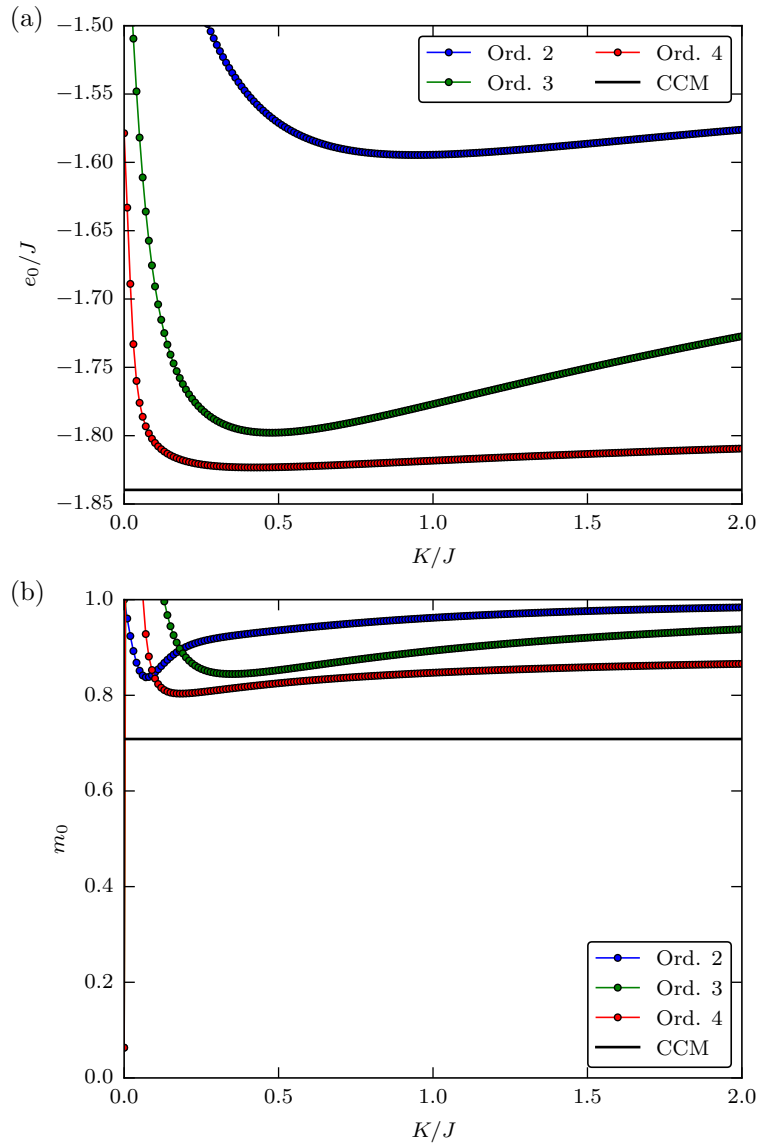


Abbildung 5.20: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J des Spin-1 Heisenbergmodells auf dem Dreiecksgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der durch die CCM bestimmte Wert [166]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

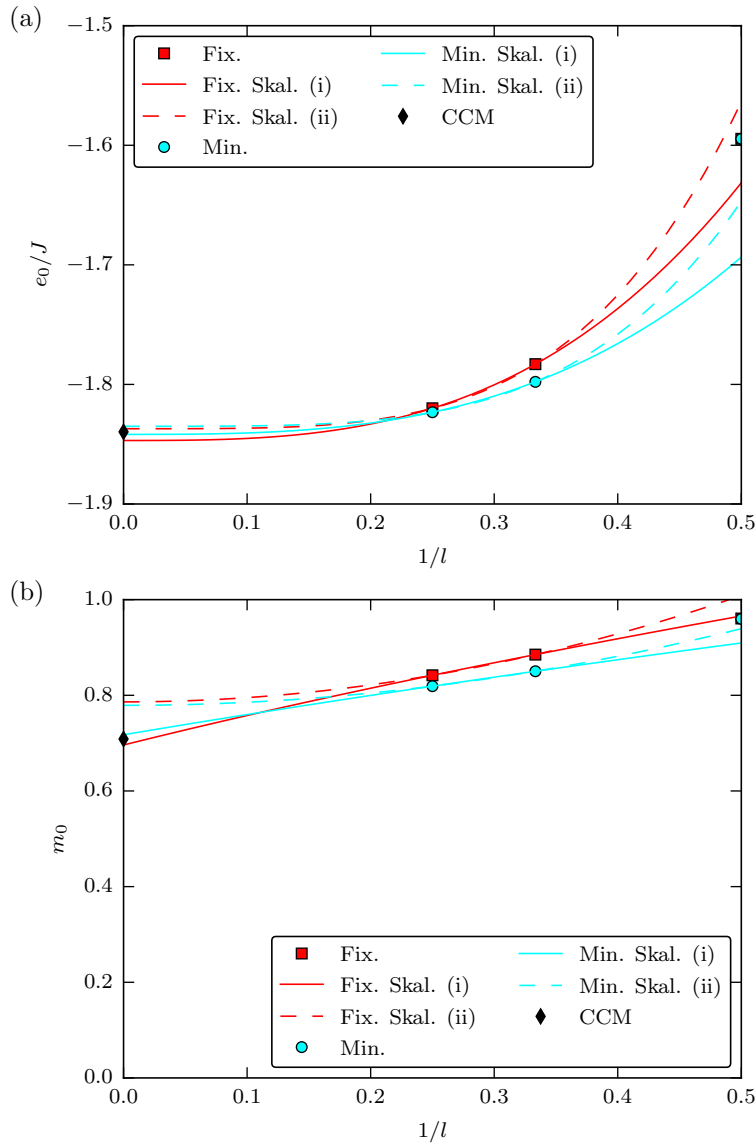


Abbildung 5.21: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1 Heisenbergmodells auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von $1/l$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die mit der CCM bestimmten Werte [166] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 4 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

5.1.9 Schlussfolgerungen

Es konnte anhand des Heisenbergmodells auf dem Quadrat- und Dreiecksgitter für Spin-1/2 und Spin-1 gezeigt werden, dass die NLCE mit Randfeldern eine systematische Entwicklung um langreichweitig magnetisch geordnete Phasen erlaubt, indem die langreichweitige Ordnung in die exakte Diagonalisierung auf den einzelnen Graphen miteinbezogen wird. Dies gelingt durch die Randfelder, welche die relevante Symmetrie der langreichweitigen Ordnung brechen. Für sämtliche betrachteten Modelle waren die Randfelder essentiell, um eine kontrollierte NLCE für die Grundzustandsenergie und Untergittermagnetisierung zu erhalten.

Insgesamt wurden vier verschiedene Graphenentwicklungen durchgeführt, wobei die volle Graphenentwicklung und die Rechteckentwicklung ein kompliziertes Skalierungsverhalten aufweisen. Bei der vollen Graphenentwicklung ist nicht klar, wie eine typische Längenskala zu definieren wäre, während die Rechteckentwicklung kein glattes Verhalten bezüglich der NLCE-Ordnung besitzt. Im Unterschied dazu lieferten die arithmetische Graphenentwicklung sowie die Quadratentwicklung gute Resultate und die zugehörigen Skalierungen zu unendlichen Ordnungen konnten erfolgreich durchgeführt werden. Dennoch konnte beobachtet werden, dass die Skalierungen für die arithmetische Graphenentwicklung komplizierter sind, was vermutlich auf deutlich unterschiedliche Längenverhältnisse bei gleicher Längenskala zurückgeht. Für die Quadratentwicklung hingegen wird die Längenskala durch den größten quadratischen Graph dominiert und die Skalierungen verlaufen unproblematischer. Betrachtet wurden zwei verschiedene Skalierungsgesetze für die NLCE-Daten, welche qualitativ ähnliche Resultate lieferten. Es wäre eine wichtige, wenn auch sehr schwierige, Aufgabe korrekte Skalierungsgesetze aus grundlegenden Prinzipien abzuleiten.

Das unfrustrierte Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter wurde zum Testen der Methode verwendet und sowohl die Fixpunkt- als auch die Minimumsmethode lieferten für die arithmetische Graphenentwicklung sowie die Quadratentwicklung ähnliche Ergebnisse, welche gut mit bereits bekannten QMC-Daten übereinstimmen. Interessant ist, dass die Quadratentwicklung für das frustrierte Spin-1/2 Dreiecksgitter deutlich besser funktioniert, als für das Quadratgitter. Dort ist nämlich kein Paritätseffekt vorhanden und es stehen folglich mehr Datenpunkte für die Skalierungen zur Verfügung. Eine reorganisierte Graphenentwicklung für das Quadratgitter zu formulieren, in der kein Paritätseffekt mehr vorhanden ist, wäre eine sinnvolle Erweiterung der betrachteten Graphenentwicklungen.

5.2 Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter

In diesem Unterkapitel wird das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter mithilfe von NLCEs untersucht. Dieses Modell besitzt einen langreichweitig geordneten trimerisierten Grundzustand [69–74] und demzufolge keine magnetische Ordnung. Im Unterschied zu den magnetisch geordneten Quantenphasen in Kapitel 5.1 bricht dieser Grundzustand nicht die kontinuierliche $SU(2)$ -Symmetrie, sondern die diskrete Symmetrie der „hoch“ und „runter“-Dreiecke des Kagomegitters. Das System weist erwartungsgemäß eine endliche Energielücke auf, welches der Konvergenz von NLCEs zugute kommt. Es wird sich herausstellen, dass die Existenz eines quantenkritischen Punktes auf einem quasi eindimensionalen Teilsystem – der Spin-1 Dreieckskette – dennoch zu einem nichtmonotonen Konvergenzverhalten der Grundzustandsenergie des zweidimensionalen Kagomegitters führt. Durch die Einführung von Randfeldern wird ein monotonen Konvergenzverhalten erreicht, indem die Quantenkritikalität des Teilsystems unterdrückt wird. Zusätzlich wird noch eine reorganisierte Graphenentwicklung durchgeführt, welche – ähnlich der Rechteck- und Quadratentwicklungen aus Kapitel 5.1 – in symmetrischeren Graphen entwickelt und ebenfalls zu einem monotonen Konvergenzverhalten der Grundzustandsenergie führt. Die Ergebnisse dieses Kapitels wurden bereits in den Referenzen 74 und 109 publiziert.

Der Hamiltonoperator des antiferromagnetischen ($J > 0$) Spin-1 Heisenbergmodells auf dem in Abbildung 5.22 (a) dargestellten Kagomegitter lautet

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle \in \Delta} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \lambda J \sum_{\langle i,j \rangle \in \nabla} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (5.34)$$

wobei die Summe $\sum_{\langle i,j \rangle \in \Delta}$ über alle nächsten Nachbarn der „hoch“-Dreiecke (Spitze ist oben) läuft und die Summe $\sum_{\langle i,j \rangle \in \nabla}$ über alle nächsten Nachbar der „runter“-Dreiecke läuft. Entsprechend sind zwei hoch-Dreiecke immer über eine Kopplung λJ eines runter-Dreiecks verbunden. Der Parameter $\lambda \in [0,1]$ erlaubt es zwischen dem Grenzfall isolierter Dreiecke ($\lambda = 0$) und dem isotropen Kagomegitter ($\lambda = 1$) zu interpolieren.

Für $\lambda = 0$ besteht das System aus isolierten hoch-Dreiecken und der eindeutige Grundzustand ist ein Produkt von Singulettts auf den Dreiecken. Es sei angemerkt, dass im Gegensatz zum Spin-1/2 Fall drei Spin-1 ein eindeutiges Singulett formen können, welches die niedrigste Energie hat. Alle Anregungen besitzen eine endliche Energielücke zum Grundzustand und können (für $\lambda = 0$) durch die magnetischen Quantenzahlen der 26 verbleibenden Zustände der einzelnen Dreiecke komplett beschrieben werden.

Falls das isotrope Modell für $\lambda = 1$ eine spontane Trimerisierung zeigen sollte, so kann erwartet werden, dass die Grundzustände für $\lambda = 0$ und $\lambda = 1$ adiabatisch miteinander verknüpft sind und es dementsprechend keinen Phasenübergang geben sollte und die Energielücke für alle $\lambda \in [0,1]$ endlich bleibt. Es bietet sich für die NLCE daher an, vom Grenzfall isolierter Dreiecke aus zu starten und eine Graphenentwicklung um die trimerisierte Phase durchzuführen, indem die hoch-Dreiecke als elementarer Baustein für die Graphen verwendet werden. Aufgrund der Symmetrie des Gitters würde eine analoge Entwicklung in runter-Dreiecken die exakt selben Ergebnisse liefern.

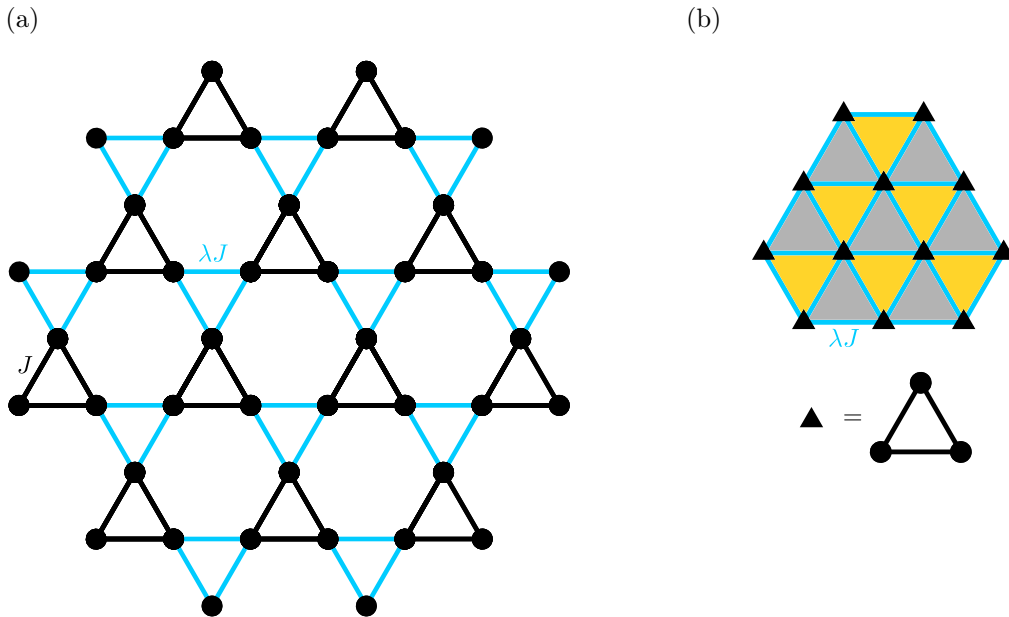


Abbildung 5.22: (a) Ausschnitt aus dem Kagomegitter, bei dem die Spins auf den Vertizes (schwarze Kreise) sitzen. Nächstnachbar Kopplungen J auf hoch-Dreiecken sind durch schwarze Linien dargestellt, während die nächstnachbar Kopplungen λJ auf den runter-Dreiecken blau dargestellt sind. (b) Effektives Dreiecksgitter, bei denen die hoch-Dreiecke des Kagomegitters durch effektive Gitterplätze (schwarze Dreiecke) ersetzt werden. Die Kopplung zwischen den effektiven Gitterplätzen entspricht den Kopplungen auf den runter-Dreiecken im ursprünglichen Kagomegitter. Wichtig ist, dass hoch- und runter-Dreiecke im effektiven Dreiecksgitter (durch graue bzw. orangene Flächen veranschaulicht) topologisch inäquivalent sind, da sie Hexagonen bzw. runter-Dreiecken im Kagomegitter entsprechen.

Zuerst werden in Unterkapitel 5.2.1 die verwendeten Graphenentwicklungen vorgestellt. Es werden zwei verschiedene Graphenentwicklungen diskutiert: Erstens eine volle Graphenentwicklung in den hoch-Dreiecken des Gitters sowohl ohne als auch mit Randfeldern. Zweitens eine reorganisierte Graphenentwicklung in symmetrischeren Graphen. Im Anschluss daran wird als erstes das Heisenbergmodell auf der Spin-1 Dreieckskette in Unterkapitel 5.2.2 diskutiert, um letztendlich in Unterkapitel 5.2.3 die Ergebnisse für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter vorzustellen.

5.2.1 Graphenentwicklungen für das Kagomegitter

Volle Graphenentwicklung in Dreiecken

Da eine Beschreibung ausgehend vom trimerisierten Grundzustand angestrebt wird, ist eine Entwicklung nicht in einzelnen Gitterplätzen, sondern in einzelnen Dreiecken sinnvoll. Dazu wird jedes hoch-Dreieck als ein effektiver Gitterplatz behandelt, wie in Abbildung 5.22 (b) grafisch dargestellt ist. Das effektive Gitter ist dann ein Dreiecksgitter, wobei jedoch die hoch- und runter-Dreiecke dieses effektiven Gitters topologisch inäqui-

valent sind. Sie entsprechen nämlich Hexagonen bzw. runter-Dreiecken des ursprünglichen Kagomegitters. Diese Eigenschaft muss bei der Graphenentwicklung berücksichtigt werden, welche in dieser Arbeit bis zu $N_{\text{dr}} = 6$ effektiven Gitterplätzen, also 6 hoch-Dreiecken (18 Spin-1) des Kagomegitters, durchgeführt wird. In Abbildung 5.23 sind alle topologisch inäquivalenten Graphen des effektiven Dreiecksgitters zusammen mit ihrer Entsprechung auf dem Kagomegitter bis $N_{\text{dr}} = 3$ abgebildet. Es gibt für $N_{\text{dr}} = 1, \dots, 6$ jeweils 1, 1, 4, 9, 46 und 228 topologisch inäquivalente Graphen.

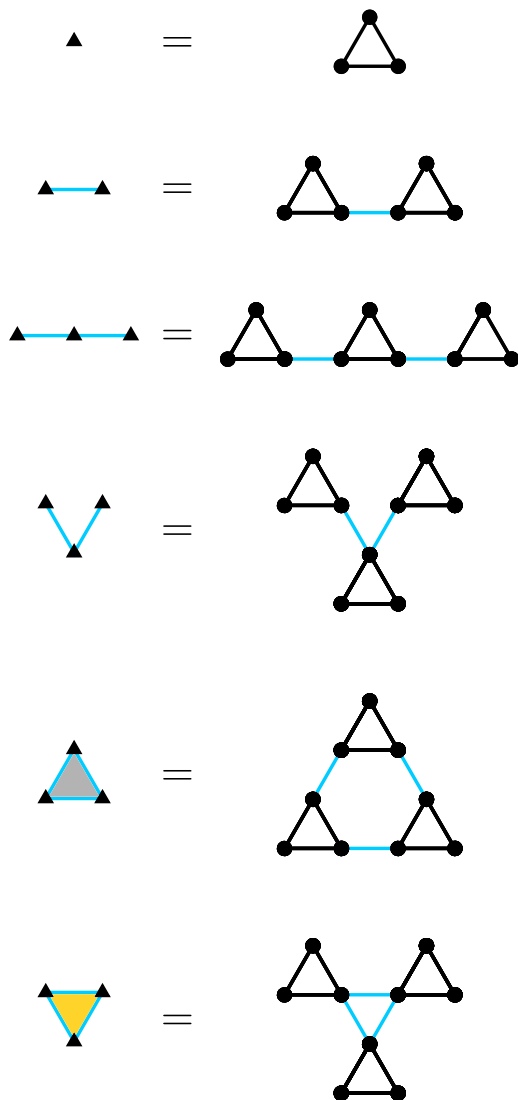


Abbildung 5.23: Alle topologisch inäquivalenten Graphen der vollen Graphenentwicklung in Dreiecken mit bis zu $N_{\text{dr}} = 3$ Dreiecken. Links sind die Graphen des effektiven Dreiecksgitters und rechts ihre Entsprechung auf dem Kagomegitter dargestellt.

Reorganisierte Graphenentwicklung in Dreiecken

Es wird sich zeigen, dass die volle Graphenentwicklung (ohne Randfelder) durch die Kritikalität der eindimensionalen Dreieckskette ein nichtmonotones Konvergenzverhalten besitzt. Zwar behebt die Einführung von Randfeldern dieses Problem, doch es existiert auch eine reorganisierte Graphenentwicklung, welche sehr gut für das Spin-1 Kagomegitter geeignet ist. Grundlegend orientiert sich diese Entwicklung an der Rechteckentwicklung für das Quadratgitter [108, 116–118] (siehe auch Kapitel 5.1.1) und der Entwicklung in Bienenwaben für das Bienenwabengitter [39]. Dabei wird sich auf eine kleinere schnittstabile Teilmenge an Graphen beschränkt, welche dafür allerdings eine deutlich höhere Symmetrie aufweisen, die zu der Gittersymmetrie korrespondiert.

Ausgehend vom effektiven Dreiecksgitter aus Abbildung 5.22 (b), sind die grundlegenden Bausteine die topologisch inäquivalenten hoch- und runter-Dreiecke. Für die reorganisierte Graphenentwicklung werden genau diese beiden Dreiecke als zentrales Element verwendet, sodass die Ordnung N_{re} der reorganisierten Entwicklung durch die Anzahl an hoch- und runter-Dreiecken definiert ist. Die Graphen werden weiterhin symmetrisch in den hoch- und runter-Dreiecken aufgebaut, sodass nur vollständige Graphen (siehe Definition 13) auftreten. Wie bei der Rechteckentwicklung reduziert dies auch die Anzahl an verwendeten Graphen enorm und alle Graphen sind zusammen mit der Ordnung, in der sie auftreten, in Abbildung 5.24 gezeigt. Die reorganisierte Entwicklung kann noch einen Schritt weitergeführt werden, indem nur Graphen beachtet werden in denen gleich viele hoch- und runter-Dreiecke (des effektiven Gitters) vorkommen. Dies entspricht der Beschränkung auf gerade Ordnungen N_{re} der reorganisierten Graphenentwicklung.

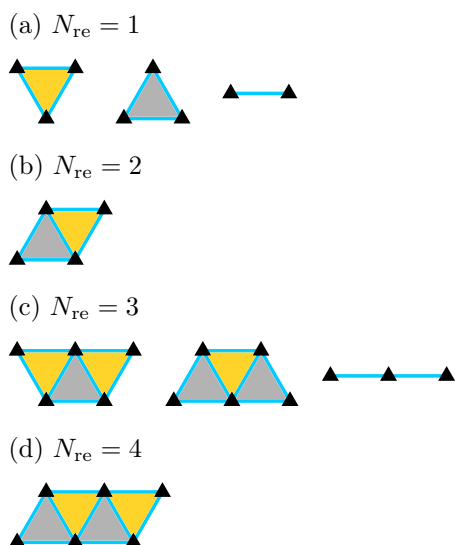


Abbildung 5.24: Alle Graphen der reorganisierten Graphenentwicklung die in Ordnung (a) $N_{\text{re}} = 1$, (b) $N_{\text{re}} = 2$, (c) $N_{\text{re}} = 3$ und (d) $N_{\text{re}} = 4$ auftreten.

5.2.2 Spin-1 Heisenbergmodell auf der Dreieckskette

In diesem Unterkapitel wird zuerst die eindimensionale Dreieckskette betrachtet, welche ein Teilsystem des Kagomegitters darstellt. Ausgehend von den Dreiecken ist dieses System unfrustriert und die Graphenentwicklung ist weiterhin sehr einfach, da es immer genau einen Graphen in jeder Ordnung gibt – nämlich die Kette mit exakt so vielen Dreiecken wie die Ordnung groß ist. Es wird sich herausstellen, dass dieses System einen quantenkritischen Punkt aufweist, welcher starke Auswirkungen auf eine volle (bezogen auf Dreiecke als effektiven Gitterplatz) Graphenentwicklung des zweidimensionalen Kagomegitters hat.

Der Hamiltonoperator des Spin-1 Heisenbergmodells auf der in Abbildung 5.25 dargestellten Dreieckskette ist durch

$$H = J \sum_{(i,j) \in \Delta} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J' \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (5.35)$$

gegeben. Die Summe $\sum_{(i,j) \in \Delta}$ läuft über alle Gitterplätze eines Dreiecks und die Summe $\sum_{\langle i,j \rangle}$ läuft über die beiden Gitterplätze, welche benachbarte Dreiecke koppeln.

Für $J' \rightarrow 0$ und $J > 0$ besteht das System aus entkoppelten Dreiecken, welche Spin-1 Singulett (Trimere) bilden. Der umgekehrte Fall $J \rightarrow 0$ und $J' > 0$ führt zu einer Dimerisierung von zwei Spin-1 zwischen den Dreiecken, wobei es eine extensive Anzahl an isolierten Spins, welche an den Spitzen der Dreiecke sind, gibt. Wird nun ein kleines $J > 0$ betrachtet, so kann der Hamiltonoperator in zweiter Ordnung entarteter Störungstheorie in J/J' um den Dimerzustand entwickelt werden, wodurch sich ein effektives Spin-1 Heisenbergmodell

$$H_{\text{eff}} = E_{0,\text{eff}} + J_{\text{eff}} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (5.36)$$

auf einer linearen Spinkette ergibt. Die additive Konstante $E_{0,\text{eff}}$ ist irrelevant und wird im Folgenden nicht weiter betrachtet, während die Heisenbergkopplung J_{eff} den Wert

$$J_{\text{eff}} = \frac{4}{3} \frac{J^2}{J'} \quad (5.37)$$

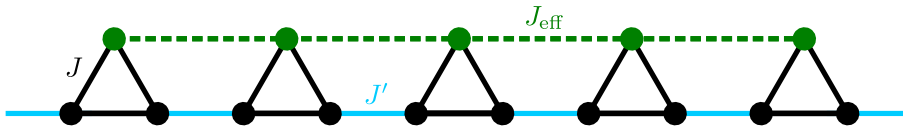


Abbildung 5.25: Ausschnitt der eindimensionalen Dreieckskette, bei der sich die Spins an den Vertices (schwarze und grüne Kreise) befinden. Die Heisenbergkopplung auf den Dreiecken ist J (schwarze Linien) und die unfrustrierte Kopplung zwischen den Dreiecken ist J' (blaue Linien). Im Grenzfall $J \rightarrow 0$ kann in zweiter Ordnung Störungstheorie eine effektive Spin-1 Heisenbergkette für die Spins an der Spitze der Dreiecke (grüne Kreise) abgeleitet werden. Die effektive Kopplung J_{eff} (gestrichelte grüne Linien) ist antiferromagnetisch.

aufweist. Die genaue Herleitung des effektiven Hamiltonoperators ist in Anhang C angegeben. Dieses System weist einen symmetriegeschützten, topologisch geordneten Grundzustand mit endlicher Haldanelücke auf [175–179]. Demzufolge wird mindestens ein Phasenübergang erwartet, wenn das Verhältnis

$$\lambda := \frac{J'}{J} \tag{5.38}$$

variiert wird.

Exakte Diagonalisierung für periodische Dreiecksketten

Zunächst wird das Grundzustandsphasendiagramm für periodische Ketten mit bis zu $N_{\text{dr}} = 6$ Dreiecken (entspricht 18 Spin-1) untersucht. Dazu wird mittels exakter Diagonalisierung die Grundzustandsenergie pro Platz $e_0^{(N_{\text{dr}})}$ sowie die Spinlücke Δ , als Differenz der kleinsten Energien im $S^z = 0$ und $S^z = 1$ Sektor, bestimmt. Die Ergebnisse für die Spinlücke Δ und die zweite Ableitung von $e_0^{(N_{\text{dr}})}$ finden sich in Abbildung 5.26. Es ist klar erkennbar, dass die Spinlücke im Bereich $\lambda_c \approx 0.8$ ein Minimum aufweist. Eine lineare Extrapolation in $1/N_{\text{dr}}$ (siehe unterer Bildeinschub in Abbildung 5.26 (a)) zeigt, dass diese im thermodynamischen Limes schließt, was einen Zusammenbruch der trimerisierten Phase signalisiert. Weiterhin zeigt im selben Bereich die zweite Ableitung der Grundzustandsenergie (vergleiche Abbildung 5.26 (b)) eine Resonanz, was im Einklang mit einer Divergenz ebendieser Größe im thermodynamischen Limes steht. Für $\lambda > 1$ ergeben sich keine weiteren Anzeichen für einen Phasenübergang, sodass sich das Grundzustandsphasendiagramm aus den beiden bereits diskutierten Quantenphasen zusammensetzt, welche durch einen Übergang bei $\lambda_c \approx 0.8$ getrennt sind.

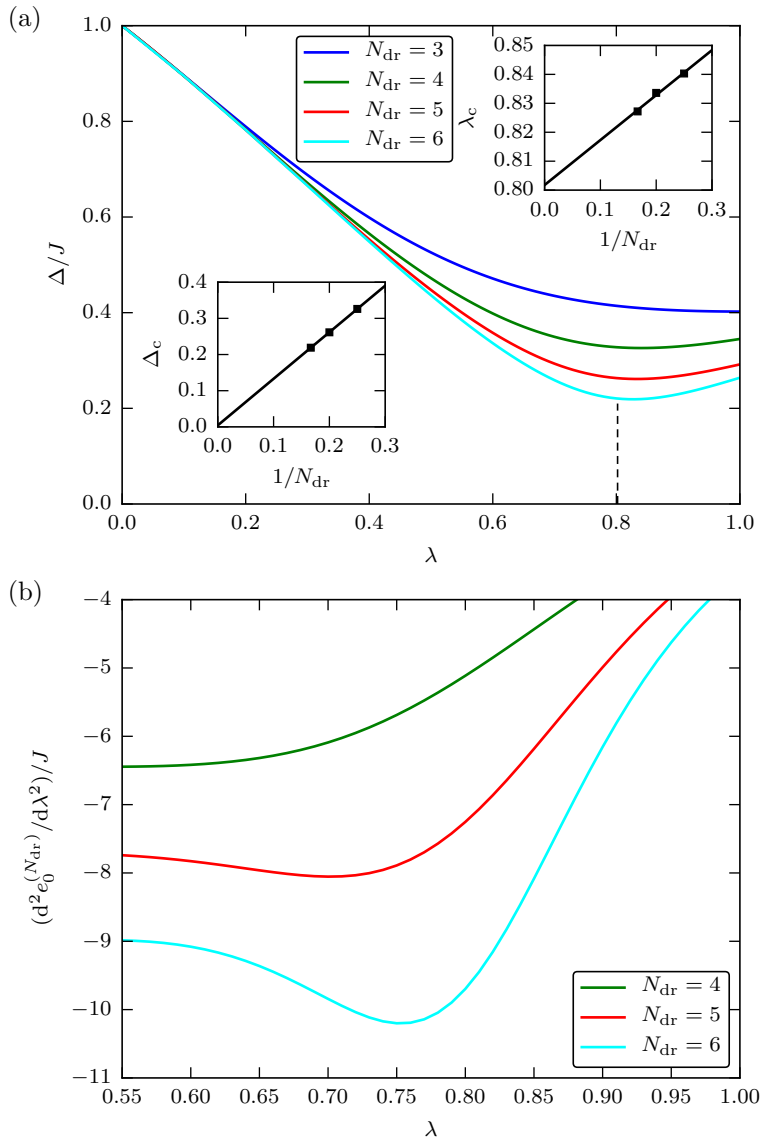


Abbildung 5.26: (a) Spinlücke Δ in Abhängigkeit von λ für die Spin-1 Dreieckskette mit periodischen Randbedingungen und N_{dr} Dreiecken. Die gestrichelte vertikale Linie liegt bei dem extrapolierten Wert $\lambda_c = 0.802$ für den kritischen Punkt. *Oberer Bildeinschub:* Lineare Extrapolation der kritischen λ -Werte, bei denen die Spinlücke minimal ist. *Unterer Bildeinschub:* Lineare Extrapolation des Minimums Δ_c der Spinlücke. (b) Zweite Ableitung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{\text{dr}})} / J$.

NLCE für die Dreieckskette

Als Nächstes wird eine Graphenentwicklung in Dreiecken für die Dreieckskette durchgeführt. In jeder Ordnung N_{dr} existiert dann genau ein Graph $\mathcal{G}_{N_{\text{dr}}}$, welcher eine lineare Kette bestehend aus N_{dr} verbundenen Dreiecken ist. Der Einbettungsfaktor des Graphen $\mathcal{G}_{N_{\text{dr}}}$ auf die unendliche Kette ist immer gleich 1. Weiterhin ist die Berechnung der Grundzustandsenergie $e_0^{(N_{\text{dr}})}$ nach Einbettung aller Graphen bis Ordnung N_{dr} sehr einfach und lässt sich leicht über die auf den Graphen $\mathcal{G}_{N_{\text{dr}}}$ bestimmte Grundzustandsenergie $E_0^{\mathcal{G}_{N_{\text{dr}}}}$ entsprechend der Formel

$$e_0^{(N_{\text{dr}})} = E_0^{\mathcal{G}_{N_{\text{dr}}}} - E_0^{\mathcal{G}_{N_{\text{dr}}-1}} \quad (5.39)$$

ausrechnen, da die Beiträge aller Untergraphen bei der Einbettung exakt wegfallen (vergleiche auch mit der Finite Lattice Method [116, 117]). Die Ergebnisse für $e_0^{(N_{\text{dr}})}$ sind bis $N_{\text{dr}} = 6$ in Abbildung 5.27 (a) gegen λ aufgetragen. Erkennbar ist eine mit zunehmender Ordnung sehr gute Konvergenz und ein glattes Verhalten von $e_0^{(N_{\text{dr}})}$. Auch die zweite Ableitung in Abbildung 5.27 (b) zeigt (bis auf Ungenauigkeiten durch die numerische Ableitung) keinerlei Resonanzen. In Abbildung 5.28 (a) sind weiterhin die reduzierten Beiträge

$$e_{0,\text{red}}^{(N_{\text{dr}})} := e_0^{(N_{\text{dr}})} - e_0^{(N_{\text{dr}}-1)}, \quad (5.40)$$

welche der reinen Energieänderung durch die hinzukommende Ordnung entsprechen, dargestellt. Dort lässt sich das glatte Verhalten noch besser erkennen, insbesondere fällt der reduzierte Beitrag mit zunehmendem N_{dr} schnell ab und nimmt mit zunehmendem λ zu. Weder in der Grundzustandsenergie, noch in den reduzierten Beiträgen lassen sich Anzeichen für einen quantenkritischen Punkt finden. Dies liegt vermutlich daran, dass die Quantenfluktuationen der trimerisierten Phase auf den gewählten Graphen optimal berücksichtigt werden, während die entsprechenden Fluktuationen der Phase für $\lambda > \lambda_c$ nur unzureichend repräsentiert sind.

Interessanterweise gibt es eine alternative Möglichkeit das quantenkritische Verhalten mit der NLCE zu erfassen. Aufgrund der endlichen Korrelationslänge in lückenbehafteten Systemen wird eine exponentielle Konvergenz – also ein exponentieller Abfall der reduzierten Beiträge – erwartet. Dies sollte für alle λ außer λ_c gelten, während bei $\lambda = \lambda_c$ ein algebraischer Abfall vorliegen sollte [103]. Abbildung 5.28 (b) zeigt die reduzierten Beiträge in Abhängigkeit von $1/N_{\text{dr}}$ für verschiedene λ in doppelt logarithmischer Darstellung. Für $\lambda = 0.8 \approx \lambda_c$ ist das Verhalten sehr gut durch eine algebraische Funktion (gerade in einem doppelt logarithmischen Plot) beschreibbar, während es für kleinere und größere λ deutlich von diesem abweicht.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die eindimensionale Spin-1 Dreieckskette einen quantenkritischen Punkt bei $\lambda_c \approx 0.8$ besitzt, das heißt die trimerisierte Phase ist nicht stabil bis zum isotropen Punkt $\lambda = 1$. Folglich fallen die reduzierten Beiträge der Grundzustandsenergie in der NLCE nur algebraisch ab, wenn λ in der Nähe des kritischen Punktes liegt. Im nun folgenden Unterkapitel wird das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter untersucht und es wird sich zeigen, dass die Existenz des quantenkritischen Punktes

und der daraus folgende algebraische Abfall der reduzierten Beiträge einen starken Einfluss auf die Konvergenz der vollen Graphenentwicklung für das Kagomegitter hat.

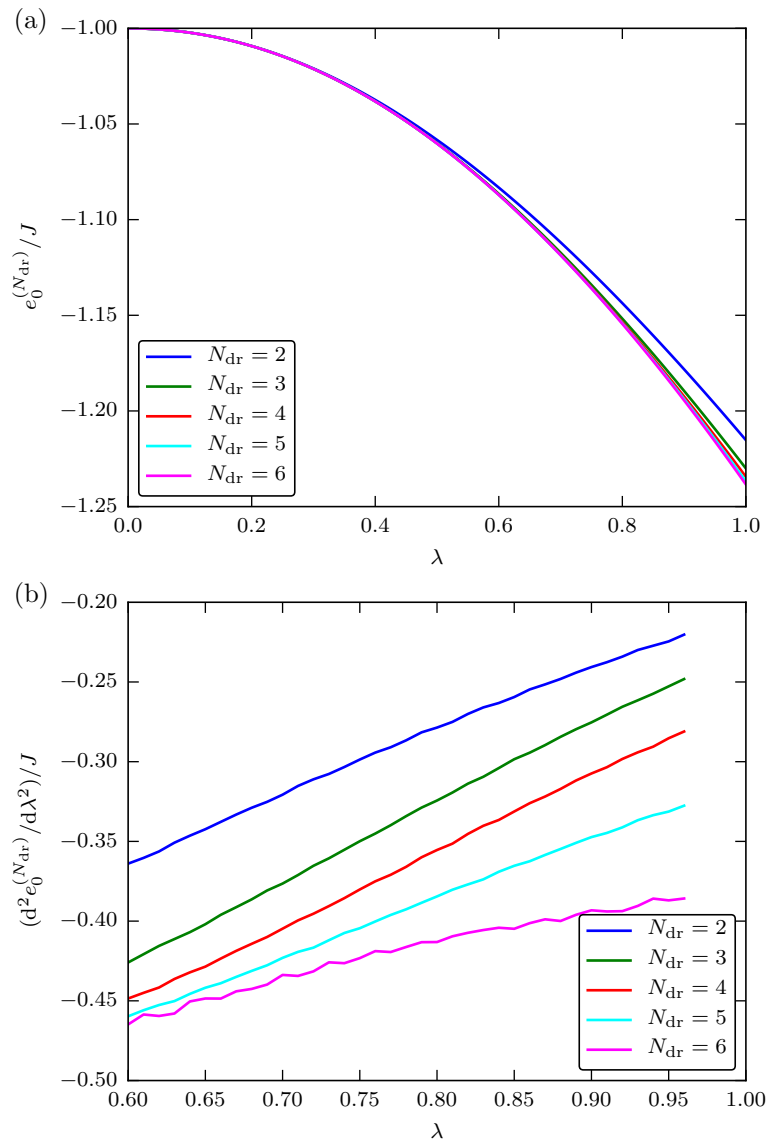


Abbildung 5.27: (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{\text{dr}})}/J$ der Spin-1 Dreieckskette in Abhängigkeit von λ für verschiedene Ordnungen N_{dr} . (b) Zweite Ableitung der Grundzustandsenergie pro Platz.

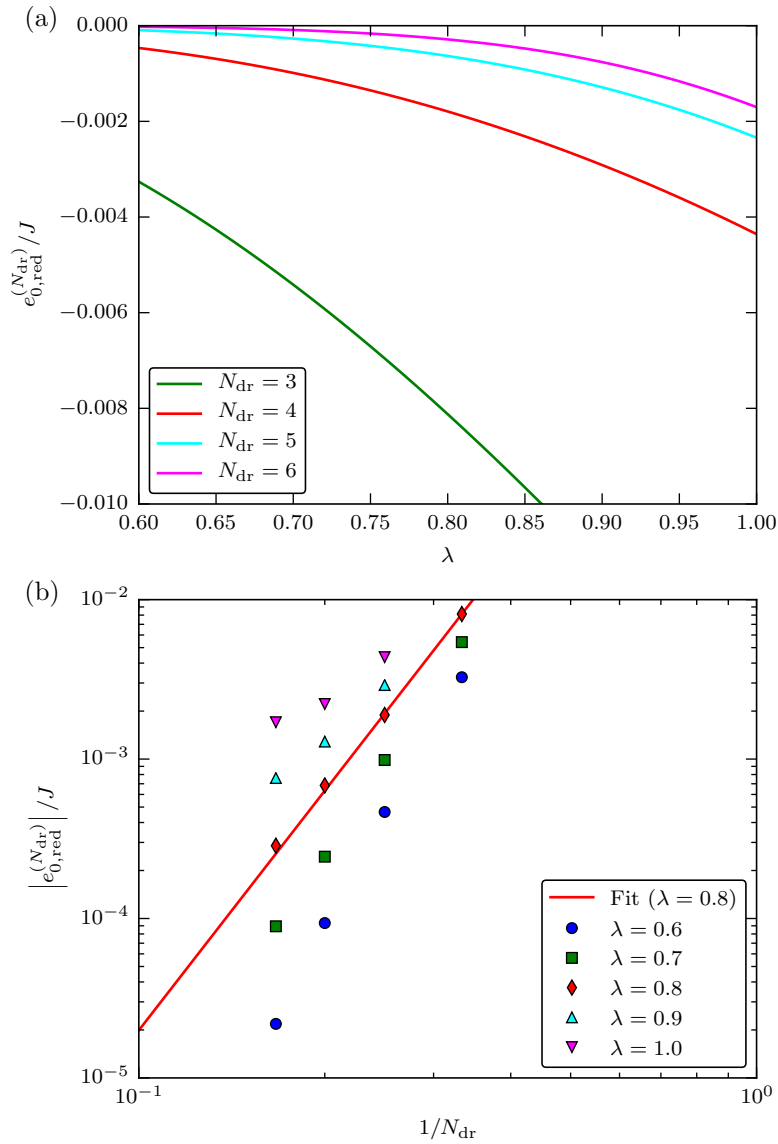


Abbildung 5.28: (a) Reduzierte Beiträge $e_{0,\text{red}}^{(N_{\text{dr}})}/J$ der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz in Abhängigkeit von λ für verschiedene Ordnungen N_{dr} . (b) Reduzierter Beitrag in Abhängigkeit von $1/N_{\text{dr}}$ für verschiedene λ in doppelt logarithmischer Darstellung. Die rote Linie ist ein algebraischer Fit der Form aN_{dr}^{-b} für $\lambda = 0.8$.

5.2.3 NLCEs für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter

Ergebnisse für die volle Graphenentwicklung (ohne Randfelder)

Begonnen wird mit einer Diskussion der NLCE Ergebnisse ohne Randfelder für die Grundzustandsenergie $e_0^{(N_{\text{dr}})}$ des Spin-1 Heisenbergmodells auf dem Kagomegitter, wie sie sich durch eine volle Graphenentwicklung in der Anzahl N_{dr} an Dreiecken ergeben. Abbildung 5.29 zeigt die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von λ zusammen mit den iPEPS (von engl. infinite projected entangled pair states) Ergebnissen aus Referenz 70. Verglichen mit der Dreieckskette (siehe Kapitel 5.2.2 und insbesondere Abbildung 5.27 (a)) konvergiert die Grundzustandsenergie nicht so gut mit wachsendem N_{dr} . Die geraden und ungeraden Ordnungen bilden zwei Familien, die getrennt zum iPEPS-Resultat konvergieren, da die geraden Ordnungen immer über, und die ungeraden Ordnungen immer unter, der iPEPS-Kurve liegen. Dennoch ist die Konvergenz für kleine Werte von λ recht gut, während sie bei großen Werten von λ sehr langsam ist. Deutlich interessanter ist jedoch, dass bereits für $\lambda < 1$ sichtbare Anomalien auftreten.

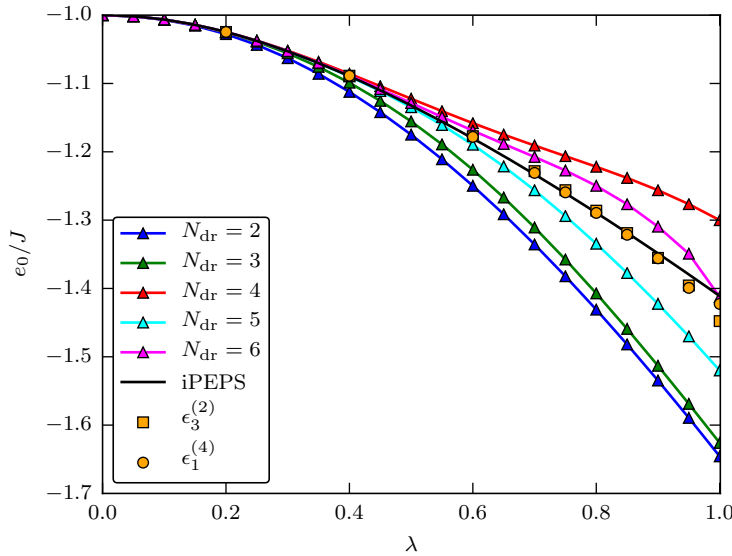


Abbildung 5.29: Vergleich der durch die volle Graphenentwicklung (ohne Randfelder) bestimmten Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{\text{dr}})}/J$ (farbige Dreiecke) und dem iPEPS-Ergebnis [70] (schwarze Linie) in Abhängigkeit von λ . Ebenfalls eingetragen sind die Wynn-Extrapolationen $\epsilon_3^{(2)}$ und $\epsilon_1^{(4)}$. Die durchgezogenen farbigen Linien sind Hilfslinien.

Es wird ebenfalls der Wynn-Algorithmus [102, 131, 132] zur Reihenextrapolation (siehe Kapitel 2.3.1) verwendet, wodurch die Resultate entscheidend verbessert werden. Dabei wird die niedrigste Ordnung ($N_{\text{dr}} = 1$) weggelassen, damit die höchste Ordnung ($N_{\text{dr}} = 6$) vom Wynn-Algorithmus mitberücksichtigt wird. Dadurch wird in Gleichung (2.62) der Algorithmus mit

$$\epsilon_{i-1}^{(0)} := P_{i-1}^{(0)} = e_0^{(i)} \quad (i = 2, \dots, 6) \quad (5.41)$$

gestartet und die Werte $\epsilon_{5-2l}^{(2l)}$ sollten gegen die Grundzustandsenergie des unendlichen Systems konvergieren. Folglich gibt es zwei Wynn-Extrapolationen $\epsilon_3^{(2)}$ und $\epsilon_1^{(4)}$, welche sich nach einem bzw. zwei Zyklen des Wynn-Algorithmus ergeben. Sie sind in Abbildung 5.29 eingetragen und stimmen für $\lambda \lesssim 0.8$ sehr gut mit den iPEPS-Daten überein. Für größere Werte von λ wird die Extrapolation schwieriger und es sind sichtbare Abweichungen vorhanden.

Die schlechte Konvergenz lässt sich, wie bereits in Kapitel 5.2.2 angedeutet, auf den quantenkritischen Punkt der eindimensionalen Dreieckskette zurückführen. Sämtliche Graphen der Dreieckskette sind nämlich ebenfalls in der vollen Graphenentwicklung des Kagomegitters als lineare Graphen enthalten. Sie sind unfrustriert und entsprechend sind die reduzierten Beiträge stets negativ, da diese Graphen die Energie des trimerisierten Grundzustandes immer absenken, während andere Graphen die Energie aufgrund der geometrischen Frustration üblicherweise erhöhen. In Kapitel 5.2.2 wurde betont, dass die reduzierten Beiträge $e_{0,\text{lin},\text{red}}^{(N_{\text{dr}})}$ der Kettengraphen in der Nähe des kritischen Punktes $\lambda_c \approx 0.8$ nur algebraisch abfallen und für das Kagomegitter zu einem Problem führen, da der Einbettungsfaktor $\nu_{\text{lin}}^{(N_{\text{dr}})}$ der linearen Kettengraphen exponentiell mit N_{dr} anwächst. Dies führt unweigerlich zu einer Divergenz des Produktes $\nu_{\text{lin}}^{(N_{\text{dr}})} \cdot e_{0,\text{lin},\text{red}}^{(N_{\text{dr}})}$, welches in die NLCE für die Grundzustandsenergie eingeht (vergleiche mit dem Linked-Cluster Theorem (2.21)), wenn die Länge der Kettengraphen erhöht wird. In Abbildung 5.30 ist das Produkt $\nu_{\text{lin}}^{(N_{\text{dr}})} \cdot e_{0,\text{lin},\text{red}}^{(N_{\text{dr}})}$ der Kettengraphen gegen deren Länge N_{dr} für $\lambda = 1$ aufgetragen. Es lässt sich gut erkennen, dass dieses Produkt mit steigendem N_{dr} stark anwächst. Der Bildeinschub in Abbildung 5.30 lässt auch deutlich erkennen, dass der Einbettungsfaktor $\nu_{\text{lin}}^{(N_{\text{dr}})}$ exponentiell mit der Anzahl an Dreiecken N_{dr} anwächst.

Der durch die unfrustrierten Kettengraphen entstehende divergierende Anteil, muss durch die anderen frustrierten Graphen kompensiert werden, um ein nicht-divergentes Endergebnis für die Grundzustandsenergie zu erhalten. Deshalb sollte es nicht verwundern, dass die in Abbildung 5.29 gezeigte Grundzustandsenergie eine schlechte Konvergenz aufweist, wenn die NLCE in endlichen N_{dr} trunziert wird.

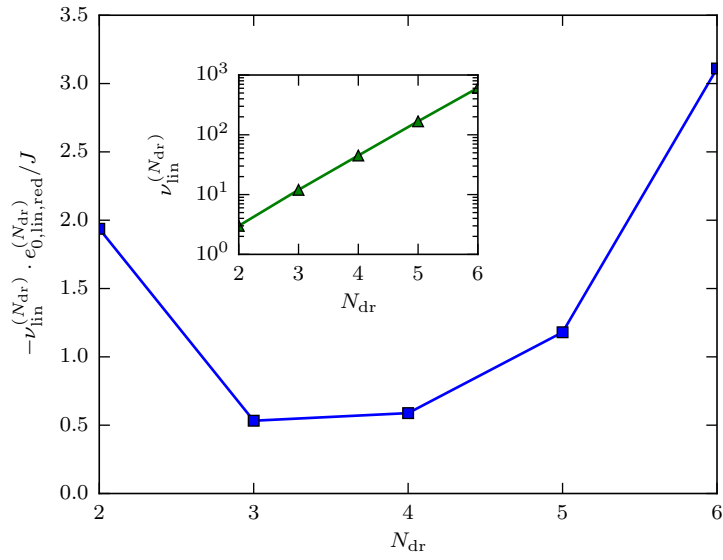


Abbildung 5.30: Absoluter Beitrag $\nu_{\text{lin}}^{(N_{\text{dr}})} \cdot e_{0,\text{lin},\text{red}}^{(N_{\text{dr}})}$ der linearen Kettengraphen zur NLCE der Grundzustandsenergie in Abhängigkeit der Länge N_{dr} für $\lambda = 1$. *Bildeinschub:* Einbettungsfaktor $\nu_{\text{lin}}^{(N_{\text{dr}})}$ der Kettengraphen. Die durchgezogenen farbigen Linien sind Hilfslinien.

Ergebnisse für die reorganisierte Graphenentwicklung

Als Nächstes soll die bereits erwähnte reorganisierte Graphenentwicklung verwendet werden, um ein nichtmonotones Konvergenzverhalten aufgrund von divergierenden Teilreihen zu verhindern. Dazu werden die Graphen so umsortiert, dass die Kettengraphen keinen exponentiellen Einbettungsfaktor mehr aufweisen und in symmetrischeren Graphen entwickelt wird. Alle Graphen der reorganisierten Entwicklung sind in Abbildung 5.24 eingetragen und die Details der Entwicklungen wurden bereits weiter oben diskutiert. Wie sich aus Abbildung 5.31 entnehmen lässt, ist die Konvergenz der Grundzustandsenergie $e_0^{(N_{\text{re}})}$ deutlich verbessert gegenüber der vollen Graphenentwicklung ohne Randfelder. Ein nichtmonotones Konvergenzverhalten in der Nähe des kritischen Punktes $\lambda_c \approx 0.8$ ist ebenfalls nicht mehr sichtbar. Die Ergebnisse $e_0^{(N_{\text{re}})}$ alternieren zwar weiterhin für gerade und ungerade Ordnungen, nähern sich aber kontinuierlich dem iPEPS-Resultat an. Im gesamten Intervall $\lambda \in [0,1]$ sind die NLCE-Ergebnisse deutlich näher am iPEPS-Ergebnis als bei der vollen Graphenentwicklung ohne Randfelder.

Eine weitere Verbesserung wird durch Anwendung des Wynn-Algorithmus erreicht. Um die höchste Ordnung $N_{\text{re}} = 4$ miteinzubeziehen, wird zusätzlich noch das Ergebnis eines einzelnen effektiven Gitterplatzes (ein hoch-Dreieck im Kagomegitter) für den Wynn-Algorithmus verwendet. Der Beitrag hat stets die Energie $e_0^{(0)} = -1$ und wird als $N_{\text{re}} = 0$ definiert. Die Startwerte für den Wynn-Algorithmus sind dann

$$\epsilon_{i+1}^{(0)} := P_{i+1}^{(0)} = e_0^{(i)} \quad (i = 0, \dots, 4), \quad (5.42)$$

wodurch sich die beiden Werte $\epsilon_3^{(2)}$ und $\epsilon_1^{(4)}$ nach einem bzw. zwei Wynn-Zyklen ergeben. Beide Extrapolationen liefern einen fast identischen Wert und sind bei $\lambda = 1$ gleich weit vom iPEPS-Ergebnis entfernt wie $e_0^{(4)}$, aber in die andere Richtung.

Zusätzlich kann, wie bereits oben erwähnt, die reorganisierte Entwicklung in noch symmetrischeren Graphen durchgeführt werden, indem nur die geraden Ordnungen beachtet werden. Der Wynn-Algorithmus besitzt dann die Startwerte

$$\epsilon_{\text{even},i+1}^{(0)} := P_{i+1}^{(0)} = e_0^{(2i)} \quad (i = 0, \dots, 2) \quad (5.43)$$

und es kann nur ein Zyklus durchgeführt werden, welcher auf den extrapolierten Wert $\epsilon_{\text{even},1}^{(2)}$ führt. Für $\lambda = 1$ kann dieser Wert mit dem iPEPS-Wert [70] e_0^{iPEPS} und DMRG-Wert [69] e_0^{DMRG} verglichen werden und es zeigt sich, dass diese numerisch fast perfekt übereinstimmen:

$$\epsilon_{\text{even},1}^{(2)} = -1.4114J \quad (5.44)$$

$$e_0^{\text{iPEPS}} = -1.4116(4)J \quad (5.45)$$

$$e_0^{\text{DMRG}} = -1.410(2)J. \quad (5.46)$$

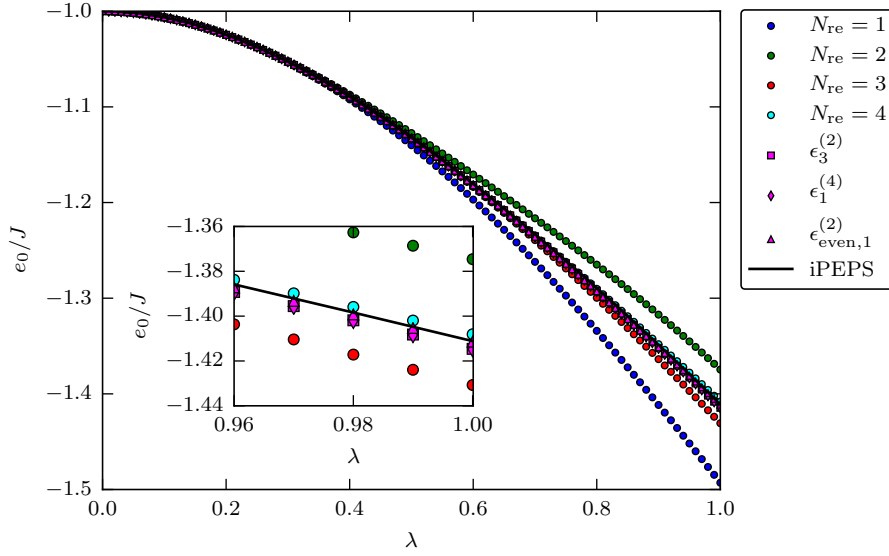


Abbildung 5.31: Vergleich der durch die reorganisierte Graphenentwicklung bestimmten Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{re})}/J$ (farbige Kreise) und dem iPEPS-Ergebnis [70] (schwarze Linie) in Abhängigkeit von λ . Ebenfalls eingetragen sind die Wynn-Extrapolationen $\epsilon_3^{(2)}$, $\epsilon_1^{(4)}$ und $\epsilon_{even,1}^{(2)}$. *Bildeinschub:* Vergrößerung um $\lambda = 1$.

Ergebnisse für die volle Graphenentwicklung (mit Randfeldern)

Nun werden die Randfelder – wie in Kapitel 2.2.1 erläutert und in Gleichung (2.33) definiert – eingeführt und eine volle Graphenentwicklung durchgeführt. Dabei wird nur die Minimumsmethode verwendet.

Aus einer Variation der Randfeldstärke K für $\lambda = 0.82$, welches nahe des kritischen Punktes $\lambda_c \approx 0.8$ liegt, ergibt sich die in Abbildung 5.32 (a) dargestellte Grundzustandsenergie $e_0^{(N_{dr})}$ pro Gitterplatz in Abhängigkeit von K/J . Ordnung 4, 5 und 6 weisen ein deutliches Minimum auf und die Energie des Minimums hängt linear von $1/N_{dr}^2$ ab, wie der Bildeinschub in Abbildung 5.32 (a) deutlich macht. Ebenfalls erkennbar ist, dass eine lineare Skalierung durch die Ordnungen 5 und 6 einen extrapolierten Wert liefert, der sehr gut mit dem iPEPS-Wert [70] bei $\lambda = 0.82$ übereinstimmt. Eine analoge Darstellung für $\lambda = 1$ findet sich in Abbildung 5.32 (b). Auch hier ist erkennbar, dass der skalierte Wert sehr gut mit dem iPEPS-Resultat übereinstimmt.

Die gleiche Skalierung kann auch für andere Werte von λ durchgeführt werden (siehe Anhang B.4) und die sich ergebenden skalierten Werte sind in Abbildung 5.33 eingetragen. Ebenfalls eingetragen sind alle Ordnungen der vollen Graphenentwicklung, wenn ein kleines Randfeld $K/J = 0.05$ verwendet wird. Ein Vergleich der Ergebnisse mit und ohne Randfeld in Abbildung 5.33 zeigt, dass selbst ein kleines Randfeld das nichtmonotone Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes $\lambda_c \approx 0.8$ aufhebt.

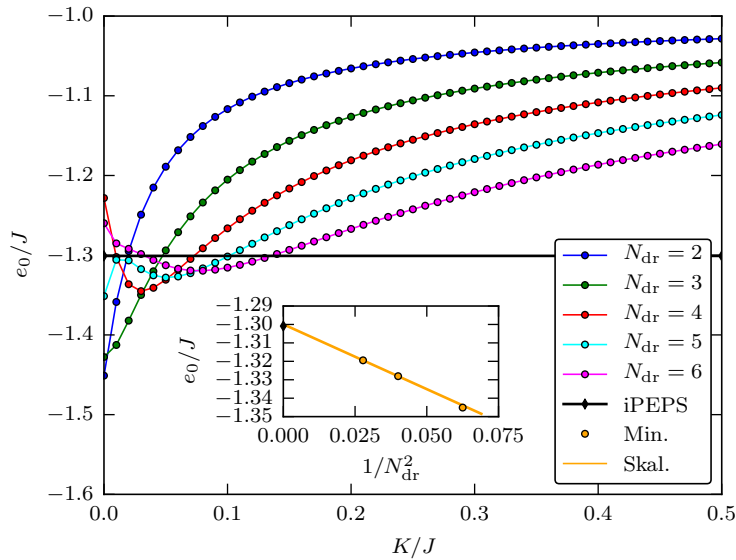
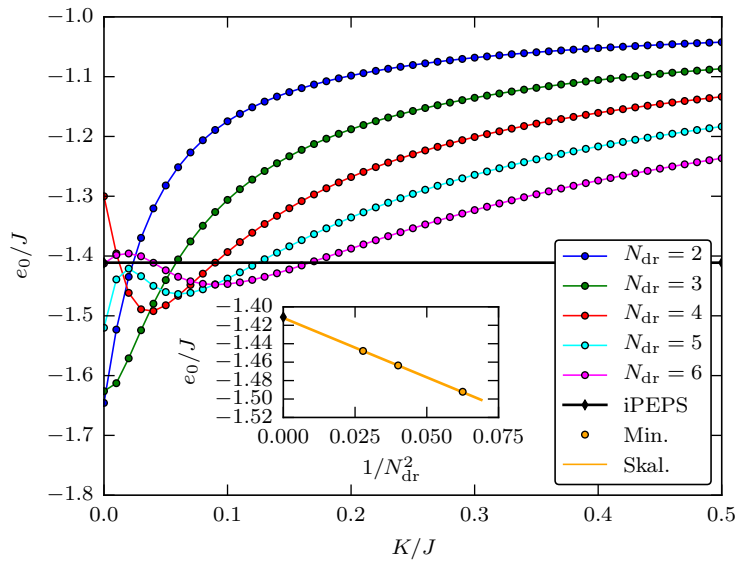
(a) $\lambda = 0.82$

 (b) $\lambda = 1.0$


Abbildung 5.32: Durch eine volle Graphenentwicklung mit Randfeldern bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{\text{dr}})}/J$ in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für (a) $\lambda = 0.82$ und (b) $\lambda = 1.0$. Die horizontale schwarze Linie ist der iPEPS-Wert [70]. Die farbigen Linien sind Hilfslinien. *Bildeinschub:* Minimale Energie in Abhängigkeit von $1/N_{\text{dr}}^2$ sowie lineare Skalierung (orangene Linie) durch Ordnung 5 und 6. Die schwarze Raute ist der iPEPS-Wert [70].

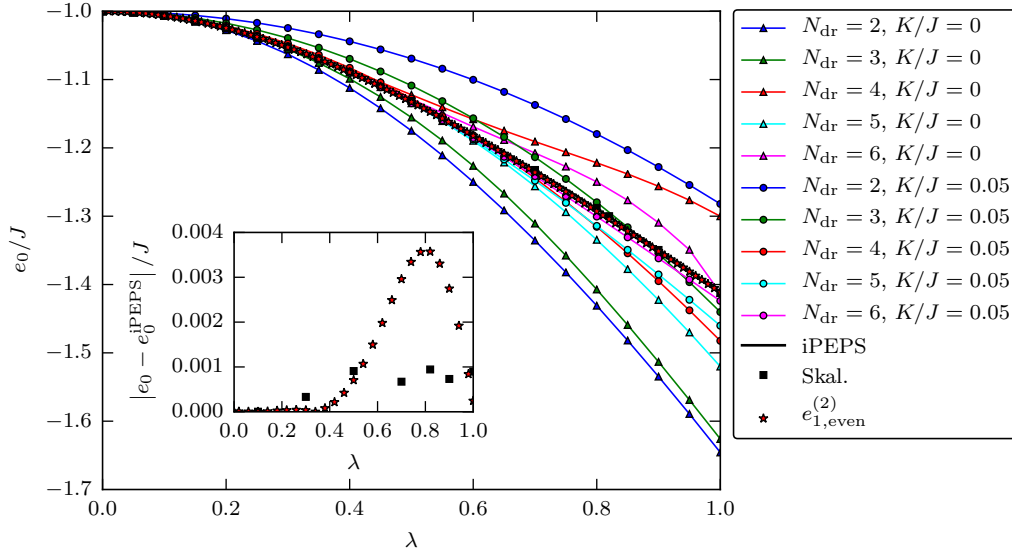


Abbildung 5.33: Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{\text{dr}})}/J$ ohne und mit einem kleinen Randfeld $K/J = 0.05$ in Abhängigkeit von λ (farbige Dreiecke bzw. Kreise). Die schwarzen Quadrate stellen die mit der Minimumsmethode ermittelten skalierten Werte dar, die schwarze Linie ist das iPEPS-Ergebnis [70] und die Sterne repräsentieren das beste Ergebnis $\epsilon_{\text{even},1}^{(2)}$ der reorganisierten Graphenentwicklung. Farbige Linien sind Hilfslinien. *Bildeinschub:* Vergleich der skalierten Werte und der reorganisierten Graphenentwicklung mit dem iPEPS-Ergebnis um $\lambda = 1$.

Letztendlich führt ein Vergleich der skalierten Werte $e_0^{\text{Skal.}}$ und dem besten Ergebnis $\epsilon_{\text{even},1}^{(2)}$ der reorganisierten Graphenentwicklung (siehe auch Abbildung 5.33) zu der Erkenntnis, dass sowohl die Randfeldmethode als auch die reorganisierte Graphenentwicklung ähnlich gute Ergebnisse erzielen. Bei $\lambda = 1$ sind die Werte durch

$$\epsilon_{\text{even},1}^{(2)} = -1.4114J \quad (5.47)$$

$$e_0^{\text{Skal.}} = -1.41203J \quad (5.48)$$

$$e_0^{\text{iPEPS}} = -1.4116(4)J \quad (5.49)$$

gegeben, wodurch selbst am isotropen Punkt beide Methoden sehr gut mit dem iPEPS-Wert [70] übereinstimmen. Im Bildeinschub von Abbildung 5.33 ist allerdings erkennbar, dass die reorganisierte Graphenentwicklung in der Nähe des quantenkritischen Punktes der Dreieckskette bei $\lambda \approx 0.8$ deutlich stärker vom iPEPS-Resultat abweicht. Die reorganisierte Graphenentwicklung spürt also immer noch die Auswirkungen der Quantenkritikalität der Dreieckskette, während die NLCE mit Randfeldern eine fast konstante Abweichung zum iPEPS-Resultat für alle $\lambda \in [0,1]$ besitzt.

5.2.4 Schlussfolgerungen

In diesem Unterkapitel wurde das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter mittels nichtperturbativer Linked-Cluster Entwicklungen untersucht. Dazu wurde ein Parameter λ eingeführt, welcher zwischen dem isotropen Heisenbergmodell und dem Grenzfall entkoppelter Dreiecke interpoliert. Ausgehend vom trimerisierten Limes wurden einzelne Dreiecke als elementarer Baustein für die Graphenentwicklungen verwendet, um die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz zu bestimmen.

Es konnte gezeigt werden, dass die volle Graphenentwicklung ein nichtmonotones Konvergenzverhalten aufweist, welches auf ein quantenkritisches Verhalten der unfrustrierten eindimensionalen Kettengraphen zurückgeführt werden kann. Für diese steigt der Einbettungsfaktor exponentiell an, während die reduzierten Beiträge in der Nähe des kritischen Punktes ($\lambda_c \approx 0.8$) nur algebraisch abfallen. Diese Untermenge an Graphen liefert demzufolge einen divergenten Beitrag zur Grundzustandsenergie, welcher von den anderen (frustrierten) Graphen kompensiert werden muss, um ein physikalisch sinnvolles Ergebnis zu erhalten. Allerdings ist das eine subtile Angelegenheit, wenn die NLCE trunziert wird. Wahrscheinlich ist dieses Verhalten von divergenten Teilreihen, ein generischer Aspekt von NLCE-Rechnungen für frustrierte Quantensysteme.

Aufbauend auf den Ergebnissen dieses Kapitels wurden zwei Verfahren entwickelt, welche in der Lage sind das nichtmonotone Konvergenzverhalten zu umgehen. Zum einen kann eine reorganisierte Graphenentwicklung durchgeführt werden, welche besser für das betrachtete Problem geeignet ist. Dabei ist es essentiell, dass divergierende Teilmengen von Graphen ausgeschlossen werden. Für das Spin-1 Kagomegitter konnte dies durch eine Entwicklung in symmetrischeren Graphen, welche aus Dreiecken des effektiven Gitters bestehen, erreicht werden. Die Resultate wiesen dadurch ein deutlich besseres Konvergenzverhalten auf und stimmten quantitativ mit den Ergebnissen anderer Methoden [69, 70] überein.

Zum anderen können Randfelder eingeführt werden, welche dafür sorgen, dass die Graphen stets als Teil des zweidimensionalen Gitters angesehen werden. Dadurch wird das kritische Verhalten der Kettengraphen unterdrückt und die Resultate für das Spin-1 Kagomegitter sind ebenfalls quantitativ vergleichbar.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit hat Linked-Cluster Entwicklungen – dabei hauptsächlich nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklungen [99–104] – auf verschiedene zweidimensionale Hubbard- und Spinmodelle bei Temperatur $T = 0$ angewendet, um Grundzustandseigenschaften dieser Modelle zu bestimmen. Die Spinmodelle können dabei als effektive Beschreibung der Mottphase von zweidimensionalen Hubbardmodellen verstanden werden.

Hubbardmodell auf flussgefüllten Quadratgittern

Zuerst wurde in Kapitel 4.1 das halbgefüllte Hubbardmodell bei Temperatur $T = 0$ für eine Einparameterfamilie von π -Fluss gefüllten Quadratgittern (flussgefüllte Quadratgitter) untersucht [40]. Zuvor wurden bereits Anzeichen für eine nichtmagnetische isolierende Phase innerhalb des Mottisolators auf dem π -Fluss Quadratgitter gefunden [110]. Für das Bienenwabengitter wurde eine ähnliche Zwischenphase vorgeschlagen [147], welche allerdings durch eine Verbesserung der verwendeten Quanten-Monte-Carlo-Methoden mittlerweile ausgeschlossen wurde [148, 149].

Durch eine Kombination dieser verbesserten Quanten-Monte-Carlo-Methoden und kontinuierlichen unitären Transformationen, wurde das Phasendiagramm ermittelt, welches aus einem Halbmetall, einer magnetisch geordneten Néelphase sowie einem Valenzbondkristall und einem Bandisolator besteht, wobei die beiden letzteren adiabatisch miteinander verknüpft sind. Der Zusammenbruch des Halbmetalls führt üblicherweise zur antiferromagnetischen Néelordnung, selbst wenn ein Valenzbondkristall bei großen Kopplungen vorliegt.

Die kontinuierlichen unitären Transformationen wurden mit den in dieser Arbeit vorgestellten Methoden für Linked-Cluster Entwicklungen (siehe Kapitel 2) durchgeführt, während die Quanten-Monte-Carlo-Daten von Fakher Assaad an der Universität Würzburg berechnet wurden [40]. Dabei fand für die kontinuierlichen unitären Transformationen ein zweischrittiges Verfahren Anwendung. Zuerst wurde mittels graphenbasierter kontinuierlicher unitärer Transformationen [103, 104] ein effektives Niederenergiemodell für die Mottphase des Hubbardmodells abgeleitet. Dieses nichtperturbative Verfahren trennt die Spin- und Ladungsfreiheitsgrade voneinander, woraus ein effektives Spinmodell resultiert. Es konnte für die größten Graphen aus acht Gitterplätzen, oder große Hüpfamplituden, festgestellt werden, dass die Transformation problematisch wird, sobald diese beiden Freiheitsgrade miteinander überlappen. Dennoch sollten sich in diesem Bereich die untersten Energieniveaus

noch durch Spinzustände beschreiben lassen. Es wäre deshalb ein faszinierendes, wenn auch anspruchsvolles, Unterfangen den Generator der kontinuierlichen unitären Transformationen zu verbessern, sodass die Separation der Spin- und Ladungsfreiheitsgrade für diesen Bereich weiterhin durchgeführt werden kann. Ein erster Schritt in diese Richtung wurde bereits für Systeme durchgeführt, bei denen die fehlende Translationssymmetrie auf einzelnen Graphen zu Matrixelementen zwischen energetisch überlappenden Zuständen führt, welche die Durchführung der konventionellen kontinuierlichen unitären Transformationen erschweren, aber mit einem verbesserten Generator behandelt werden können [104].

Der zweite Schritt bestand aus der Berechnung der Eintriplonlücke in der Valenzbondkristallphase durch perturbative kontinuierliche Transformationen [112–114] um den Grenzfall isolierter Dimere. Dazu wurde das mit den graphenbasierten kontinuierlichen unitären Transformationen abgeleitete effektive Spinmodell auf die Terme eingeschränkt, welche auf einzelnen Quadraten definiert sind. In dem resultierenden Modell sind dann nur noch Zwei- und Vierspinnkopplungen enthalten. Ausgehend vom Starkkopplungslimes und dem Valenzbondkristall kann dann die Eintriplondispersion bestimmt werden, woraus sich direkt die Eintriplonlücke ergibt. Triplonen sind dabei die elementaren Anregungen des Valenzbondkristalls [115]. Mit diesem Verfahren kann somit festgestellt werden, wann der Valenzbondkristall zusammenbricht und sich eine Néel-geordnete Phase ausbildet. Dort wo ein Vergleich mit Quanten-Monte-Carlo-Daten durchgeführt wurde, stimmten die mit kontinuierlichen unitären Transformationen und Quanten-Monte-Carlo ermittelten Ergebnisse quantitativ überein. Interessanterweise ist selbst in dem Parameterbereich in dem das effektive Modell gut konvergiert zu sein scheint, eine vernünftige Bestimmung des kritischen Exponenten der Triplonlücke schwierig. Dies lässt sich vermutlich darauf zurückführen, dass andere Kopplungen, wie z.B. Sechsspinterme, einen größeren Einfluss in diesem Parameterbereich besitzen. In zukünftigen Studien kann der Einfluss dieser Terme weiter untersucht werden. Dabei sollte vor allem versucht werden höhere Störungsordnungen zu erreichen, indem Graphenentwicklungen auf „weißen“ Graphen [124] durchgeführt werden. Dadurch können die in dieser Arbeit erreichten Störungsordnungen von 5 bzw. 6 erhöht werden und die Ergebnisse der perturbativen kontinuierlichen unitären Transformationen sollten eine quantitative Verbesserung erfahren.

Insgesamt widerlegen die Ergebnisse dieser Arbeit die Anwesenheit einer nichtmagnetischen isolierenden Zwischenphase innerhalb des Mottisolators für das π -Fluss Quadratgitter, wie sie in Referenz 110 vorgeschlagen wurde.

Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter

Das halbgefüllte Hubbardmodell auf dem isotropen Dreiecksgitter besitzt bei Temperatur $T = 0$ vermutlich eine Spinflüssigkeitsphase innerhalb des Mottisolators, welche durch Phasenübergänge erster Ordnung von einer antiferromagnetisch geordneten Néelphase und einem Halbmetall getrennt ist [38, 45–50]. Dabei kann die Spinflüssigkeitsphase durch ein effektives Spinmodell verstanden werden, bei dem die Ringaustauschterme (Vierspinwechselwirkungen) den relevanten Beitrag für die Ausbildung dieser nichtmagnetischen Phase darstellen [38].

Für das Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter wurde mittels variationeller Clusternäherung ebenfalls die Existenz einer nichtmagnetischen Zwischenphase innerhalb des Mottisolators vorgeschlagen [51]. Im Unterschied zum isotropen Dreiecksgitter suggerieren die Ergebnisse der variationellen Clusternäherung jedoch Phasenübergänge zweiter Ordnung zum Halbmetall und dem Antiferromagneten [51]. Dennoch sollte eine Beschreibung durch ein effektives Spinmodell möglich sein und es wird erwartet, dass auch hier die Vierspinterme maßgeblichen Einfluss auf die Ausbildung der Spinflüssigkeitsphase haben.

Dieses Szenario wurde in Kapitel 4.2 untersucht, indem mit einer perturbativen Linked-Cluster Entwicklung ein effektives Spinmodell für das halbgefüllte Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter abgeleitet wurde. Das Modell wurde – im Gegensatz zu Referenz 51 – bis Ordnung 6 abgeleitet. Zuerst sollte allerdings überprüft werden, ob bereits das effektive Spinmodell in Ordnung 4 Anzeichen für die Existenz einer Zwischenphase innerhalb des Mottisolators aufweist. Dazu wurde die in Kapitel 3 eingeführte Methode zur exakten Diagonalisierung verwendet, doch es konnten in den betrachteten Symmetriesektoren keine Anzeichen auf einen Phasenübergang festgestellt werden. Die Untersuchung eines Heisenbergmodells mit zusätzlichen Vierspintermen lieferte ebenfalls keine Indizien für einen Übergang.

Für das Heisenbergmodell mit weiteren Übernächstnachbarkopplungen (J_1 - J_2 Modell) ist bereits bekannt, dass die Néelordnung mit wachsender Stärke der Übernächstnachbarkopplung J_2 zusammenbricht und sehr wahrscheinlich in eine Spinflüssigkeitsphase übergeht [52–57]. Diese Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn ist im effektiven Spinmodell des Hubbardmodells auf dem π -Fluss Dreiecksgitter auch vorhanden und sogar dreimal so groß wie für das isotrope Dreiecksgitter. Entsprechend könnte diese Wechselwirkung für die Ausbildung der vorgeschlagenen Spinflüssigkeitsphase im Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter verantwortlich sein. Eine Analyse der entsprechenden Kopplungswerte zeigt aber, dass die Vierspinterme die Ausbildung der Spinflüssigkeitsphase unterstützen sollten, damit die mit der variationellen Clusternäherung gefundenen Werte für den Übergang plausibel sind.

Mit exakter Diagonalisierung wurde das Energiespektrum des J_1 - J_2 Modell ermittelt, wodurch die Ergebnisse aus Referenz 57 reproduziert wurden. Es konnten ebenfalls Charakteristika im Energiespektrum identifiziert werden, welche als Indizien für mögliche Phasenübergänge fungieren könnten. Interessanterweise führt eine Erweiterung des J_1 - J_2 Modell um die Vierspinwechselwirkungen dazu, dass diese Charakteristika verschwinden. Damit wird die Argumentation gestützt, dass die Vierspinterme auf dem π -Fluss Quadratgitter – im Unterschied zum isotropen Dreiecksgitter – die Néelphase stabilisieren.

Sämtliche Resultate für die (effektiven) Spinmodelle auf dem π -Fluss Dreiecksgitter deuten darauf hin, dass keine Zwischenphase innerhalb des Mottisolators existiert. Sollten die durch die variationelle Clusternäherung suggerierten Übergänge jedoch zweiter Ordnung sein, so ist eine Detektion dieser auch schwieriger als bei den Übergängen erster Ordnung des isotropen Dreiecksgitters. Dementsprechend sind weitere Untersuchungen notwendig, um die Existenz einer Quantenspinflüssigkeit im Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter zu klären. Dabei sollte auch der Einfluss von Sechsspintermen analysiert sowie das Anregungsspektrum genauer untersucht werden. Im Endeffekt könnte diese Phase auch gar

nicht existent sein und die mit der variationellen Clusternäherung gefundenen Hinweise, könnten sich auf Artefakte der Methode zurückführen lassen.

Nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklungen für Quantenspinmodelle

In Kapitel 2.2.1 wurde ein generisches Schema vorgestellt, um nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklungen für langreichweitig geordnete Quantenphasen durchzuführen. Die Grundidee basiert darauf, dass die langreichweitige Ordnung auf den einzelnen Graphen während der exakten Diagonalisierung berücksichtigt wird und die Graphen somit als Teil der langreichweitigen Quantenordnung betrachtet werden [108, 109]. Jeder Graph trägt dann die auf ihm stattfindenden Fluktuationen, unter Berücksichtigung der ihn umgebenden Ordnung, bei. Erreicht wird dies, indem der Graph um Randkopplungen zu einem statischen geordneten Referenzzustand erweitert wird. Diese Randkopplungen resultieren dann in Randfeldern auf den Graphen, welche die mit der Ordnung assoziierte Symmetrie brechen. Auf diese Weise wird die Berechnung auf jedem Graphen bezüglich der richtigen Quantenordnung durchgeführt. Wichtig ist, dass die Randfelder nur einen subextensiven Beitrag zur Grundzustandsenergie liefern, da sie mit dem Umfang der Graphen skalieren. Für beliebig große Entwicklungsordnungen sollten die Randfelder also keinen Einfluss haben. Praktische Berechnungen sind von diesem Grenzfall jedoch weit entfernt, sodass die Randfeldstärke als variable Größe angenommen wird. Um den optimalen Wert für die Randfeldstärke zu finden, wurden zwei verschiedene Verfahren vorgestellt. Zum einen die Fixpunktmethode, welche die Randfeldstärke selbstkonsistent über den Ordnungsparameter bestimmt und zum anderen die Minimumsmethode, welche den Wert für die Randfeldstärke verwendet, bei dem die Grundzustandsenergie minimal von den Randfeldern abhängt.

Diese Methode wurde in Kapitel 5 für zwei verschiedene Arten von geordneten Phasen angewendet. Als erstes wurden langreichweitig magnetisch geordnete Quantenphasen betrachtet (siehe Kapitel 5.1), bei denen eine endliche Untergittermagnetisierung vorliegt. Betrachtet wurde dazu das Heisenbergmodell auf dem Quadrat- und Dreiecksgitter für sowohl Spin-1/2 als auch Spin-1 bei Temperatur $T = 0$. Für die nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen wurden insgesamt vier verschiedene Graphenentwicklungen angewendet: Eine volle Graphenentwicklung, eine Rechteckentwicklung, die sogenannte arithmetische Entwicklung und eine Quadratentwicklung. Weiterhin wurden zwei verschiedene Skalierungsgesetze verwendet, um Extrapolationen zu unendlichen Ordnungen durchzuführen.

Bei der vollen Graphenentwicklung werden alle Graphen mit einer maximalen Anzahl an Knoten betrachtet. Dadurch wächst die Anzahl an Graphen äußerst schnell und es wurden in dieser Arbeit nicht besonders große Ordnungen erreicht. Es ist bisher nicht gelungen eine typische Längenskala zu definieren, sodass Skalierungen zu unendlichen Ordnungen problematisch sind. Für die Rechteckentwicklung werden nur rechteckige Cluster mit einer maximalen Knotenanzahl betrachtet. Dadurch wächst die Anzahl an Graphen sehr langsam und es kann eine typische Längenskala definiert werden [108], aber die größten Graphen beinhalten stets lineare Ketten. Die betrachtete physikalische Größe zeigt in den Ordnungen in denen nur ein Kettengraph hinzukommt, fast keine Veränderung, da der

Beitrag der Kettengraphen in zwei Dimensionen extrem schnell abfällt. Folglich entstehen Plateaus und die Daten der nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklung zeigen kein glattes Konvergenzverhalten, wodurch eine wohldefinierte Skalierung erschwert wird. Diese Probleme werden durch die arithmetische Graphenentwicklung und die Quadratentwicklung behoben, da hier quadratische Cluster die Ordnungen definieren. Während in der arithmetischen Entwicklung die Entwicklungsordnung über die Manhattan-Distanz der rechteckigen Cluster definiert wird, so werden die Cluster in der Quadratentwicklung durch ihre maximale Ausdehnung in x - und y -Richtung begrenzt.

Zum Testen der Methode und der verschiedenen Entwicklungen wurde das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter gewählt. Berechnet wurden Grundzustandsenergien und Untergittermagnetisierungen mit beiden vorgestellten Verfahren zur Bestimmung der Randfeldstärke. Dabei sind die skalierten Werte beider Verfahren für die arithmetische Graphenentwicklung und Quadratentwicklung quantitativ mit Quanten-Monte-Carlo-Daten vergleichbar. Interessant ist, dass die Quadratentwicklung für das Spin-1/2 Heisenbergmodell auf dem frustrierten Dreiecksgitter besser – in dem Sinne, dass kein Paritätseffekt vorhanden ist und so mehr Datenpunkte für die Skalierungen zur Verfügung stehen – funktioniert als für das Quadratgitter. Es wäre ein sinnvolles Unterfangen eine verbesserte Graphenentwicklung für das Quadratgitter zu finden, bei der kein Paritätseffekt mehr vorhanden ist. Auf dem Dreiecksgitter versagt die arithmetische Entwicklung hingegen vollkommen für die Berechnung der Untergittermagnetisierung. Generell scheint sich die Skalierung für die arithmetische Entwicklung komplizierter zu gestalten. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass verschiedene Cluster derselben Entwicklungsordnung zwar die gleiche Längenskala, aber deutlich unterschiedliche Seitenverhältnisse besitzen. In der Quadratentwicklung ist dies nicht der Fall und jede Entwicklungsordnung wird klar von dem größten quadratischen Cluster dieser Ordnung dominiert. Für die Spin-1 Modelle können aufgrund der größeren lokalen Hilberträume nicht so hohe Entwicklungsordnungen erreicht werden, aber auch hier werden sehr gute Ergebnisse erzielt. Bemerkenswert ist, dass für die betrachteten Modelle eine normale nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklung ohne Randfelder divergiert. Dies ist auf die unendliche Korrelationslänge in Folge der verschwindenden Energielücke zurückzuführen. Die Randfelder verbessern entsprechend nicht nur die nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklung, sondern sind notwendig, damit überhaupt konvergierende Resultate erzielt werden können.

Die zweite Klasse von Quantenphasen für die nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklungen mit Randfeldern angewendet wurden (siehe Kapitel 5.2), besteht aus nichtmagnetischen Valenzbondkristallen, welche die Translationssymmetrie des Gitters brechen. Für das Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter liegt eine Trimerisierung vor, bei der drei Spin-1 zu einem Singulett koppeln und dadurch die Symmetrie der hoch- und runter-Dreiecke des Kagomegitters gebrochen wird [69–74]. Als Ausgangspunkt für eine Graphenentwicklung bietet sich deshalb der trimerisierte Limes an, in dem ein Parameter λ eingeführt wird, welcher zwischen dem Grenzfall isolierter hoch-Dreiecke (oder alternativ runter-Dreiecke) und dem isotropen Kagomegitter interpoliert. Die Dreiecke sind dann die elementaren Bausteine für eine volle Graphenentwicklung. Im Gegensatz zu den vorher betrachteten langreichweitig magnetisch geordneten Systemen besitzt der trimerisierte Grundzustand des Spin-1 Kagomegitters eine endliche Korrelationslänge und die nicht-

perturbative Linked-Cluster Entwicklung konvergiert für alle Werte von λ auch ohne die Einführung von Randfeldern. Jedoch zeigt sich ein nichtmonotones Konvergenzverhalten, welches auf einen Quantenphasenübergang der unfrustrierten eindimensionalen Dreieckskette zurückgeführt werden kann [74]. Diese Kette ist nämlich ein Teilsystem des Kagomegitters und in Form von Kettengraphen vorhanden. Ähnlich wie bei den magnetisch geordneten Phasen spüren diese Kettengraphen nichts von der vorgegebenen Ordnung und sie verhalten sich gemäß der Physik der eindimensionalen Dreieckskette auf der ein Quantenphasenübergang stattfindet. Der quantenkritische Punkt führt dann zu einem algebraischen Konvergenzverhalten, während der Einbettungsfaktor weiter exponentiell ansteigt und es entsteht eine Divergenz in dieser Teilmenge von Graphen. Eine solche Divergenz muss von den anderen Graphen kompensiert werden, damit ein physikalisch sinnvolles Ergebnis entsteht. Da die Sequenz der Entwicklung trunziert wird, ist dies eine sehr subtile Angelegenheit und die Reihen der nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklung können ein nichtmonotones Konvergenzverhalten aufweisen. Wahrscheinlich ist das Auftreten von Divergenzen in unfrustrierten Teilsystemen ein allgemeines Merkmal von solchen Entwicklungen für frustrierte Systeme bei Anwendung einer voller Graphenentwicklung.

Es wurde deshalb eine reorganisierte Graphenentwicklung durchgeführt, bei der in deutlich symmetrischeren Graphen – ähnlich der Rechteck- und Quadratentwicklung – entwickelt wurde. Dadurch wird das divergierende Teilsystem aus der Entwicklung entfernt und das Konvergenzverhalten wird enorm verbessert, indem die Daten nun schneller und monoton zum Ergebnis aus iPEPS-Rechnungen (iPEPS steht für engl. infinite projected entangled pair states) konvergieren. Nichtsdestotrotz lassen sich im Bereich des quantenkritischen Punktes der Dreieckskette stärkere Abweichungen vom iPEPS-Resultat feststellen.

Eine Anwendung der nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen mit Randfeldern für die volle Graphenentwicklung (bezogen auf die elementaren Dreiecke der Entwicklung) behebt auch diese Abweichungen und die Ergebnisse weisen entlang der kompletten λ -Achse eine nahezu konstante Abweichung vom iPEPS-Resultat auf. Interessanterweise wurde ein heuristisches Skalierungsgesetz gefunden, welches es ermöglicht die Daten der vollen Graphenentwicklung zu unendlichen Ordnungen zu extrapolieren. Extrapolationen können also auch für volle Graphenentwicklungen von Nutzen sein und es wäre erstrebenswert Skalierungsgesetze für die volle Graphenentwicklung der langreichweitig magnetisch geordneten Quantenphasen zu finden.

Generell konnte durch Erweiterung der nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen mit Randfeldern ein Schema vorgestellt werden, welches es ermöglicht Entwicklungen um geordnete Phasen durchzuführen. Dies gelingt sogar bei Systemen mit einer unendlichen Korrelationslänge, da den Graphen ein Referenzzustand vorgegeben wird, wodurch die auf den Graphen stattfindenden Fluktuationen als Teil der geordneten Phase angesehen werden. Nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklungen wurden auch für Nichtgleichgewichtssysteme durchgeführt [180–182] und es konnte gezeigt werden, dass Randfelder auch hier zu einer deutlichen Verbesserung der Resultate führen, indem – analog zum trimerisierten Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter – die unterschiedliche Kritikalität von eindimensionalen Teilsystemen unterdrückt wird [182].

Für zukünftige Arbeiten stehen viele Anknüpfungspunkte bereit, welche die nichtpertur-

bativen Linked-Cluster Entwicklungen mit Randfeldern erweitern. So wäre es in erster Linie spannend andere numerische Techniken zu verwenden, um größere offene Cluster betrachten zu können. Dadurch würde die Qualität der Skalierungen deutlich verbessert werden, wodurch deutlich präzisere Ergebnisse erzielt werden können. Mögliche Techniken wären in diesem Zusammenhang kontinuierliche unitäre Transformationen [103, 104], oder auf Tensornetzwerken basierende Methoden wie beispielsweise Dichtematrixrenormalisierungsgruppen [107]. Die Ableitung von Skalierungsgesetzen aus grundlegenden Prinzipien für nichtperturbative Linked-Cluster Entwicklungen ist bisher noch nicht gelungen und es wäre sehr erstrebenswert dies zu erreichen, stellt aber auch eine immense Herausforderung dar. Weiterhin sollten die nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen mit Randfeldern auf Systeme angewendet werden, bei denen mehrere Quantenphasen miteinander konkurrieren. Ein Vergleich der entsprechenden Energien und deren Konvergenzverhalten kann dann genutzt werden, um das Grundzustandsphasendiagramm zu ermitteln. Abschließend wäre es eine äußerst spannende Fragestellung, ob die Produktdarstellung des Referenzzustands durch einen verschränkten Zustand, z.B. mittels Tensornetzwerken, ersetzt werden kann. Dies würde es vielleicht ermöglichen auch exotische quantenungeordnete Phasen mit nichtperturbativen Linked-Cluster Entwicklungen zu behandeln.

Anhang A

Graphen-Algorithmen

In diesem Anhang werden Algorithmen zur Graphenerzeugung, -subtraktion und -einbettung vorgestellt. Die hier vorgestellten Algorithmen sollen lediglich die Grundidee widerspiegeln, mit der die Graphen in dieser Arbeit behandelt wurden. Ziel dieses Anhangs ist es, die Algorithmen so darzustellen, dass sie einen verständlichen Einblick in ihre Funktionsweise geben. Die tatsächlichen Implementierungen in C++ weichen demzufolge von den hier dargestellten Algorithmen ab, können aber der beigefügten CD entnommen werden.

A.1 Algorithmus zur Graphengenerierung

Das kanonische Summationsschema betrachtet sämtliche Graphen, welche maximal N_{\max} Knoten (Gitterplätzen) oder Verbindungen (Kopplungen) besitzen. In diesem Unterkapitel wird ein einfacher Algorithmus vorgestellt, welcher dazu verwendet werden kann, alle zusammenhängenden, topologisch inäquivalenten Graphen mit maximal N_{\max} Knoten zu erzeugen. Ein Algorithmus der alle Graphen mit einer gewissen Maximalanzahl an Verbindungen generiert, erfordert eine entsprechende Modifikation. Alternativ können nach Abschluss des Algorithmus auch alle Graphen ignoriert werden, welche zu viele Verbindungen aufweisen, da bei zusammenhängenden Graphen die Anzahl an Verbindungen mindestens so groß wie die um Eins reduzierte Anzahl an Knoten ist.

Der Ausgangspunkt für die Graphengenerierung ist der Graph \mathcal{G}_1 , welcher aus nur einem einzelnen Knoten besteht, und die Menge $G = \{\mathcal{G}_1\}$. Dann kann folgender Algorithmus verwendet werden, um alle Graphen mit maximal N_{\max} Knoten zu erzeugen:

```
1: for  $\mathcal{G} = (V, E) \in G$  do                                ▷ Iteriere über alle Graphen in  $G$ 
2:   for  $v \in V$  do                                       ▷ Iteriere über alle Knoten von  $\mathcal{G}$ 
3:     for  $t \in T$  do                                       ▷ Iteriere über alle möglichen Kopplungstypen
4:       for  $v' \in V, v' \neq v$  do                       ▷ Iteriere über alle Knoten  $v' \neq v$  von  $\mathcal{G}$ 
5:         if  $(v, v', t) \notin E$  then                   ▷ Sind  $v$  und  $v'$  gekoppelt? ( $t'$  beliebig)
6:            $E' \leftarrow E \cup \{(v, v', t)\}$          ▷ Verbinde  $v$  und  $v'$  mit Kopplung  $t$ 
7:           if  $t$  ungerichtet then                     ▷ Ist  $t$  ungerichtet auf dem Gitter?
8:              $E' \leftarrow E' \cup \{(v', v, t)\}$      ▷ Füge inverse Kopplung hinzu
9:           end if
10:           $\mathcal{G}' \leftarrow (V, E')$                    ▷ Erzeuge neuen Graph  $\mathcal{G}'$ 
11:         if  $\mathcal{G}'$  einbettbar auf das Gitter  $\mathcal{L}$  then
```

```

12:           if  $\mathcal{G}'$  top. inäquiv. zu allen Graphen aus  $G$  then
13:                $G \leftarrow G \cup \{\mathcal{G}'\}$            ▷ Füge  $\mathcal{G}'$  zur Menge  $G$  hinzu
14:           end if
15:       end if
16:   end if
17: end for
18: if  $|V| < N_{\max}$  then           ▷ Besitzt  $\mathcal{G}$  weniger Knoten als  $N_{\max}$ ?
19:      $V' \leftarrow V \cup \{v'\}$            ▷ Erzeuge neuen Knoten  $v'$ 
20:      $E' \leftarrow E \cup \{(v, v', t)\}$      ▷ Verbinde  $v$  und  $v'$  mit Kopplung  $t$ 
21:     if  $t$  ungerichtet then           ▷ Ist  $t$  ungerichtet auf dem Gitter?
22:        $E' \leftarrow E' \cup \{(v', v, t)\}$    ▷ Füge inverse Kopplung hinzu
23:     end if
24:      $\mathcal{G}' \leftarrow (V', E')$            ▷ Erzeuge neuen Graph  $\mathcal{G}'$ 
25:     if  $\mathcal{G}'$  einbettbar auf das Gitter  $\mathcal{L}$  then
26:       if  $\mathcal{G}'$  top. inäquiv. zu allen Graphen aus  $G$  then
27:          $G \leftarrow G \cup \{\mathcal{G}'\}$            ▷ Füge  $\mathcal{G}'$  zur Menge  $G$  hinzu
28:       end if
29:     end if
30:   end if
31: end for
32: end for
33: end for .

```

Der Algorithmus iteriert über alle Graphen aus G und fügt solange Verbindungen und Knoten hinzu, bis alle auf das Gitter einbettbaren Graphen mit maximal N_{\max} Gitterplätzen erzeugt werden.

Die entscheidende Information über das Gitter \mathcal{L} fließt – neben der Definition der Kopplungsmenge T – über die Einbettbarkeit (Zeilen 11 und 25 in obigem Algorithmus) ein. Im Folgenden wird ein Algorithmus beschrieben, welcher prüft, ob ein Graph \mathcal{G} auf das Gitter \mathcal{L} eingebettet werden kann und gleichzeitig den Einbettungsfaktor $\nu_{\mathcal{L}}^{\mathcal{G}}$ bestimmt.

A.2 Algorithmus zur Grapheneinbettung

Ausgangspunkt, um alle Einbettungen eines Graphen $\mathcal{G} = (V, E)$ zu bestimmen, ist der sogenannte Mastercluster $\mathcal{G}_M = (V_M, E_M)$. Dieser Graph muss groß genug sein, sodass ausgehend von einem Knoten $a \in V_M$ alle einzubettenden Graphen auf den Mastercluster passen. Im Algorithmus werden die Knoten des Masterclusters mit den Knoten des Graphen identifiziert. Dabei gibt es im Allgemeinen mehrere Möglichkeiten, welche genau den Einbettungen von \mathcal{G} auf \mathcal{G}_M entsprechen, da die Einbettung des Graphen \mathcal{G} dadurch beschrieben werden kann, welche Knoten aus dem Mastercluster den Knoten von \mathcal{G} entsprechen.

Der Algorithmus findet in einem ersten Schritt alle Knotenidentifizierungen, bei denen der Anfangsknoten $a \in V_M$ enthalten ist. Dabei wird nicht beachtet, ob diese Identifizierung

tatsächlich eine erlaubte Einbettung darstellt. Mit N als Anzahl der Knoten von \mathcal{G} nimmt der erste Teil des Algorithmus die folgende Form an:

```

1: Starte mit der Menge  $S = \emptyset$  der Knotenidentifizierungen
2: for  $i \in V$  do
3:    $s = (s_1, \dots, s_N) = (-1, \dots, -1)$   $\triangleright$  Erzeuge Tupel der identifizierten Knoten und
   assoziiere  $-1$  mit nicht identifiziert
4:    $s_i = a$   $\triangleright$  Setze aktuellen Gitterplatz auf den Anfangsknoten
5:   Füge  $s$  der Menge  $S$  hinzu
6:   for  $s \in S$  do
7:     for  $i = 1, \dots, N$  do
8:       if  $s_i \neq -1$  then
9:         for  $j \in V$  mit  $(i, j, t) \in E$  do
10:          if  $s_j \neq -1$  then
11:            for  $b \in V_M$  mit  $(s_i, b, t) \in E_M$  do
12:              if Falls  $b$  noch nicht im Tupel  $s$  vorkommt then
13:                 $s' = s$ 
14:                 $s'_j = b$ 
15:                Füge  $s'$  der Menge  $S$  hinzu
16:              end if
17:            end for
18:          end if
19:        end for
20:      end if
21:    end for
22:  end for
23: end for
24: Entferne alle Tupel aus  $S$ , welche noch Einträge enthalten die  $-1$  sind.

```

Obiger Teil des Algorithmus liefert eine Menge S , welche alle Identifikationen von Knoten des Graphen \mathcal{G} enthält. Im Allgemeinen sind aber Identifikationen enthalten, welche einen Graphen darstellen, der kein Untergraph von \mathcal{G}_M ist. In einem zweiten Schritt wird deshalb überprüft, welche Knotenidentifikationen erlaubt sind:

```

1: for  $s \in S$  do
2:   Weise allen Knoten  $i \in V$  die Identifizierung  $s_i$  zu, um den beschrifteten Graphen
    $\mathcal{G}_{id}$  zu erhalten.
3:   if  $\mathcal{G}_{id} \not\subset \mathcal{G}_M$  then Entferne  $s$  aus  $S$ .
4:   end if
5: end for

```

Die Menge S enthält nun alle Einbettungen von \mathcal{G} auf \mathcal{G}_M inklusive der entsprechenden Knotenidentifizierungen.

A.3 Algorithmus zur Graphensubtraktion

Für die Berechnung der reduzierten Beiträge (siehe Definition 10 in Kapitel 2.1.1) müssen alle Untergraphen (Definition 9) des Graphen \mathcal{G} abgezogen werden. Da alle topologisch äquivalenten (Definition 7) Graphen \mathcal{G}' denselben Beitrag $P^{\mathcal{G}'}$ zu einer physikalischen Größe P liefern, reicht es $P^{\mathcal{G}'}$ auf einem dieser Graphen zu berechnen und diesen Beitrag dann entsprechend der Anzahl ν aller topologisch äquivalenten Untergraphen von \mathcal{G} abzuziehen. Die Bestimmung von ν gestaltet sich entsprechend einfach, da nur die kanonische Graphzahl aller Untergraphen bestimmt werden muss.

Ausgehend von einer schnittstabilen Menge $G = \{\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2, \dots, \mathcal{G}_n\}$ von n topologisch inäquivalenten (beschrifteten) Graphen, kann der Subtraktionsfaktor ν_j^i , welcher angibt wie viele zum Graphen \mathcal{G}_j topologisch äquivalente Untergraphen in \mathcal{G}_i enthalten sind, mit folgendem Algorithmus bestimmt werden:

- 1: $\nu_j^i \leftarrow 0$ für alle i, j
- 2: **for** $i = 1, \dots, n$ **do** ▷ Iteriere über alle Graphen in G
- 3: **for** $\mathcal{G} \subset \mathcal{G}_i$ **do** ▷ Iteriere über alle Untergraphen von \mathcal{G}_i
- 4: Bestimme die kanonische Graphzahl $z_{\text{kan}}^{\mathcal{G}}$ von \mathcal{G}
- 5: Finde \mathcal{G}_j aus G mit $z_{\text{kan}}^{\mathcal{G}} = z_{\text{kan}}^{\mathcal{G}_j}$
- 6: $\nu_j^i \leftarrow \nu_j^i + 1$ ▷ Erhöhe Subtraktionsfaktor
- 7: **end for**
- 8: **end for**

Für die Berechnung von effektiven Modellen ist es zusätzlich noch wichtig zu wissen, welche Knoten des Graphen \mathcal{G}_i den Knoten von \mathcal{G}_j entsprechen. Dazu muss lediglich die Beschriftung des Untergraphen $\mathcal{G} \subset \mathcal{G}_i$ mit der Beschriftung von \mathcal{G}_j verglichen werden, um die zueinander korrespondierenden Knoten zu identifizieren.

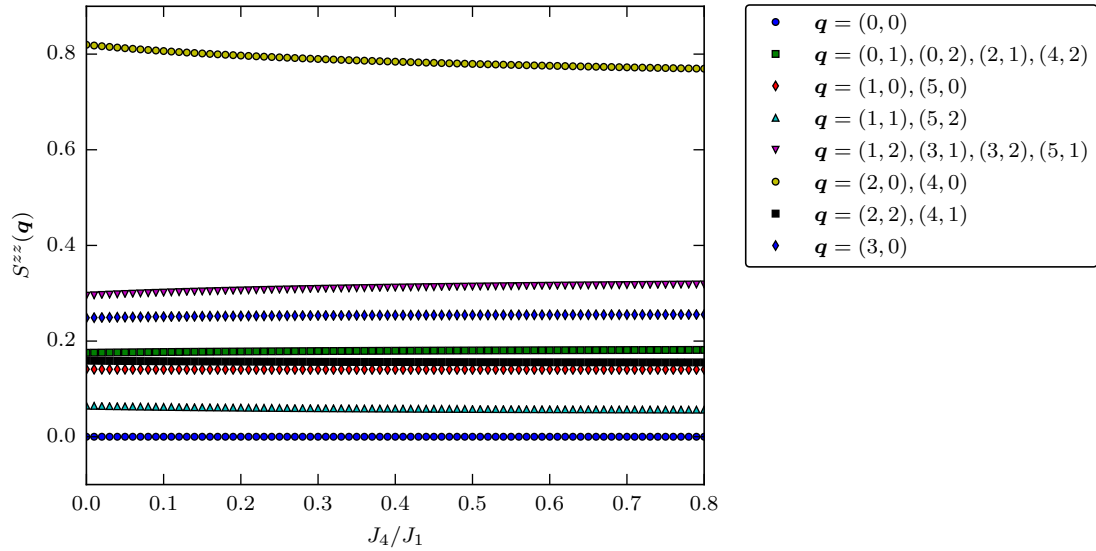
Anhang B

Weiterführende Abbildungen

In diesem Anhang werden weiterführende Abbildungen zu den in Kapitel 4 und 5 dargestellten Ergebnissen präsentiert. Für eine detaillierte Erklärung der Abbildungen sei an dieser Stelle auf die Beschreibungen des jeweiligen Kapitels verwiesen.

B.1 Hubbardmodell auf dem π -Fluss Dreiecksgitter

(a) Cluster mit 18 Gitterplätzen



(b) Cluster mit 24 Gitterplätzen

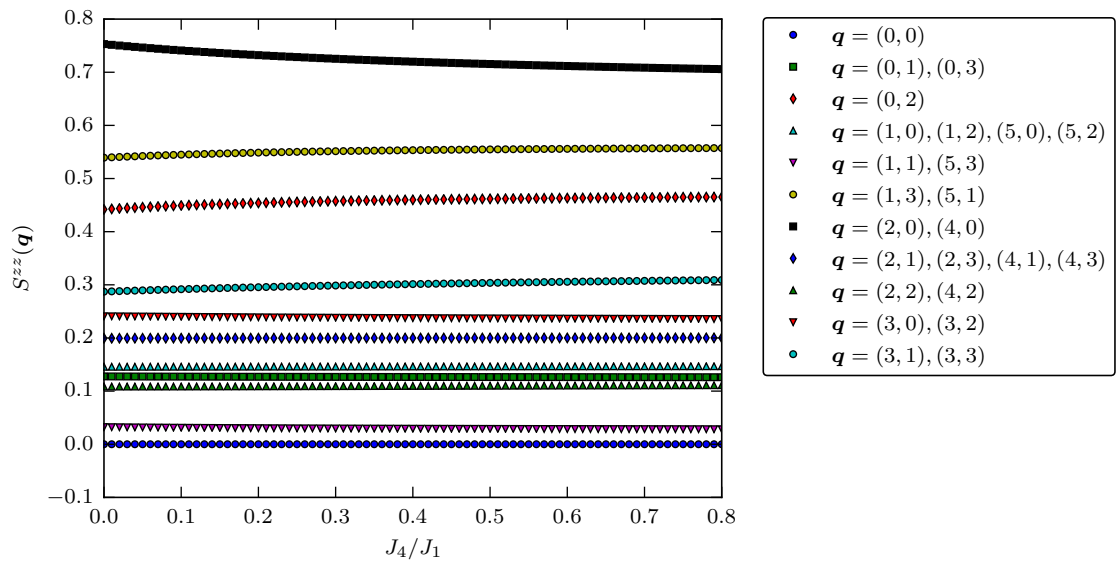
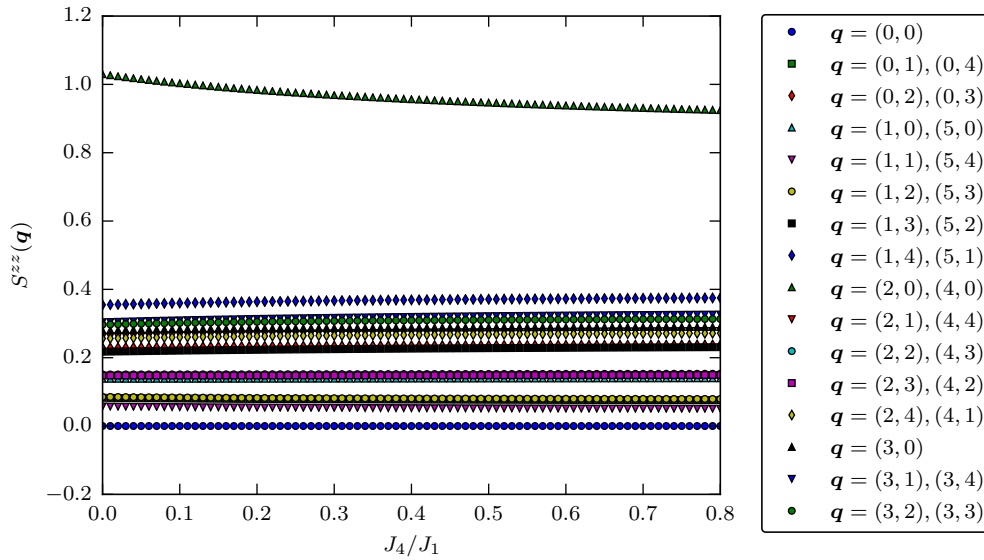


Abbildung B.1: Spinstrukturfaktor $S^{zz}(\mathbf{q})$ des Grundzustandes für das J_1 - J_4 Modell auf dem Dreiecksgitter für die Cluster mit (a) 18 und (b) 24 Gitterplätzen. Werte von $S^{zz}(\mathbf{q})$, welche für verschiedene \mathbf{q} bis auf 0.001 gleich sind, sind zusammengefasst.

(a) Cluster mit 30 Gitterplätzen



(b) Cluster mit 36 Gitterplätzen

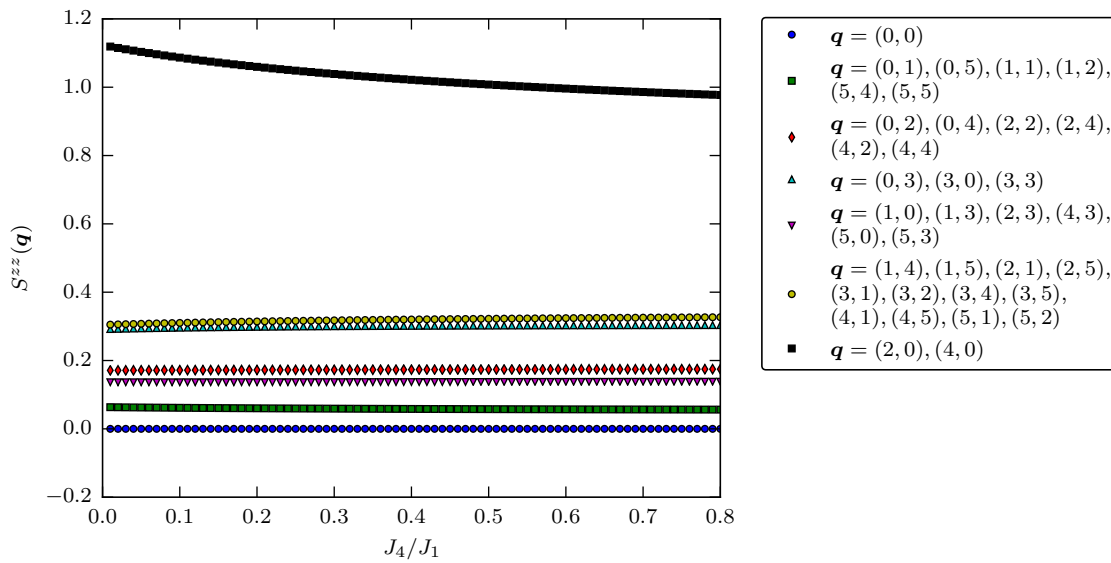


Abbildung B.2: Spinstrukturfaktor $S^{zz}(\mathbf{q})$ des Grundzustandes für das J_1 - J_4 Modell auf dem Dreiecksgitter für die Cluster mit (a) 30 und (b) 36 Gitterplätzen. Werte von $S^{zz}(\mathbf{q})$, welche für verschiedene \mathbf{q} bis auf 0.001 gleich sind, sind zusammengefasst.

B.2 Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Quadratgitter

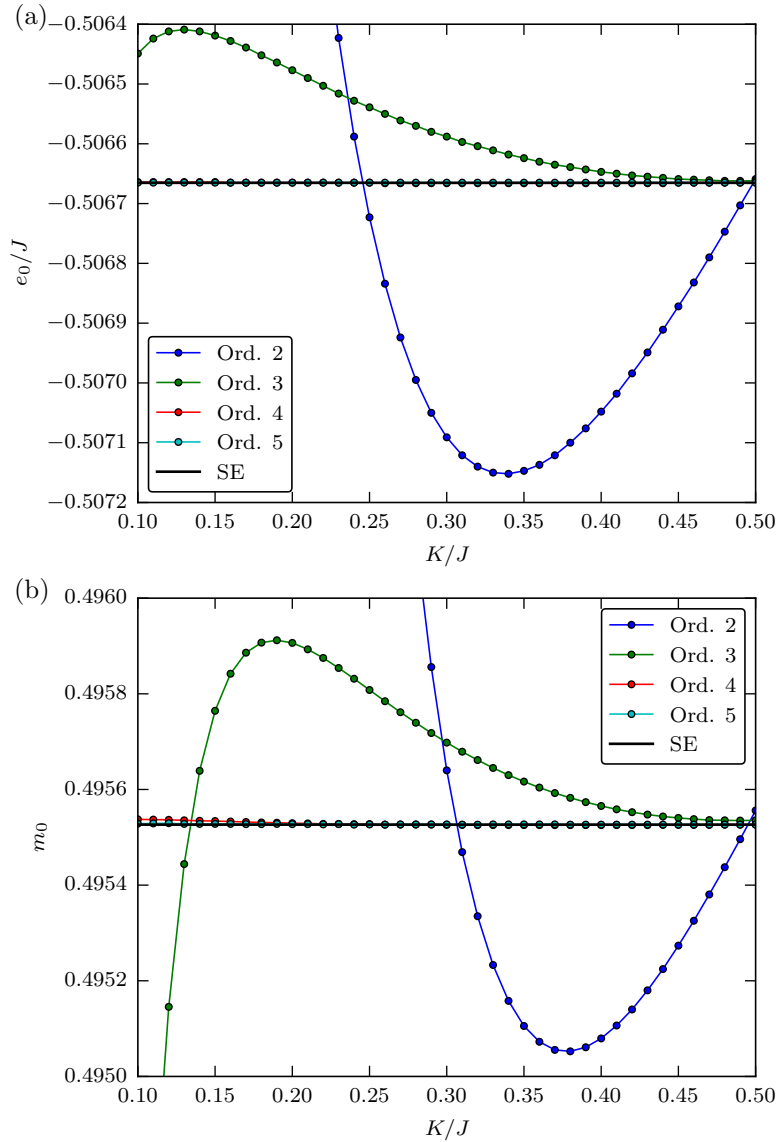


Abbildung B.3: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.2$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der nichtextrapolierte durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmte Wert [118, 169, 170]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

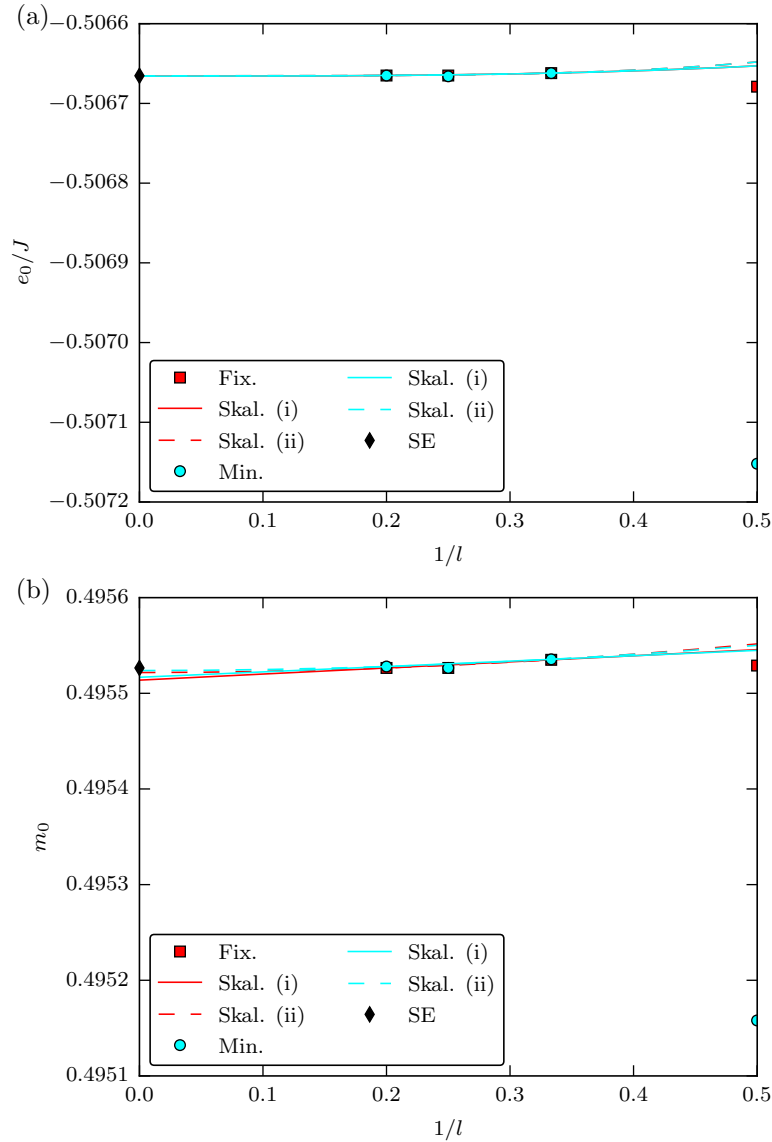


Abbildung B.4: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.2$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmten Werte [118, 169, 170] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

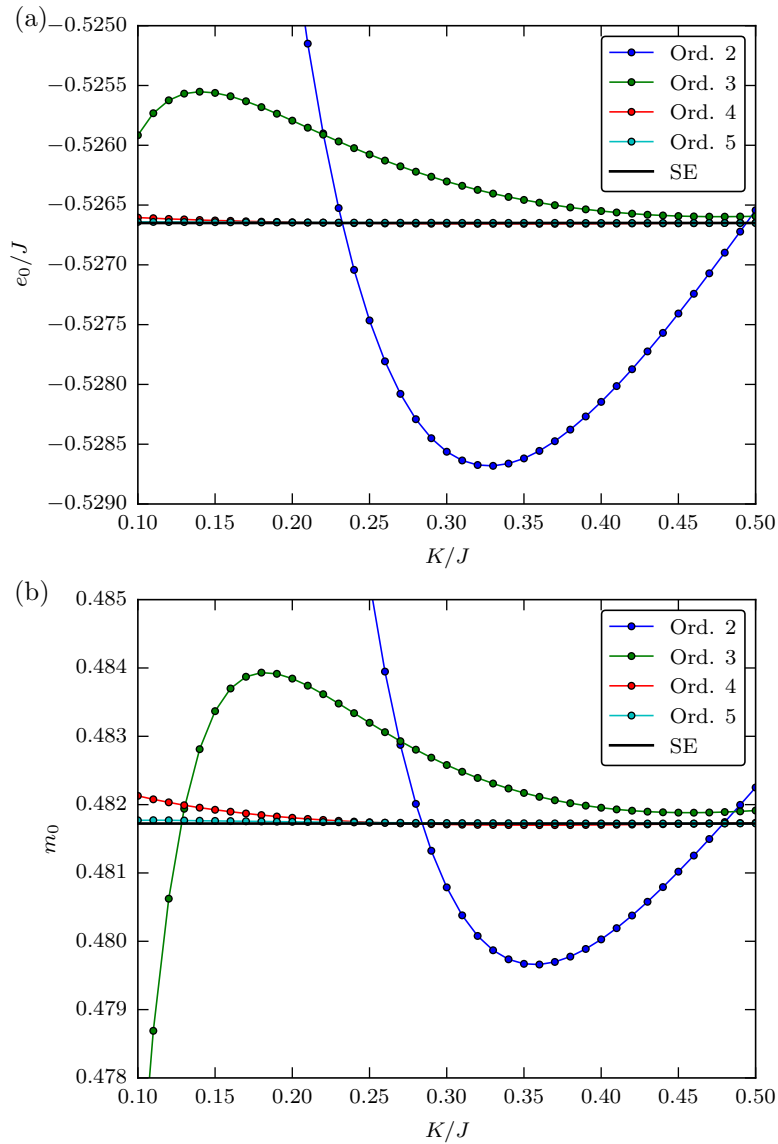


Abbildung B.5: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.4$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der nichtextrapolierte durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmte Wert [118, 169, 170]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

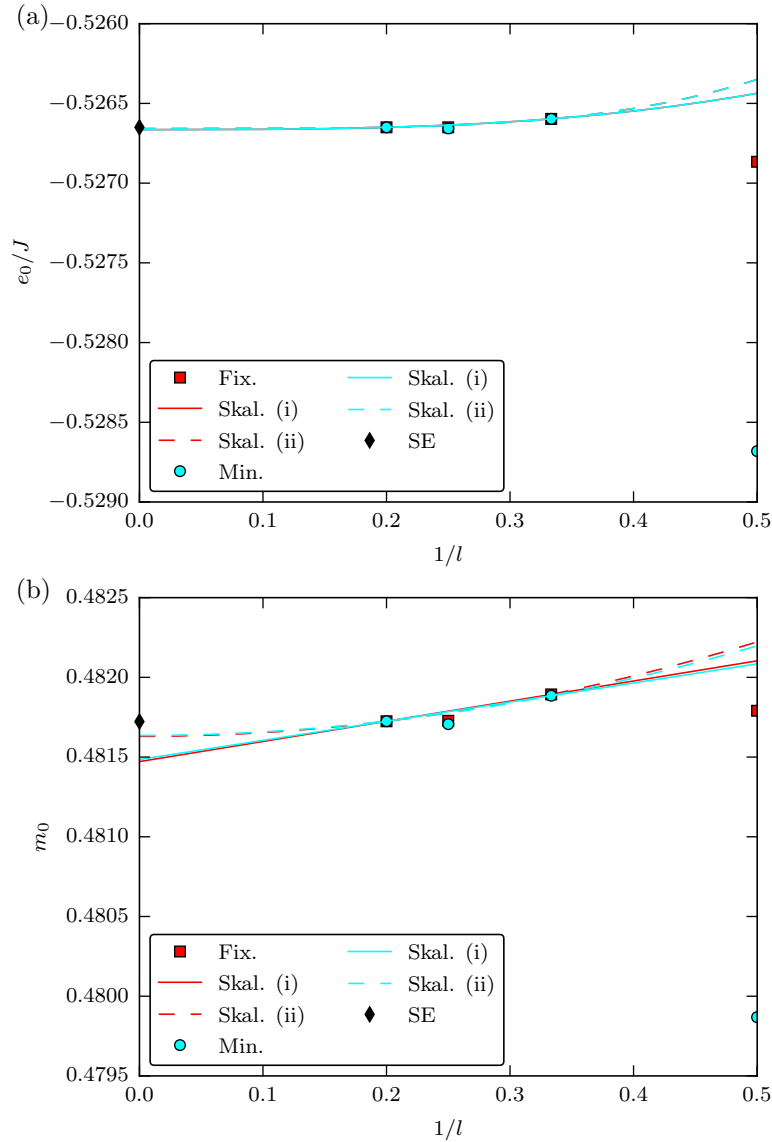


Abbildung B.6: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.4$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die nichtextrapolierten durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmten Werte [118, 169, 170] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

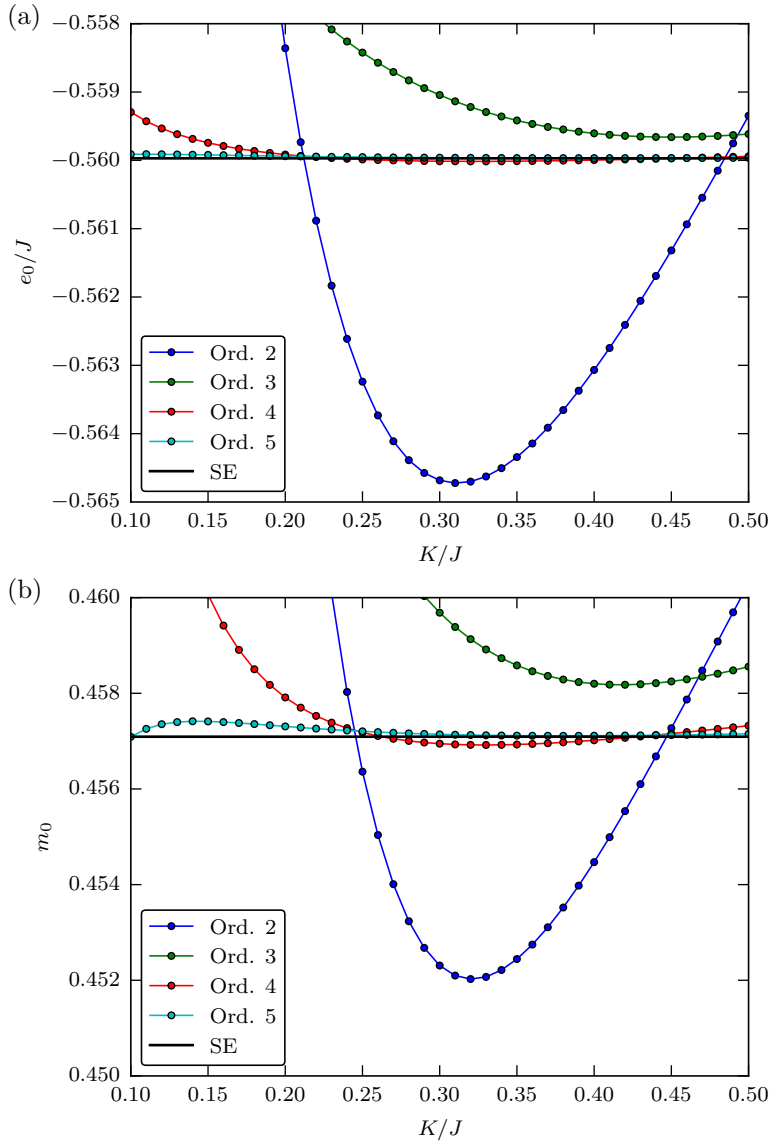


Abbildung B.7: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.6$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der nichtextrapolierte durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmte Wert [118, 169, 170]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

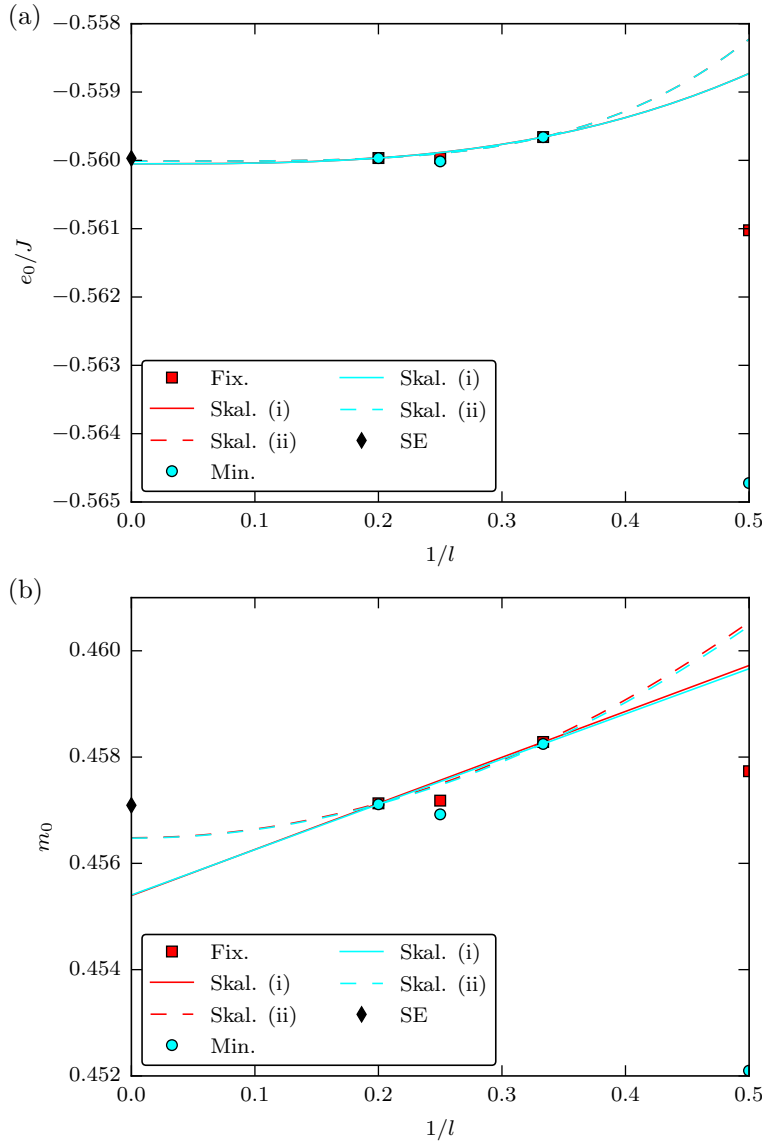


Abbildung B.8: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.6$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die nichtextrapolierten durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmten Werte [118, 169, 170] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

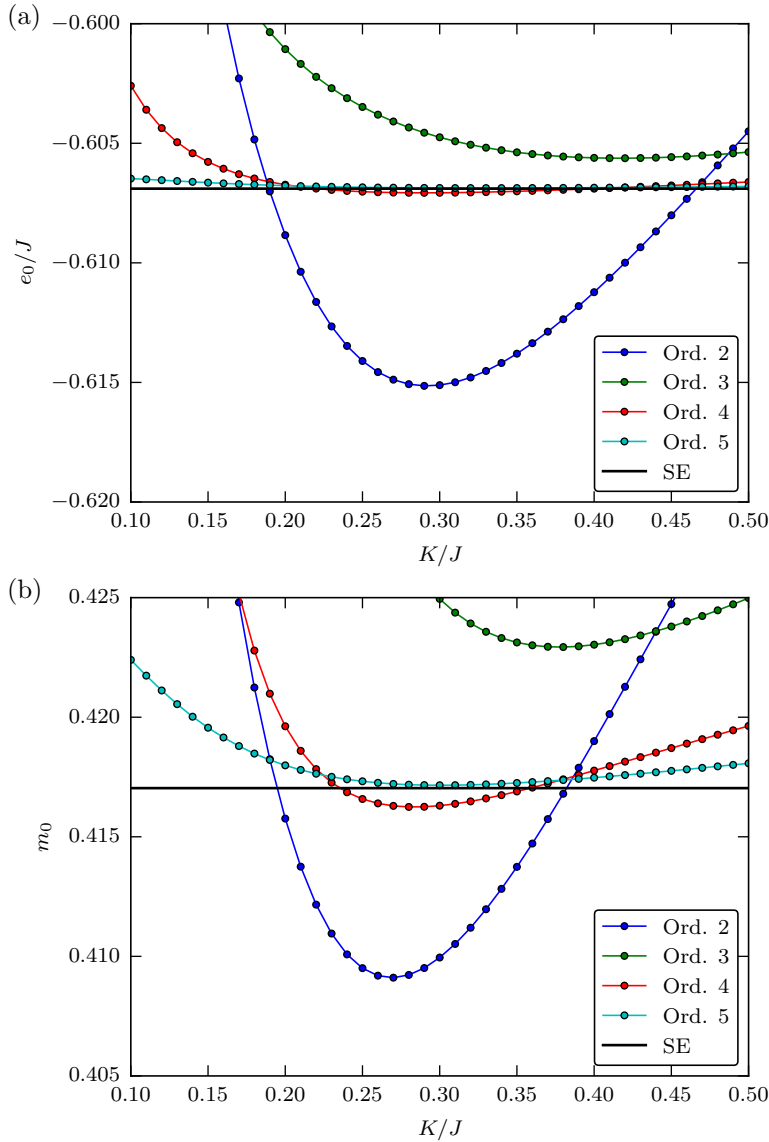


Abbildung B.9: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.8$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der nichtextrapolierte durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmte Wert [118, 169, 170]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

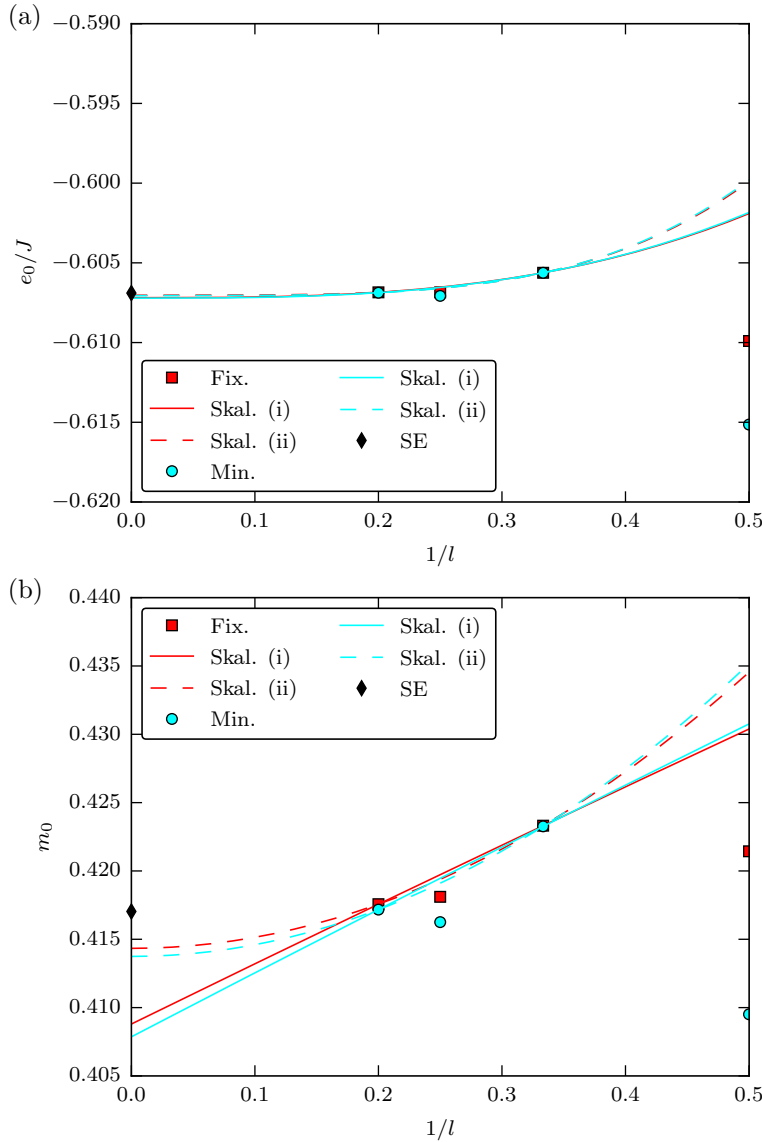


Abbildung B.10: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.8$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die nichtextrapolierten durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmten Werte [118, 169, 170] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

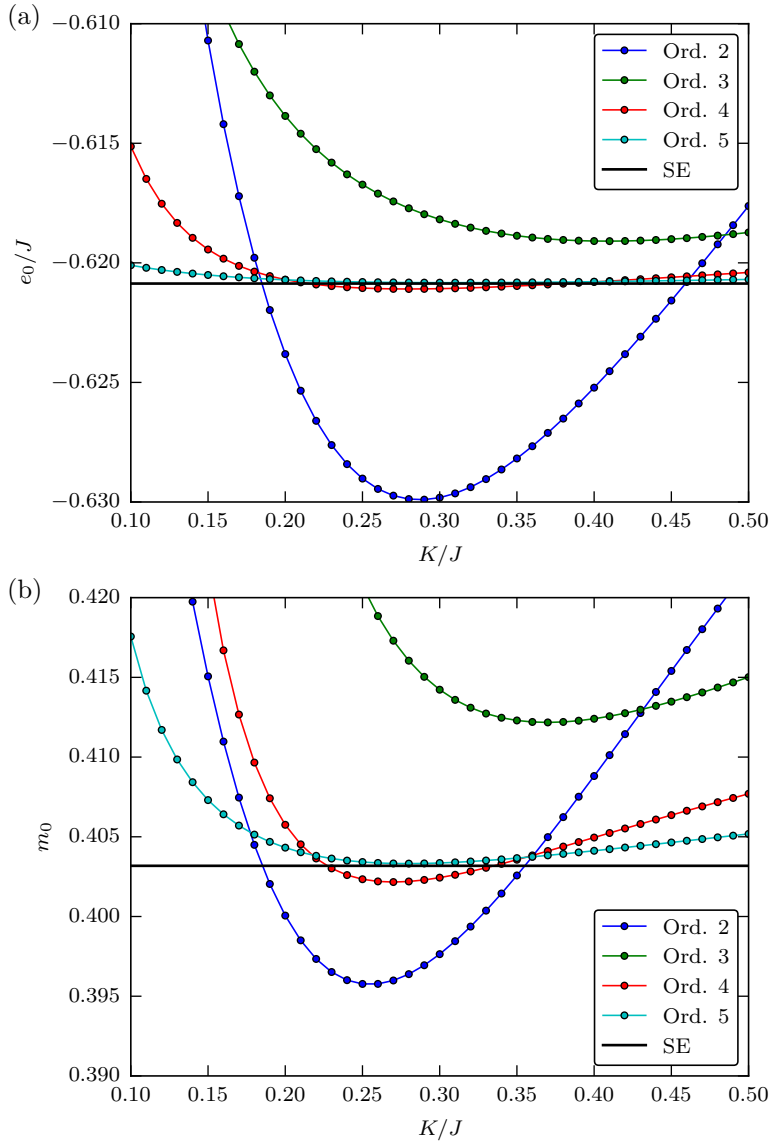


Abbildung B.11: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.85$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der nichtextrapolierte durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmte Wert [118, 169, 170]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

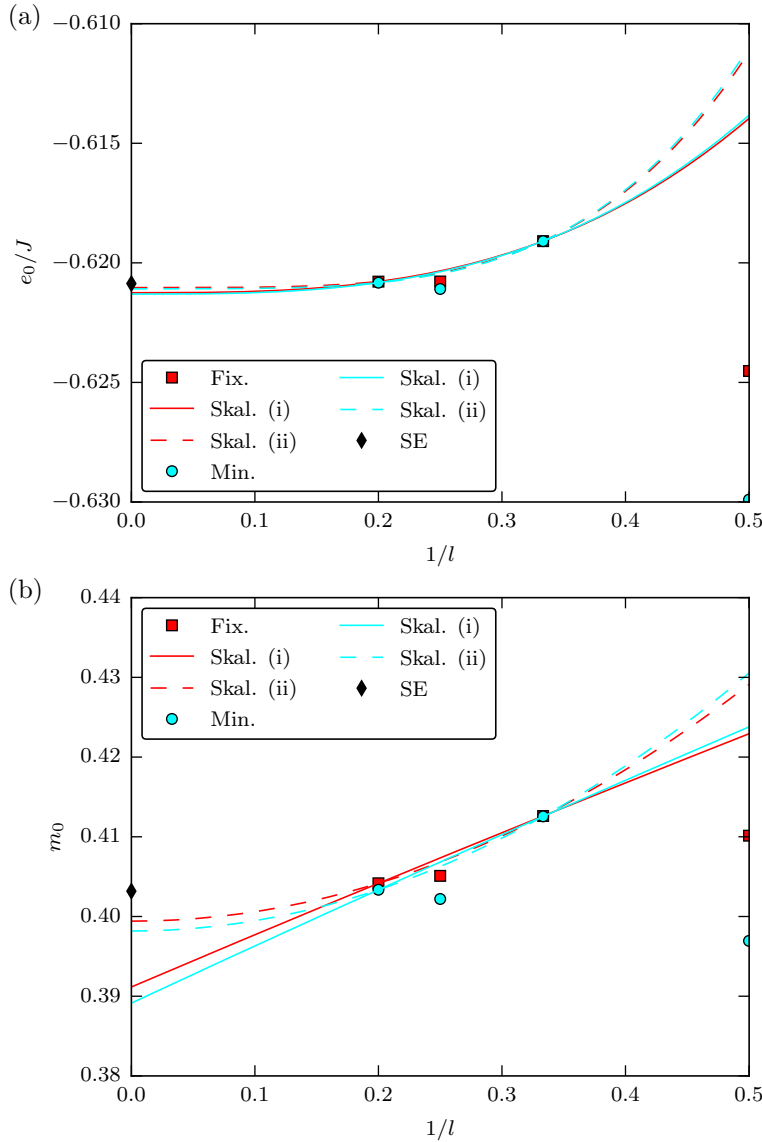


Abbildung B.12: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.85$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die nichtextrapolierten durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmten Werte [118, 169, 170] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

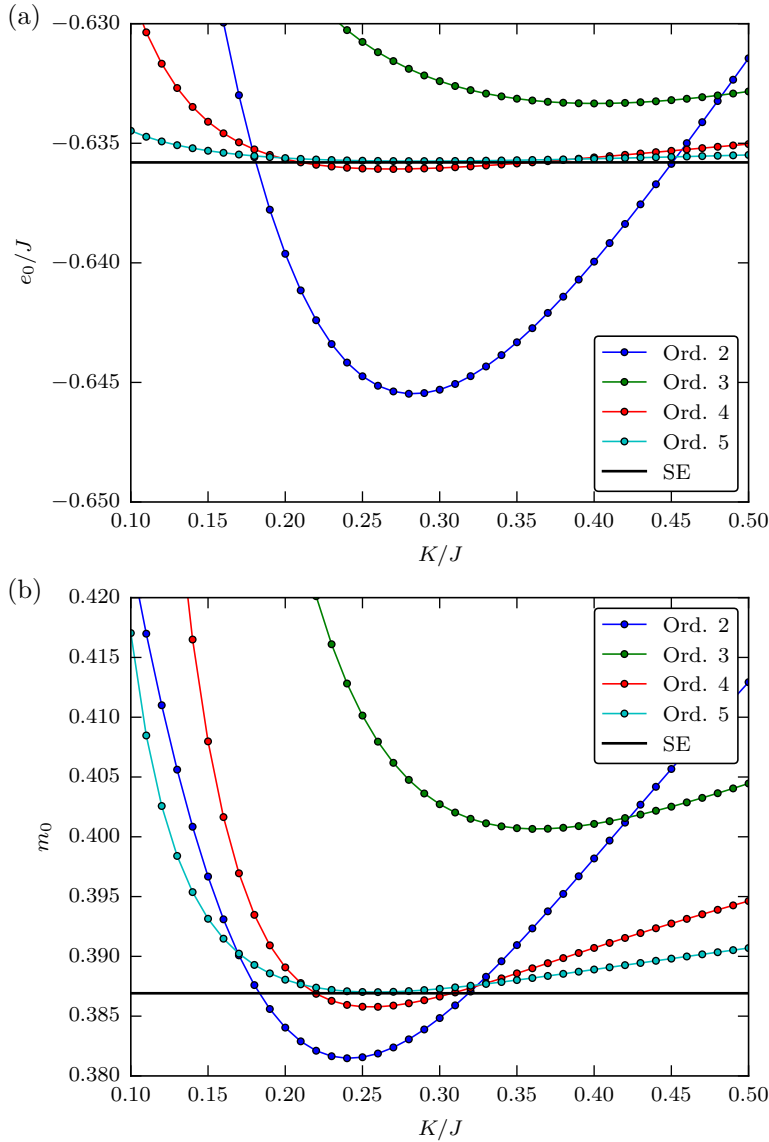


Abbildung B.13: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.9$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der nichtextrapolierte durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmte Wert [118, 169, 170]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

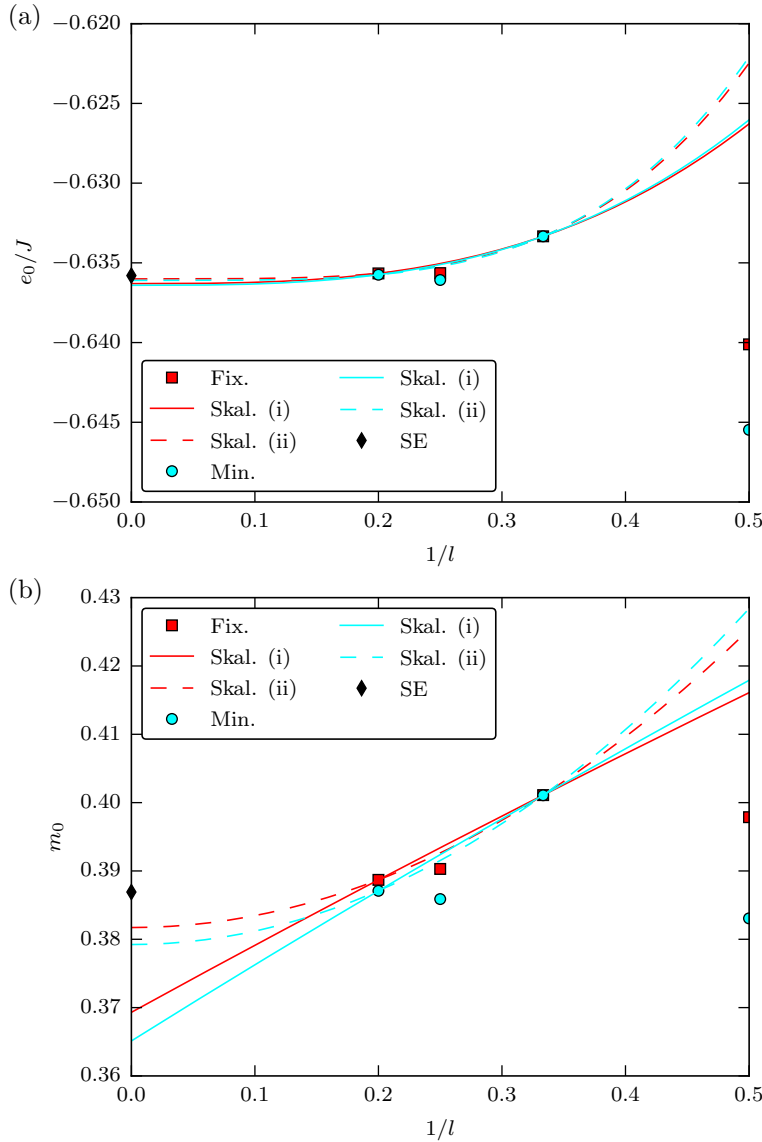


Abbildung B.14: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.9$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die nichtextrapolierten durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmten Werte [118, 169, 170] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

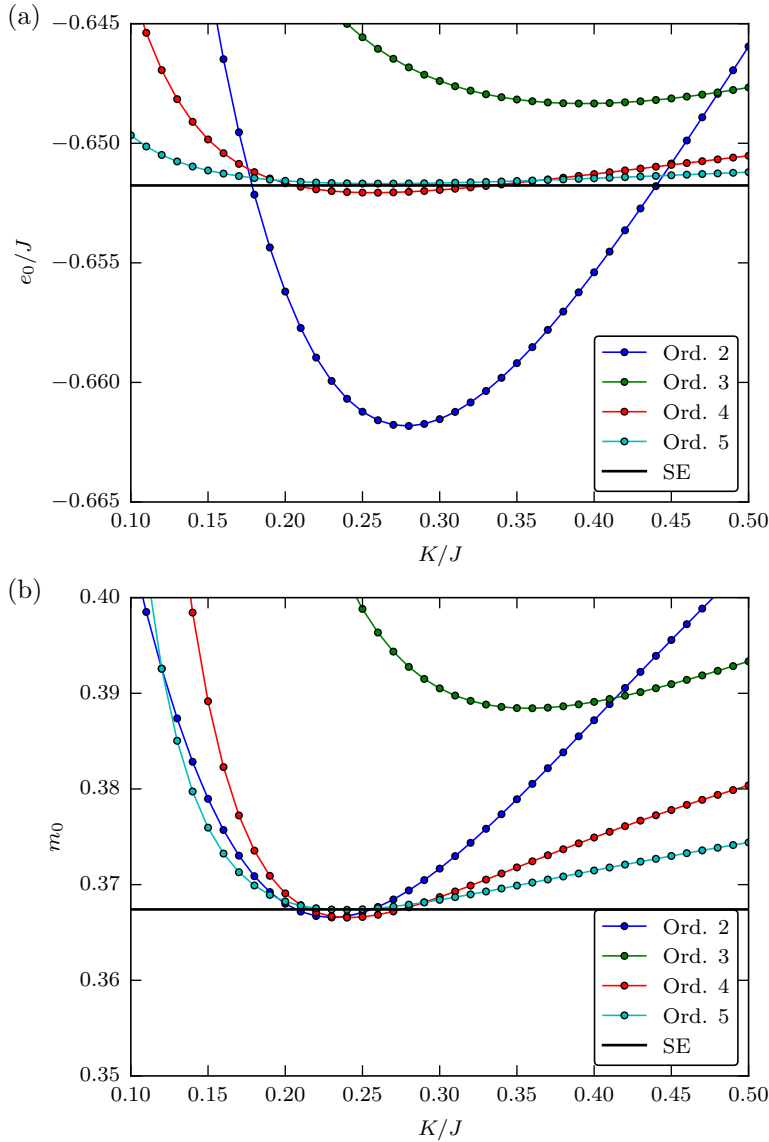


Abbildung B.15: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.95$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der nichtextrapolierte durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmte Wert [118, 169, 170]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

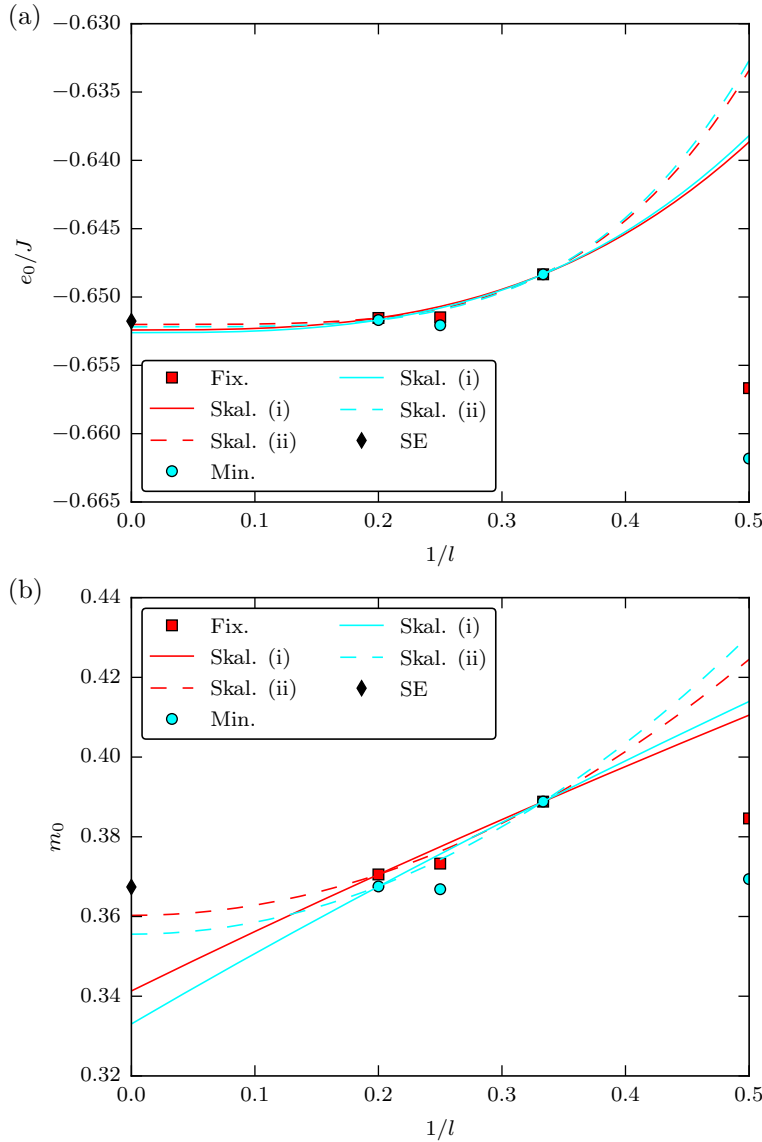


Abbildung B.16: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.95$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die nichtextrapolierten durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmten Werte [118, 169, 170] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

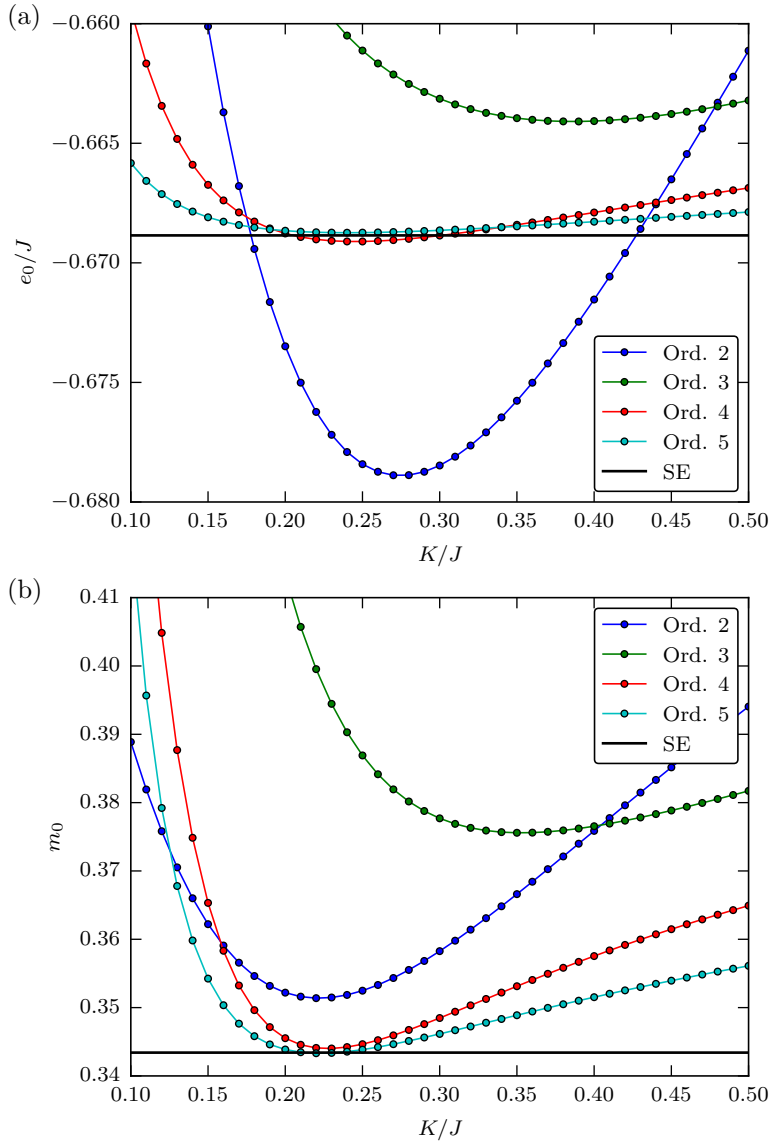


Abbildung B.17: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 1$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter. Die horizontale schwarze Linie ist der nichtextrapolierte durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmte Wert [118, 169, 170]. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

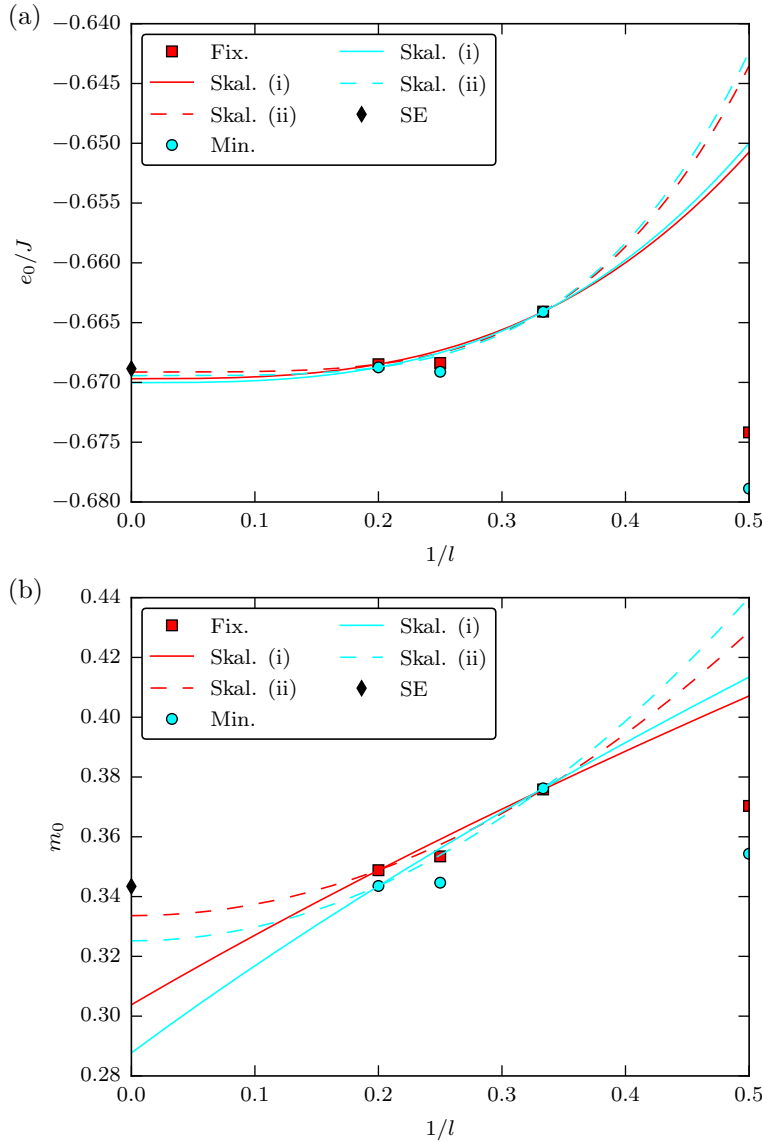


Abbildung B.18: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 1$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 und die schwarzen Rauten stellen die nichtextrapolierten durch Reihenentwicklung (SE) bis Ordnung 14 bestimmten Werte [118, 169, 170] dar. Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

B.3 Spin-1/2 XXZ-Modell auf dem Dreiecksgitter

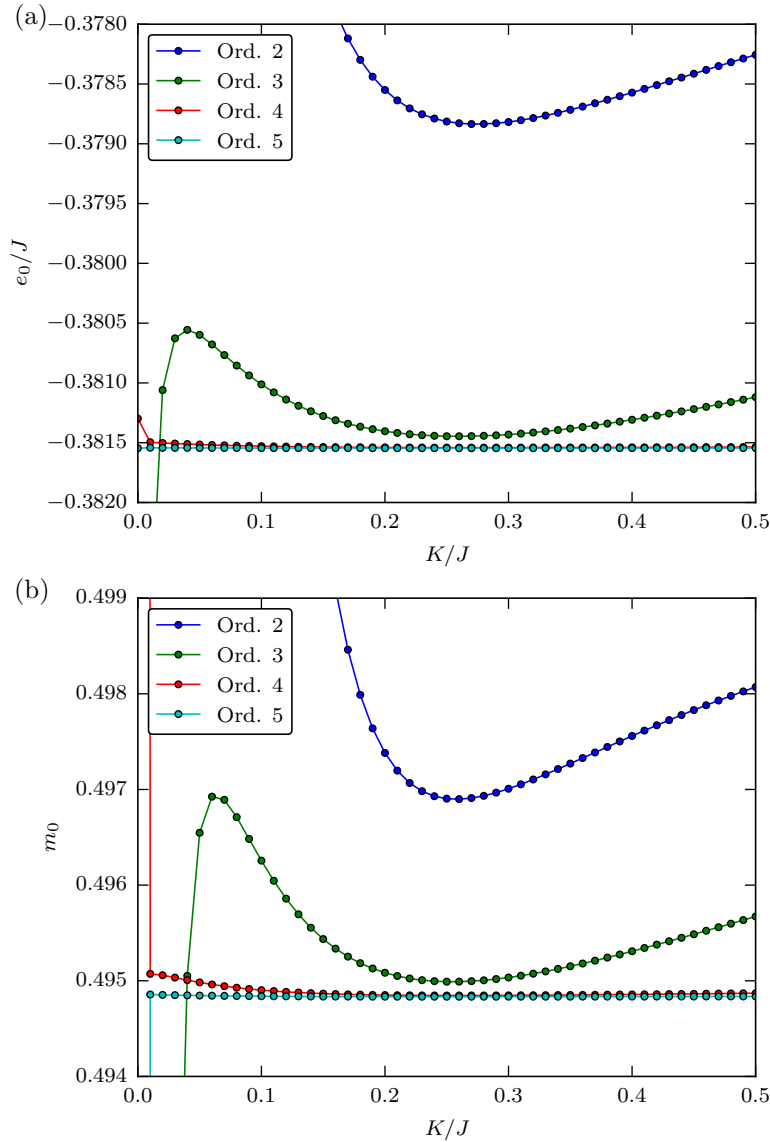


Abbildung B.19: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.2$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

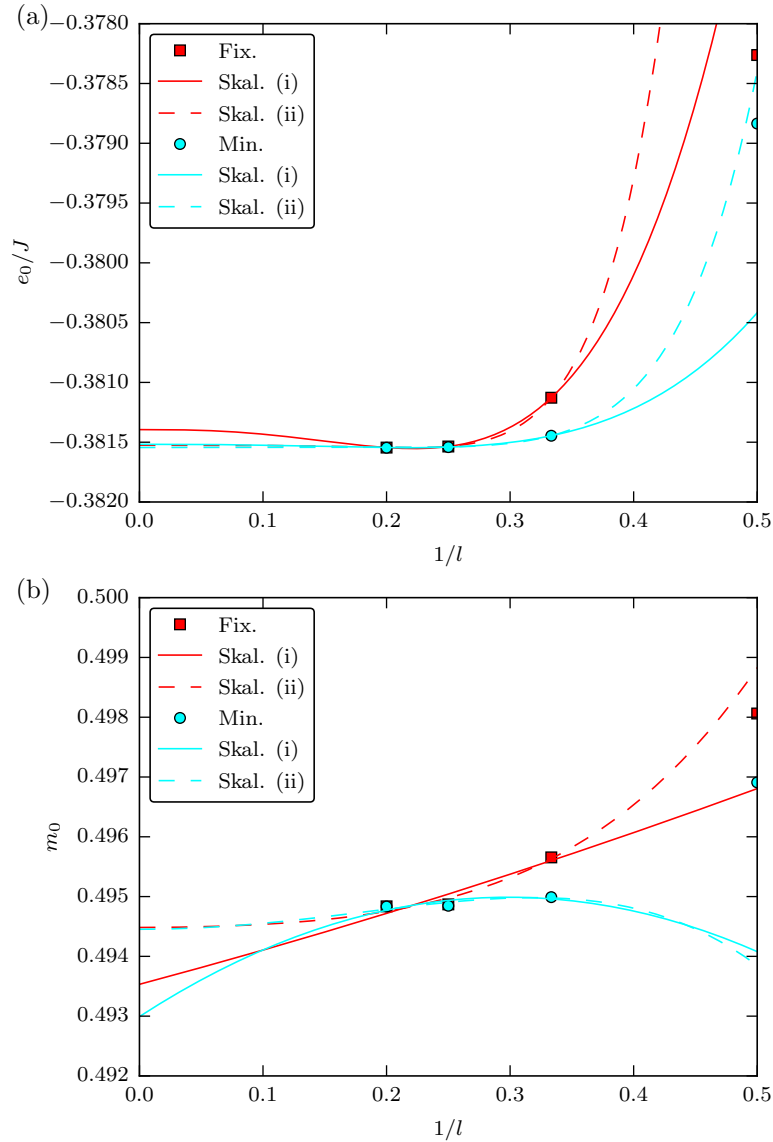


Abbildung B.20: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.2$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 . Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

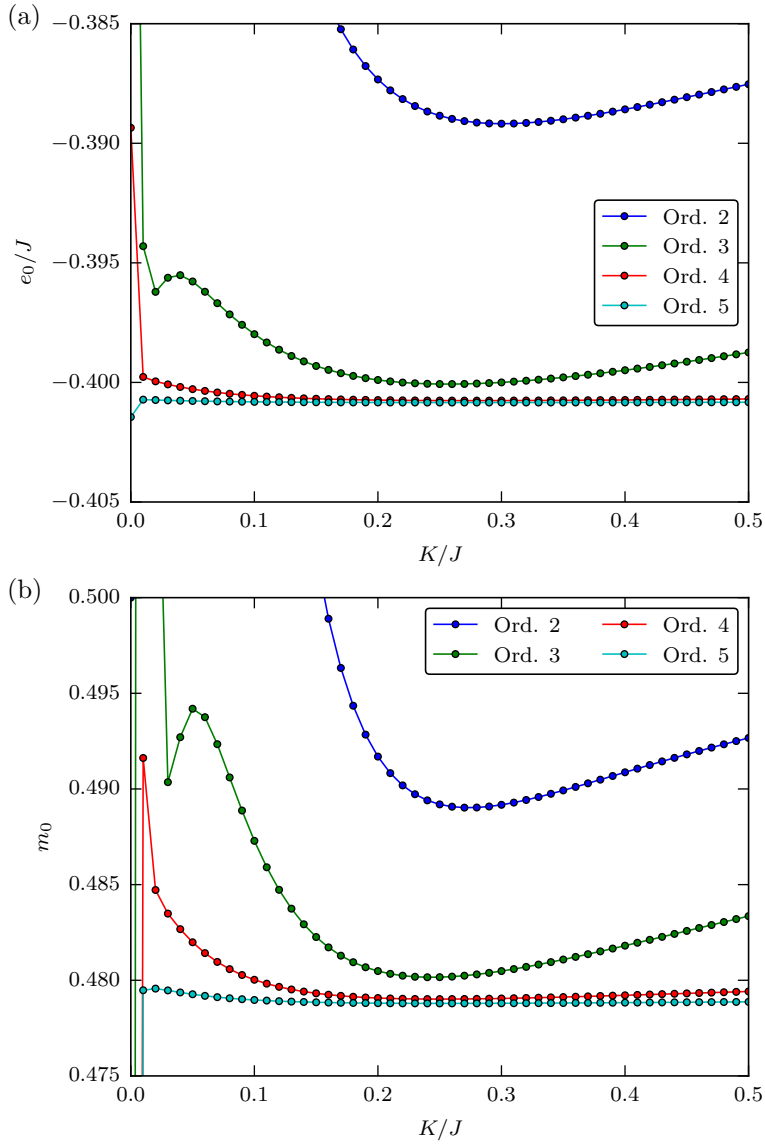


Abbildung B.21: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.4$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

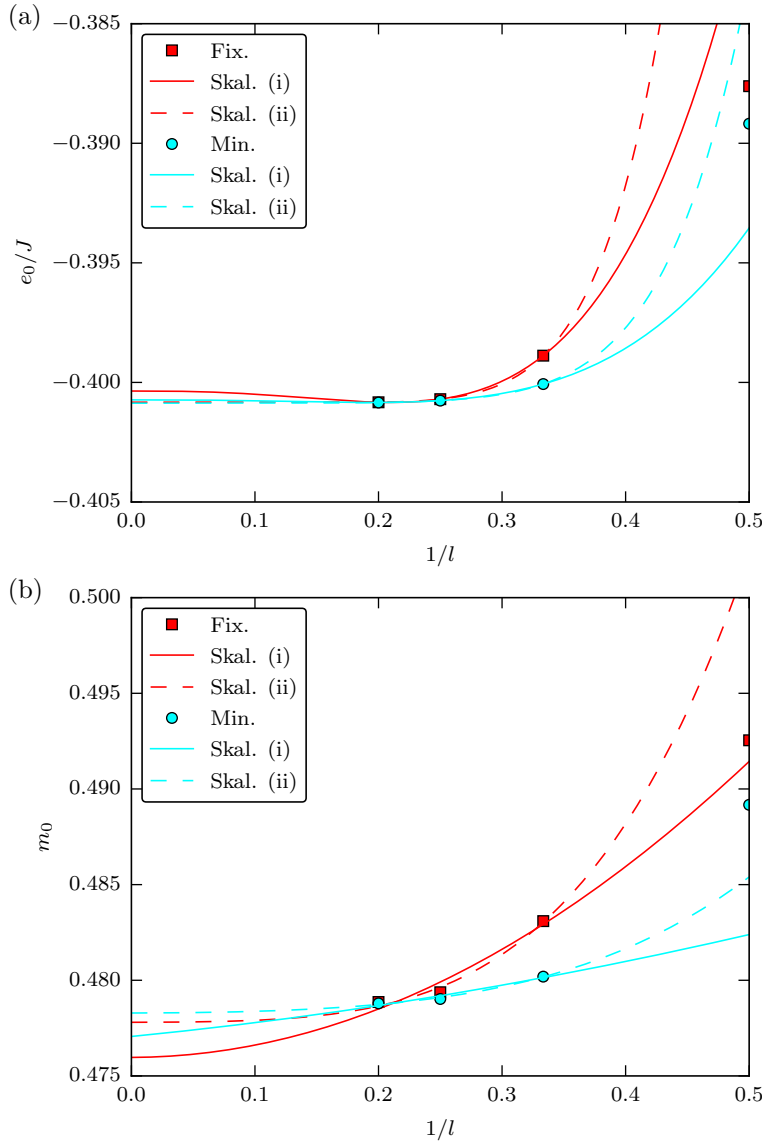


Abbildung B.22: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.4$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 . Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

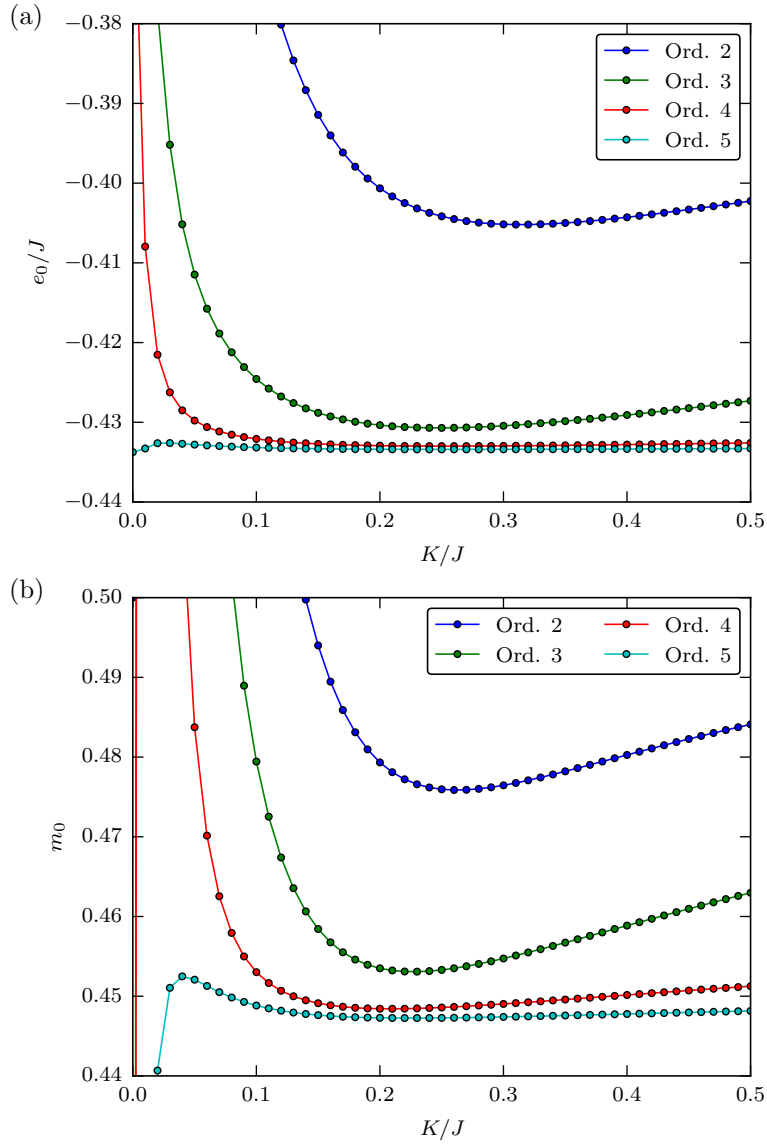


Abbildung B.23: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.6$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

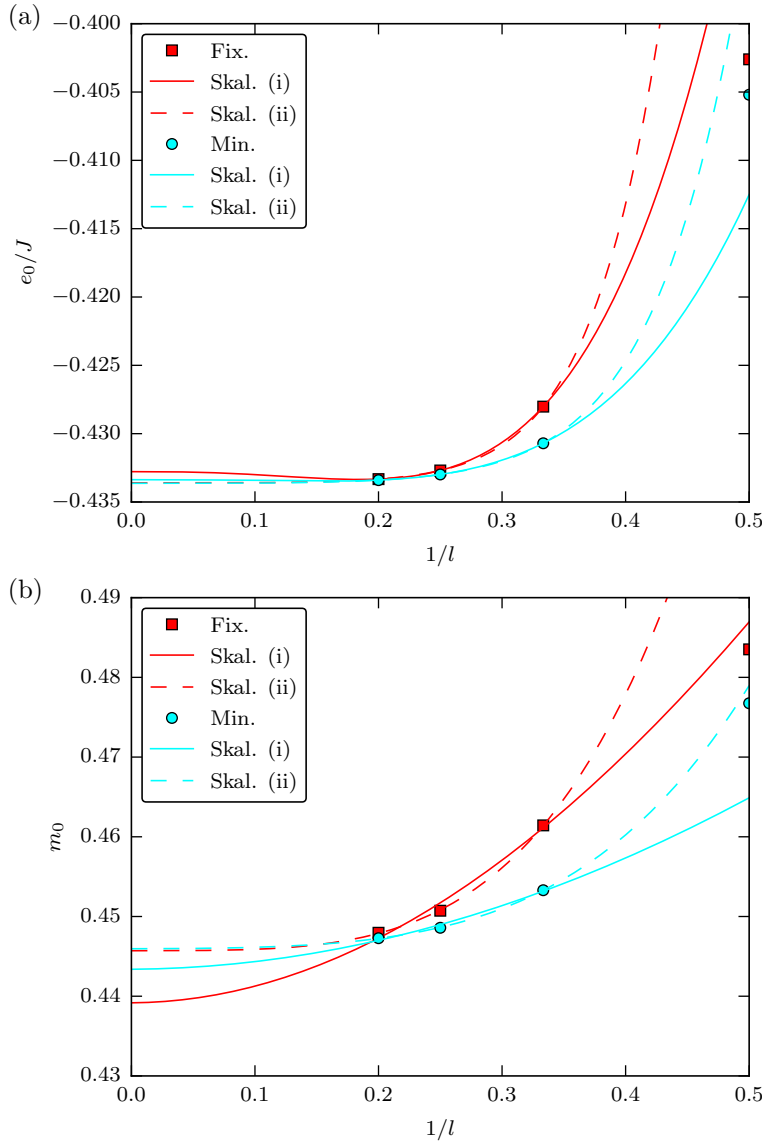


Abbildung B.24: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.6$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 . Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

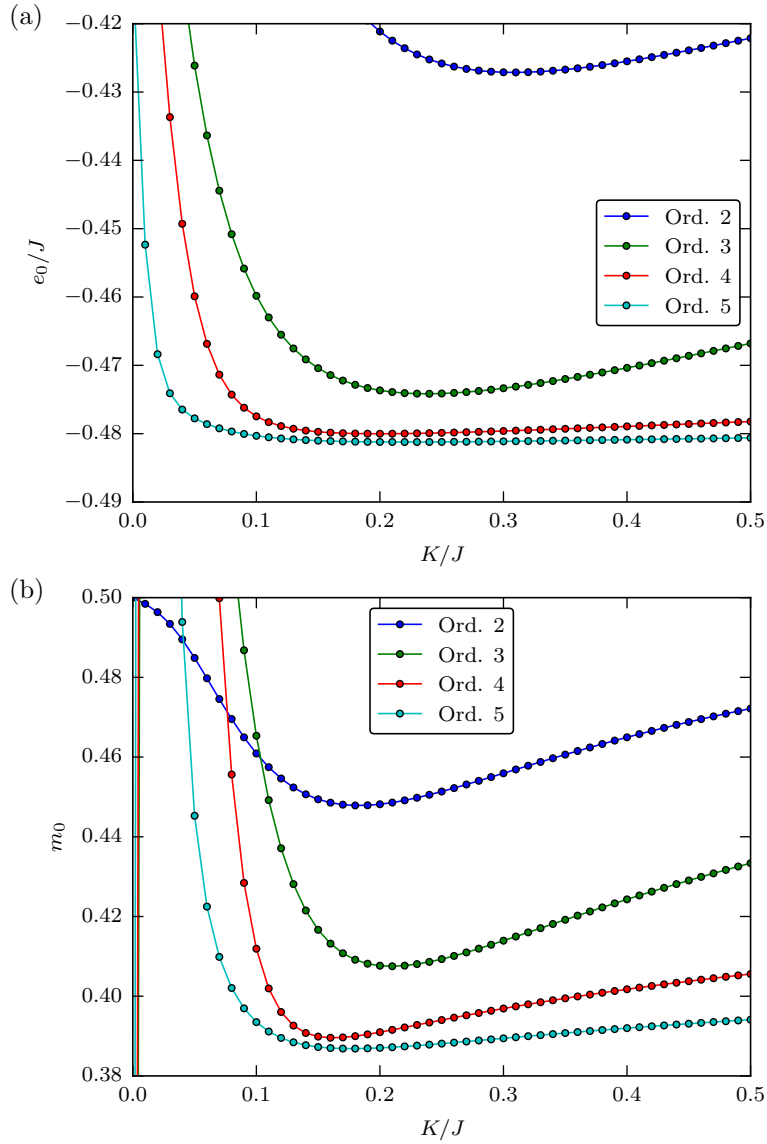


Abbildung B.25: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.8$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

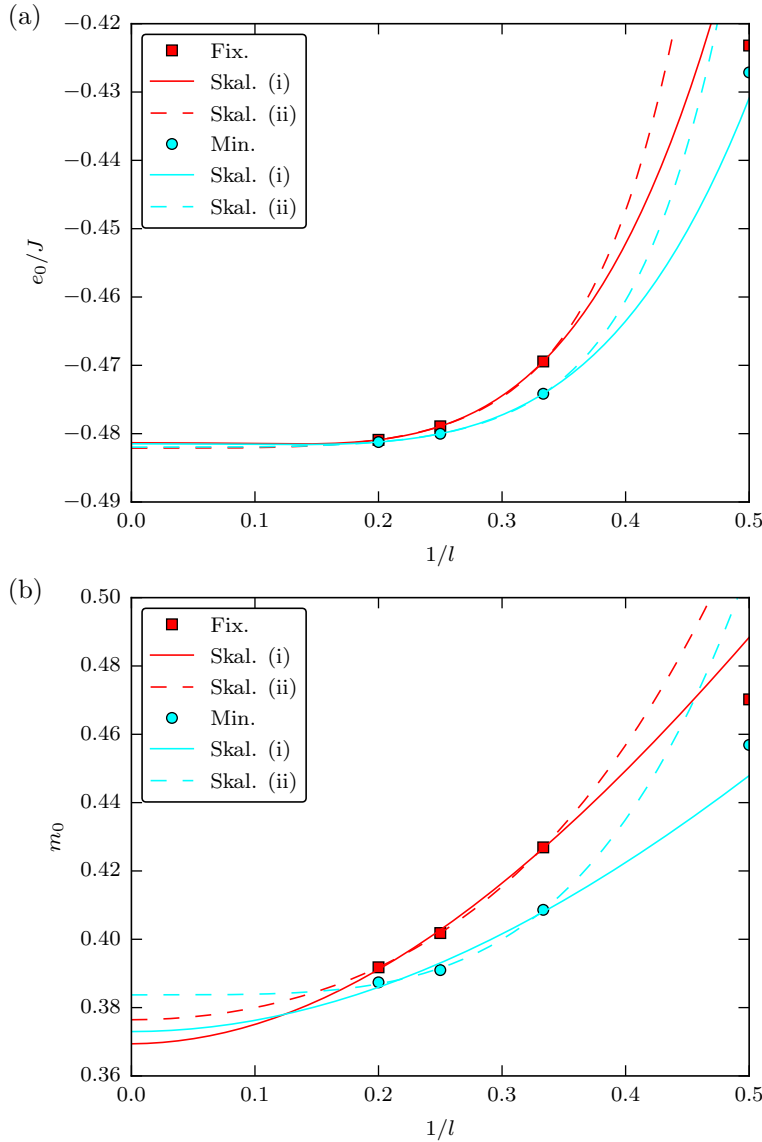


Abbildung B.26: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.8$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 . Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

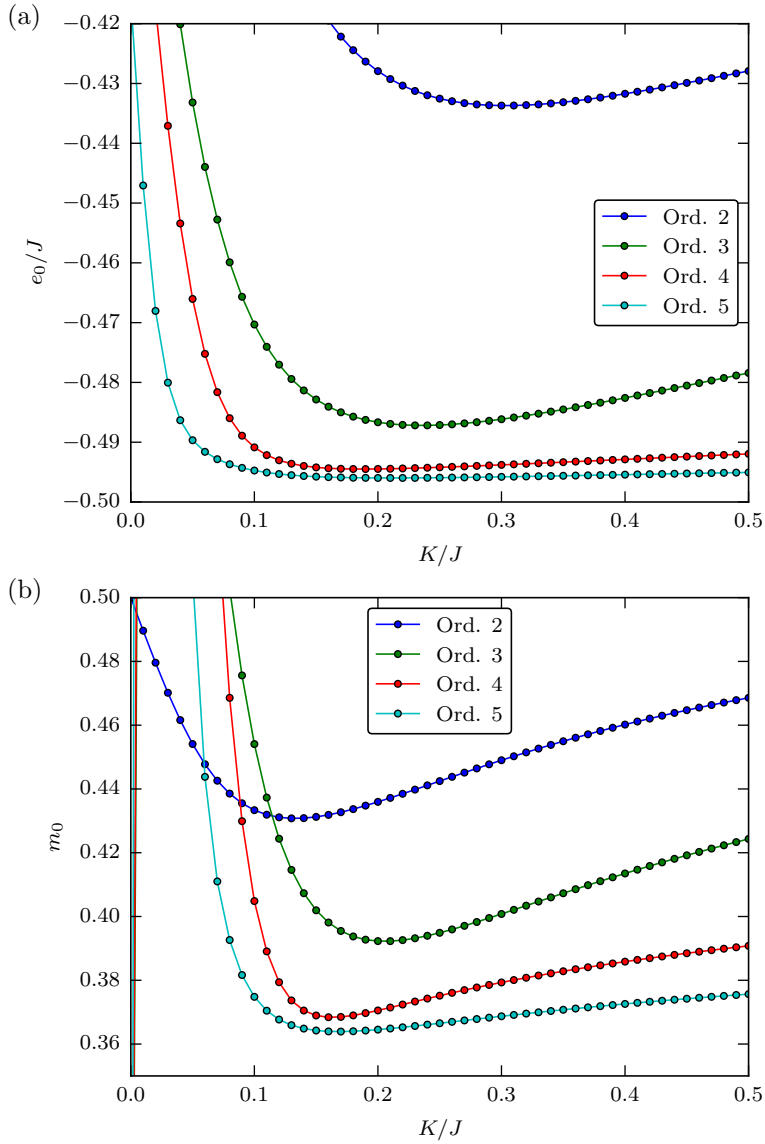


Abbildung B.27: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.85$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

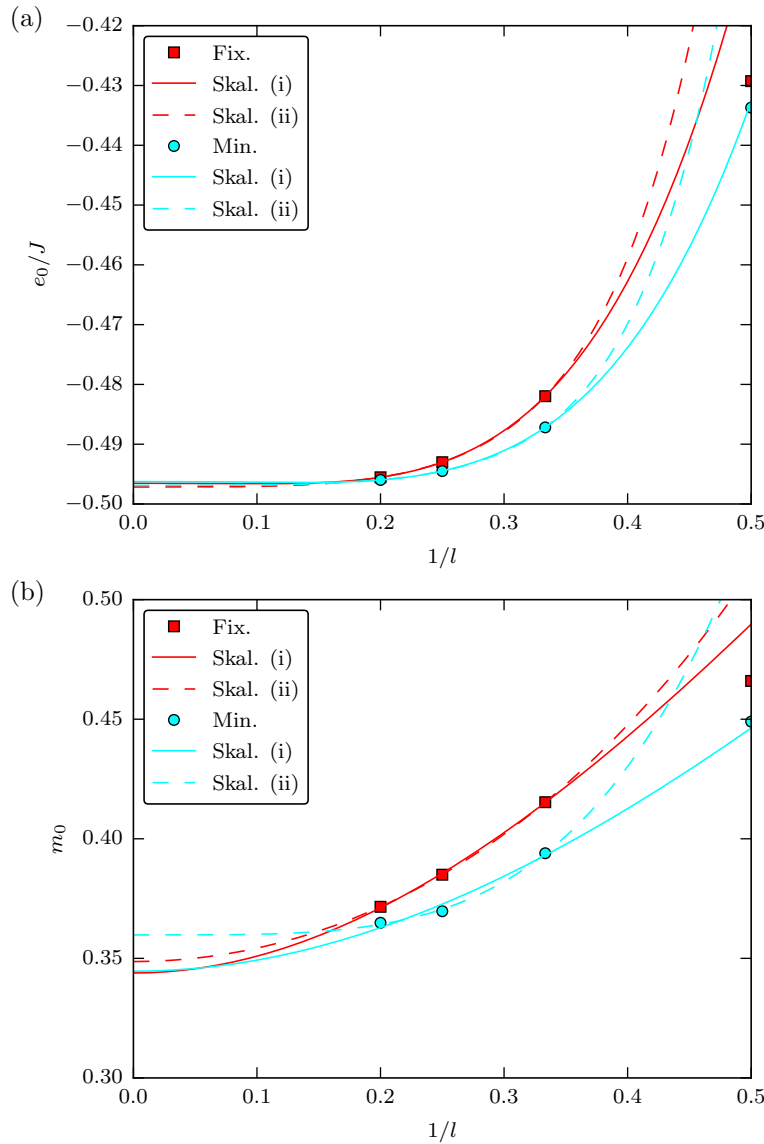


Abbildung B.28: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.85$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 . Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

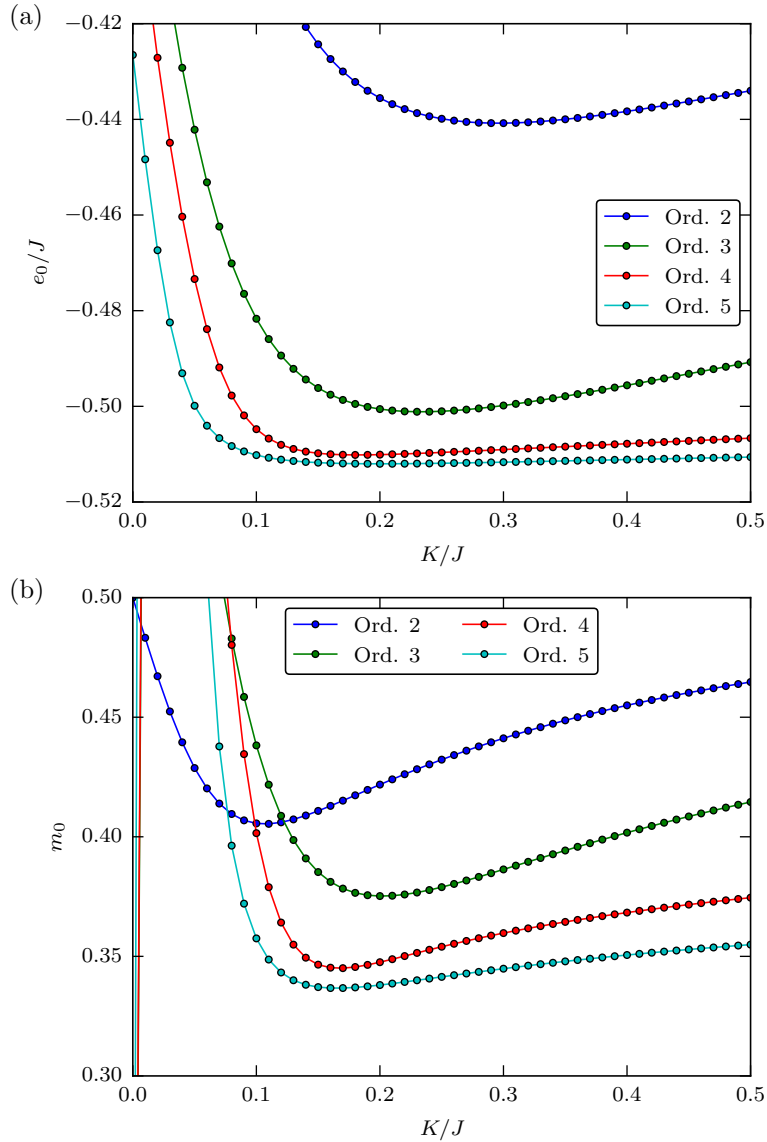


Abbildung B.29: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.9$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

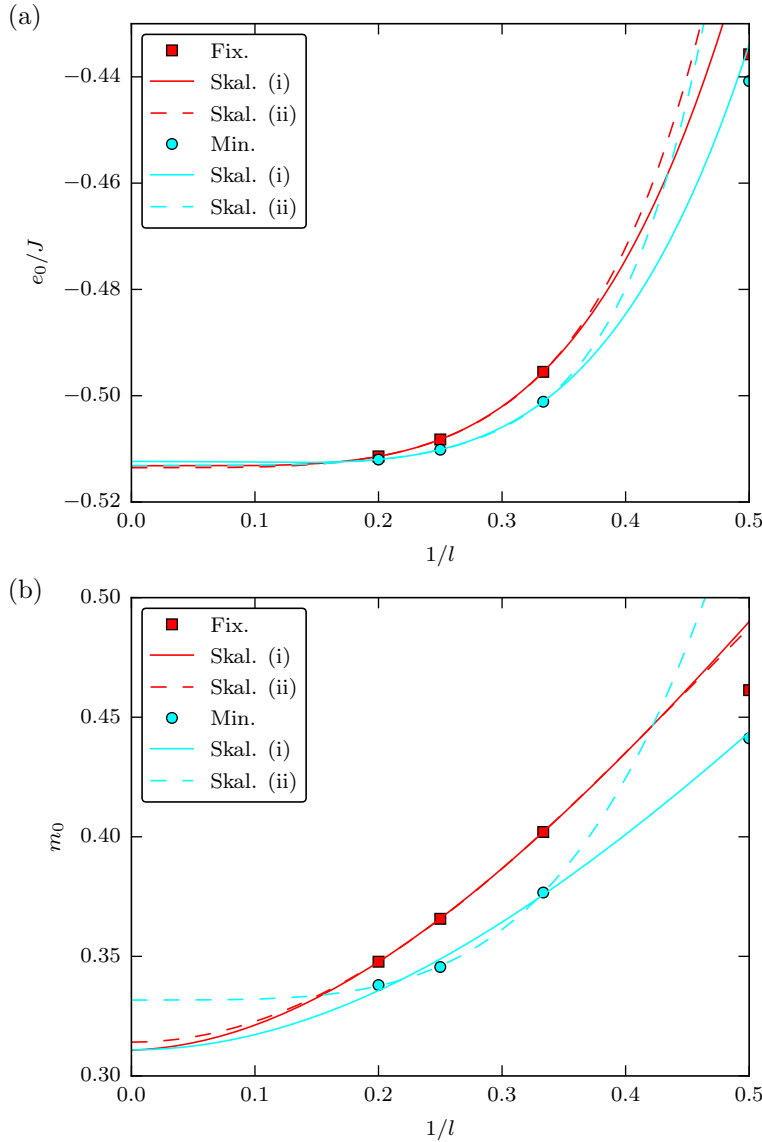


Abbildung B.30: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.9$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 . Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

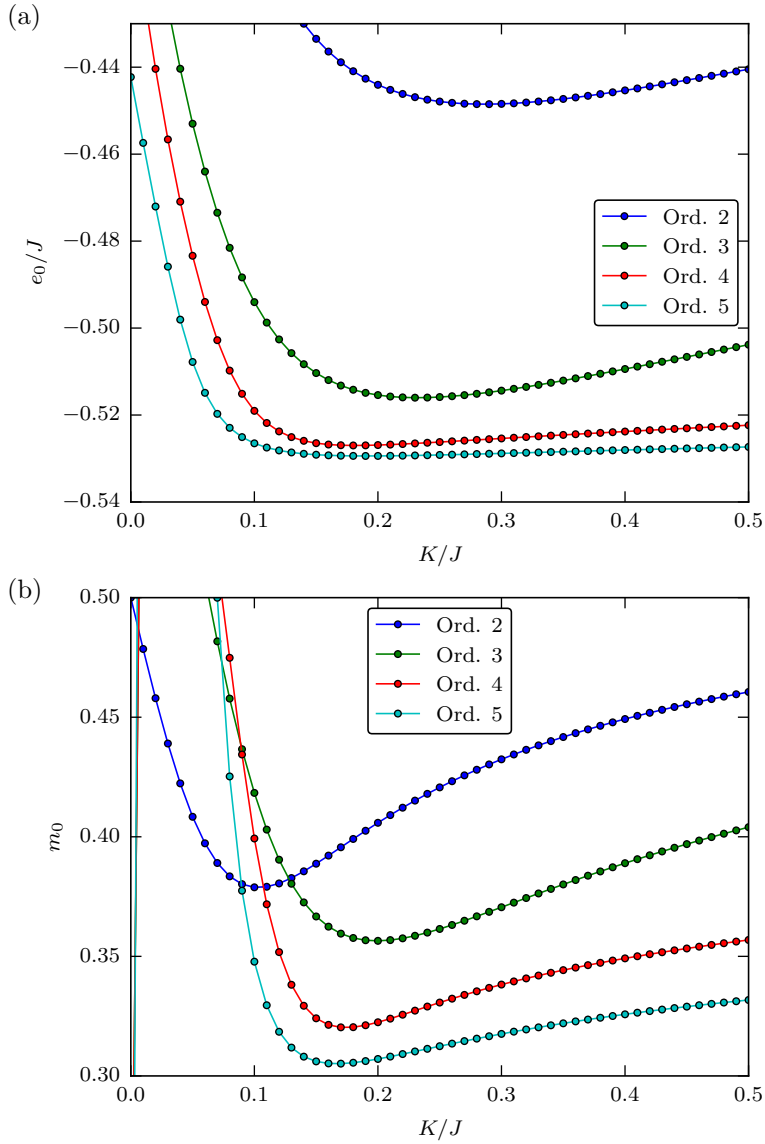


Abbildung B.31: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 0.95$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

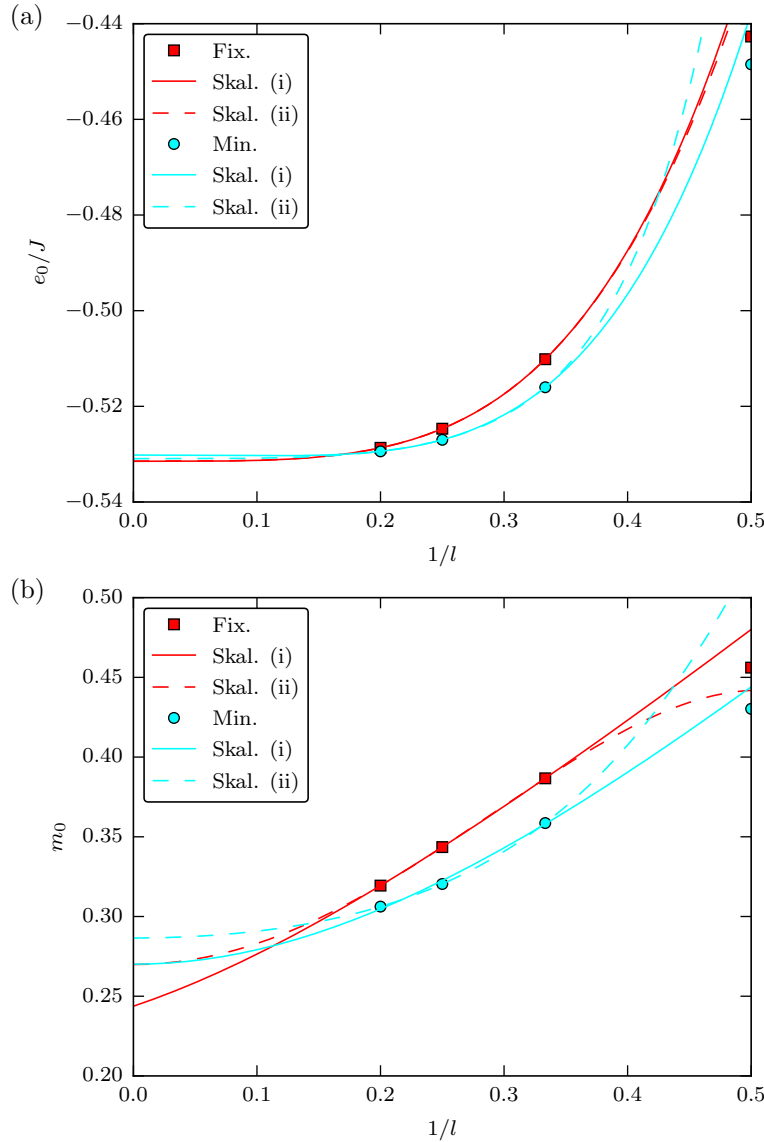


Abbildung B.32: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 0.95$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 . Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

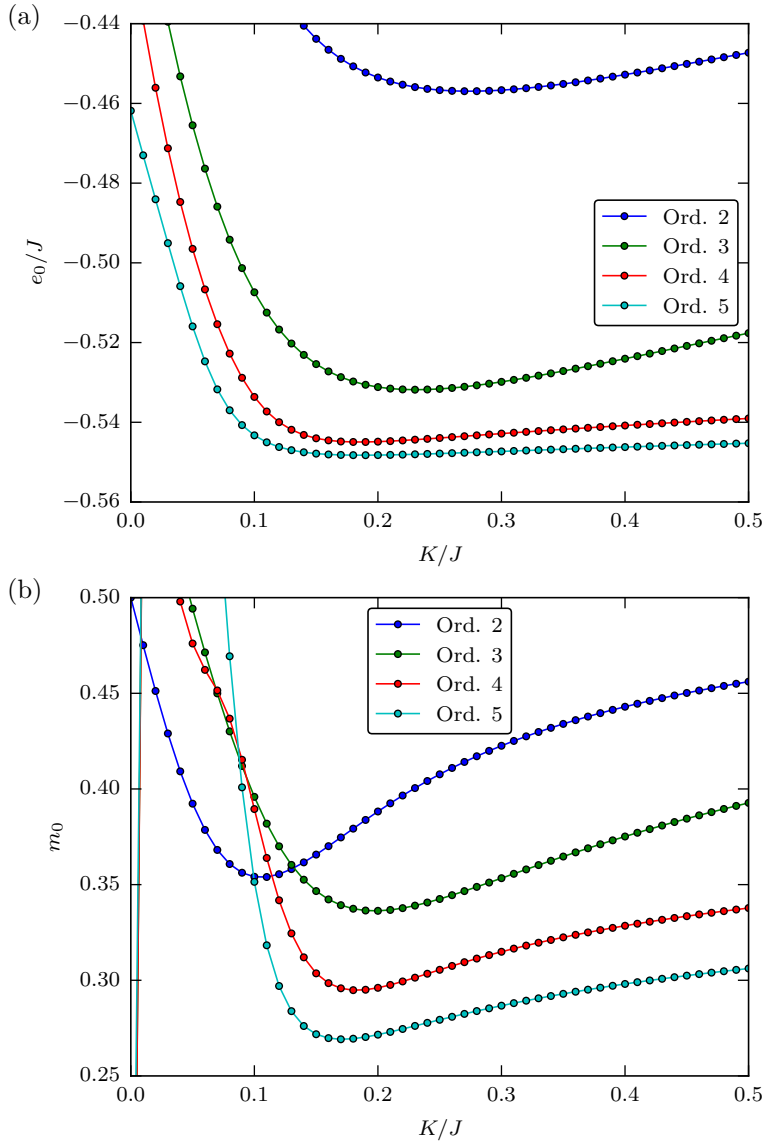


Abbildung B.33: Durch die Quadratentwicklung mit Randfeldern bestimmte (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierende Untergittermagnetisierung m_0 in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für $\lambda = 1$ des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter. Die farbigen Linien zwischen den Punkten sind Hilfslinien.

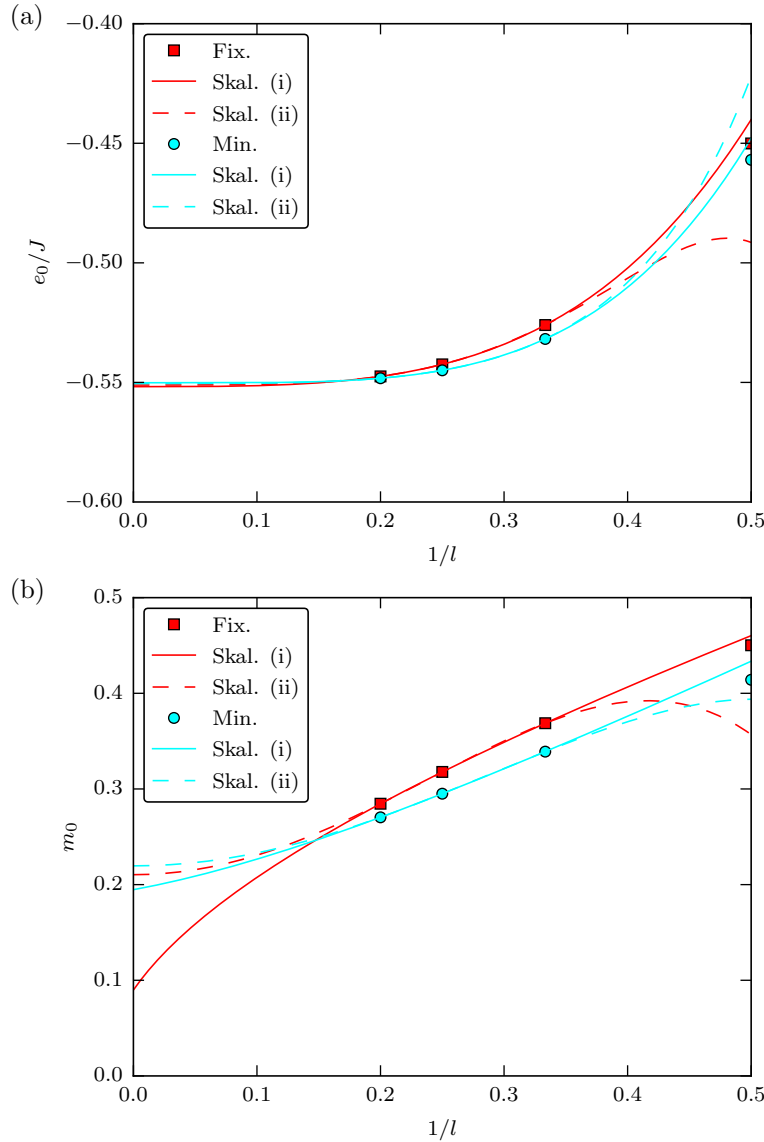
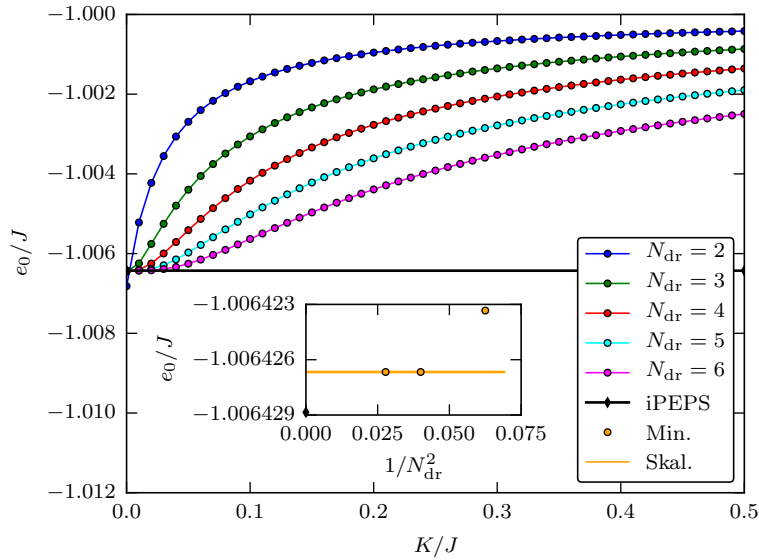


Abbildung B.34: Skalierung der mittels Quadratentwicklung ermittelten (a) Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e_0/J und (b) dazu korrespondierenden Untergittermagnetisierung m_0 des Spin-1/2 XXZ-Modells auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von $1/l$ für $\lambda = 1$. Rote Quadrate und cyanfarbene Kreise repräsentieren die mit der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode bestimmten Werte für e_0/J sowie m_0 . Die roten und cyanfarbenen Linien gehören zu den entsprechenden Skalierungen durch Ordnung 3 und 5 der Fixpunkt- bzw. Minimumsmethode. Durchgezogene Linien sind dabei Skalierungen vom Typ (i), während gestrichelte Linien von Typ (ii) sind.

B.4 Spin-1 Heisenbergmodell auf dem Kagomegitter

(a) $\lambda = 0.1$



(b) $\lambda = 0.3$

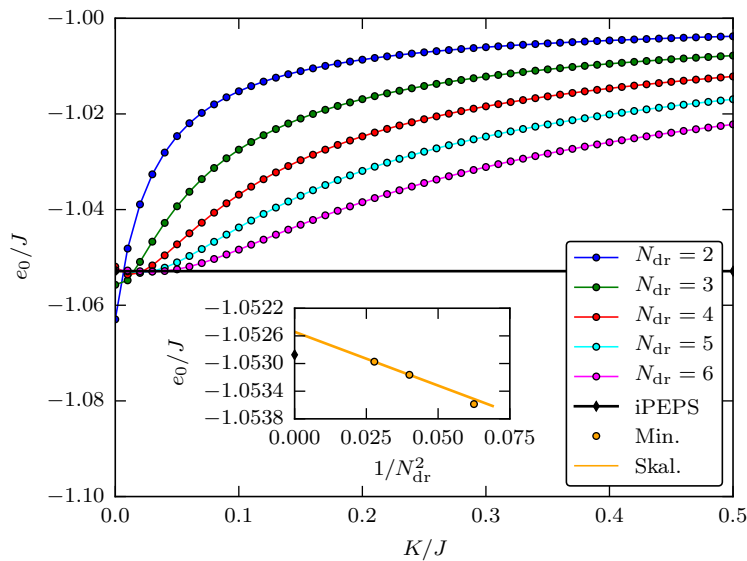


Abbildung B.35: Durch eine volle Graphenentwicklung mit Randfeldern bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{\text{dr}})}/J$ in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für (a) $\lambda = 0.1$ und (b) $\lambda = 0.3$. Die horizontale schwarze Linie ist der iPEPS-Wert [70]. Die farbigen Linien sind Hilfslinien. *Bildeinschub:* Minimale Energie in Abhängigkeit von $1/N_{\text{dr}}^2$ sowie lineare Skalierung (orangene Linie) durch Ordnung 5 und 6. Die schwarze Raute ist der iPEPS-Wert [70].

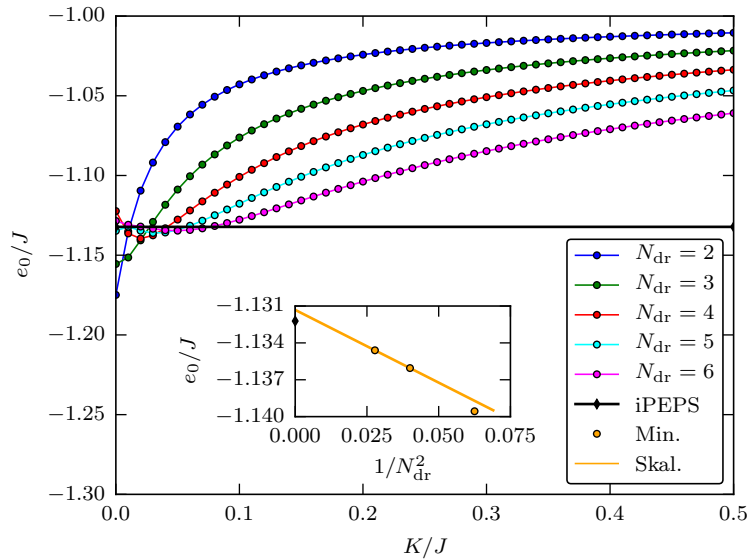
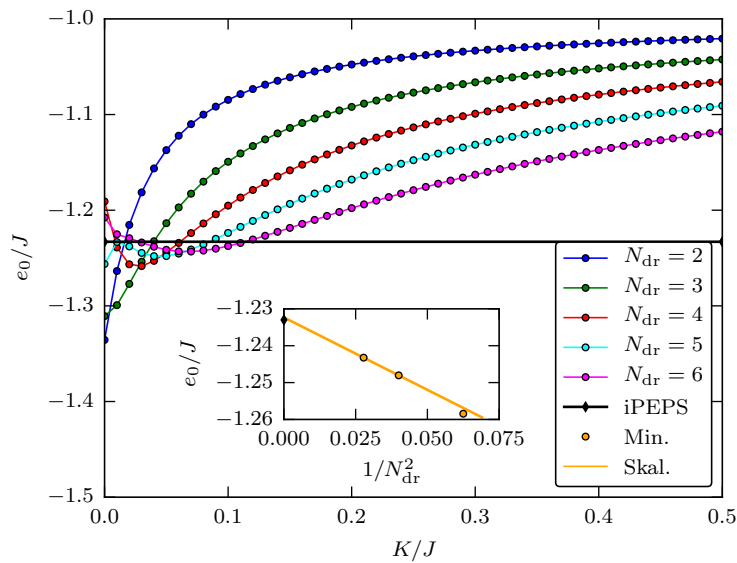
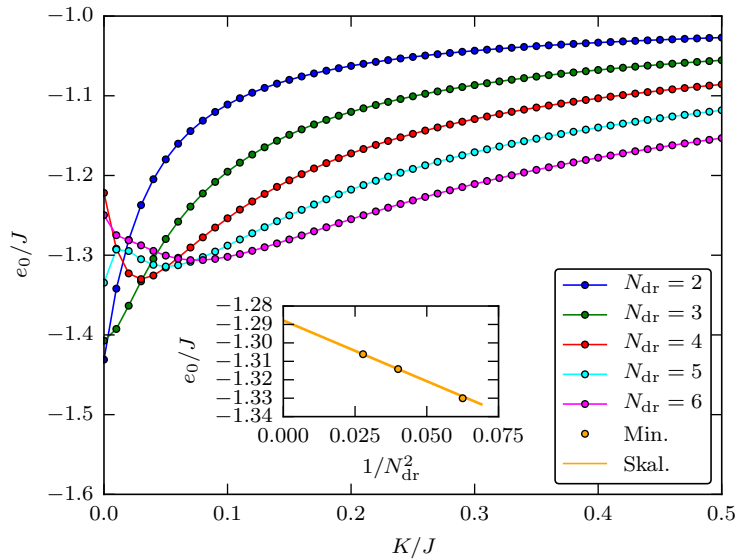
(a) $\lambda = 0.5$

 (b) $\lambda = 0.7$


Abbildung B.36: Durch eine volle Graphenentwicklung mit Randfeldern bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{\text{dr}})}/J$ in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für (a) $\lambda = 0.5$ und (b) $\lambda = 0.7$. Die horizontale schwarze Linie ist der iPEPS-Wert [70]. Die farbigen Linien sind Hilfslinien. *Bildeinschub:* Minimale Energie in Abhängigkeit von $1/N_{\text{dr}}^2$ sowie lineare Skalierung (orangene Linie) durch Ordnung 5 und 6. Die schwarze Raute ist der iPEPS-Wert [70].

(a) $\lambda = 0.8$



(b) $\lambda = 0.82$

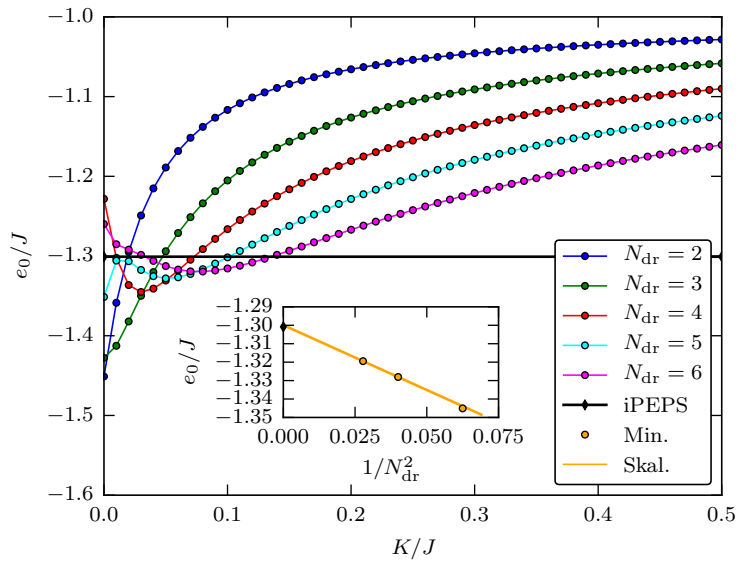


Abbildung B.37: Durch eine volle Graphenentwicklung mit Randfeldern bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{\text{dr}})}/J$ in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für (a) $\lambda = 0.8$ und (b) $\lambda = 0.82$. Die horizontale schwarze Linie ist der iPEPS-Wert [70] (für $\lambda = 0.8$ ist kein direkter iPEPS-Wert vorhanden). Die farbigen Linien sind Hilfslinien. *Bildeinschub:* Minimale Energie in Abhängigkeit von $1/N_{\text{dr}}^2$ sowie lineare Skalierung (orangene Linie) durch Ordnung 5 und 6. Die schwarze Raute ist der iPEPS-Wert [70].

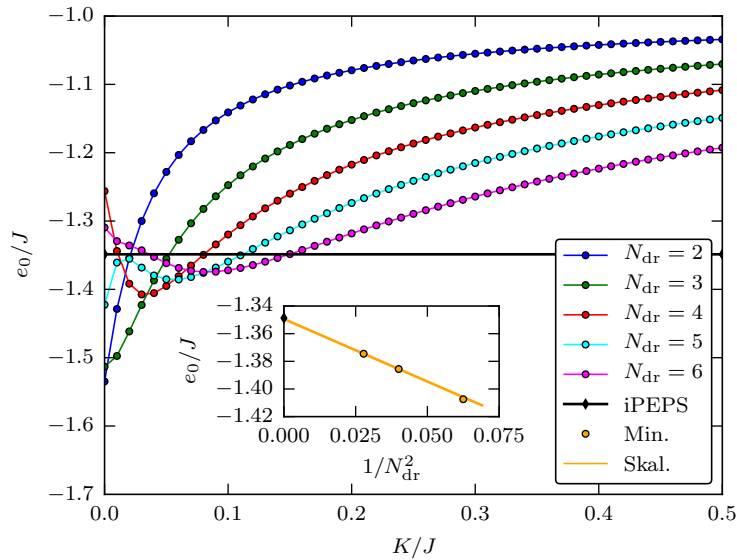
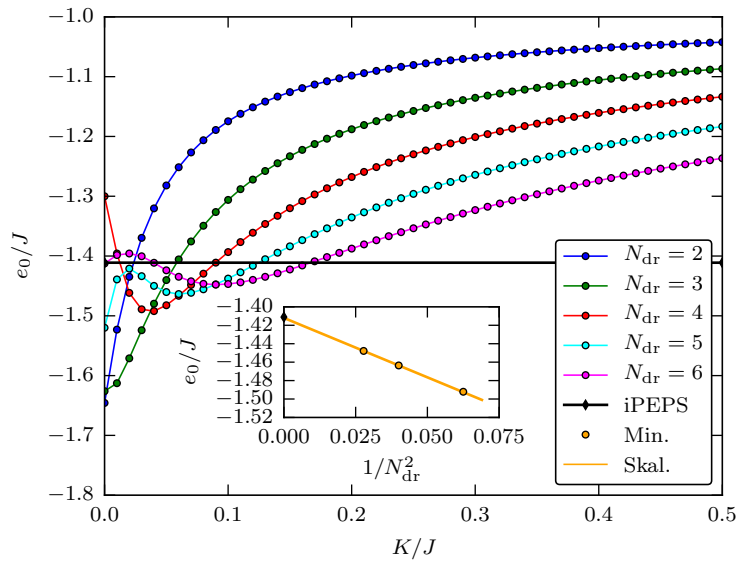
(a) $\lambda = 0.9$

 (b) $\lambda = 1.0$


Abbildung B.38: Durch eine volle Graphenentwicklung mit Randfeldern bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0^{(N_{\text{dr}})}/J$ in Abhängigkeit von der Randfeldstärke K/J für (a) $\lambda = 0.9$ und (b) $\lambda = 1.0$. Die horizontale schwarze Linie ist der iPEPS-Wert [70]. Die farbigen Linien sind Hilfslinien. *Bildeinschub:* Minimale Energie in Abhängigkeit von $1/N_{\text{dr}}^2$ sowie lineare Skalierung (orangene Linie) durch Ordnung 5 und 6. Die schwarze Raute ist der iPEPS-Wert [70].

Anhang C

Effektives Heisenbergmodell für die Spin-1 Dreieckskette im dimerisierten Limes

Betrachtet werden soll ein Dimer und die beiden von diesem ausgehenden Kopplungen zu den Spitzen der Dreiecke (siehe Abbildung C.1). Die beiden Spins an den Positionen 0 und 1 sollen nun ein Singulett

$$|s\rangle := \frac{1}{\sqrt{3}} (|1, -1\rangle - |0,0\rangle + |-1,1\rangle) \quad (\text{C.1})$$

bilden, wobei $|s_0, s_1\rangle$ die S^z -Komponente $s_i \in \{-1, 0, +1\}$ der beiden Spins bezeichnet. Dadurch ergibt sich der Gesamtzustand

$$|s, s_2, s_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1, -1, s_2, s_3\rangle - |0, 0, s_2, s_3\rangle + |-1, 1, s_2, s_3\rangle) . \quad (\text{C.2})$$

Die Störung des Hamiltonoperators (5.35) wirkt nun auf die J -Bonds und wird, damit direkt der verbundene Beitrag zweiter Ordnung extrahiert werden kann, durch zwei Parameter J_1 und J_2 als

$$V = J_1 \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_2 + J_2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 \quad (\text{C.3})$$

geschrieben. Der ungestörte Anteil ist dann durch

$$H_0 = J' \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (\text{C.4})$$

gegeben.

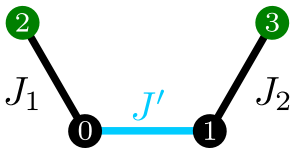


Abbildung C.1: Relevanter Graph für die Ableitung des effektiven Heisenbergmodells der Spin-1 Dreieckskette um die Dimerphase $J/J' \ll 1$. Die beiden Spins an den Positionen 0 und 1 bilden ein Singulett.

Als Erstes wird die Wirkung von V auf den Zustand $|s, s_2, s_3\rangle$ bestimmt. Um den Ausdruck übersichtlich zu halten, wird für die Zustände implizit angenommen, dass Zustände, bei denen $s_i + \alpha$ vorkommt, wegfallen, wenn $s_i + \alpha < -1$ oder $s_i + \alpha > 1$ ist. Dadurch ergibt sich

$$\begin{aligned}
 V |S, s_2, s_3\rangle = & \frac{J_1}{\sqrt{3}} (|0, -1, s_2 + 1, s_3\rangle - |1, 0, s_2 - 1, s_3\rangle - |-1, 0, s_2 + 1, s_3\rangle \\
 & + |0, 1, s_2 - 1, s_3\rangle + s_2 |1, -1, s_2, s_3\rangle - s_2 |-1, 1, s_2, s_3\rangle \\
 & + \frac{J_2}{\sqrt{3}} (|1, 0, s_2, s_3 - 1\rangle - |0, 1, s_2, s_3 - 1\rangle - |0, -1, s_2, s_3 + 1\rangle \\
 & + |-1, 0, s_2, s_3 + 1\rangle - s_3 |1, -1, s_2, s_3\rangle + s_3 |-1, 1, s_2, s_3\rangle) .
 \end{aligned} \tag{C.5}$$

Es lässt sich leicht sehen, dass das Matrixelement

$$\langle s, s'_2, s'_3 | V | s, s_2, s_3 \rangle = 0 \tag{C.6}$$

ergibt. Demzufolge verschwindet der Beitrag in erster Ordnung Störungstheorie. Für die zweite Ordnung wird gemäß entarteter Störungstheorie (siehe beispielsweise Referenz 33) der Ausdruck

$$\langle s, s'_2, s'_3 | P V S V P | s, s_2, s_3 \rangle \tag{C.7}$$

berechnet, wobei P der Projektor auf den entarteten Unterraum – also die Zustände $|s, s_2, s_3\rangle$ – und

$$S = \frac{1 - P}{E_0 - H_0} \tag{C.8}$$

ist. Um den Nenner $E_0 - H_0$ auswerten zu können, müssen die Zustände wieder in die Gesamtspin-Basis der Spins an den Positionen 0 und 1 umgeschrieben werden. Eine weitere Anwendung von V und P liefert dann nach einer etwas längeren Rechnung und Beschrän-

kung auf die Beiträge die proportional zu $J_1 J_2$ sind, die folgenden Matrixelemente

$$\langle s, -1, -1 | PVSV P | s, -1, -1 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.9})$$

$$\langle s, -1, 0 | PVSV P | s, -1, 0 \rangle = 0 \quad (\text{C.10})$$

$$\langle s, 0, -1 | PVSV P | s, -1, 0 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.11})$$

$$\langle s, -1, 1 | PVSV P | s, -1, 1 \rangle = -\frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.12})$$

$$\langle s, 0, 0 | PVSV P | s, -1, 1 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.13})$$

$$\langle s, 1, -1 | PVSV P | s, -1, 1 \rangle = 0 \quad (\text{C.14})$$

$$\langle s, -1, 0 | PVSV P | s, 0, -1 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.15})$$

$$\langle s, 0, -1 | PVSV P | s, 0, -1 \rangle = 0 \quad (\text{C.16})$$

$$\langle s, -1, 1 | PVSV P | s, 0, 0 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.17})$$

$$\langle s, 0, 0 | PVSV P | s, 0, 0 \rangle = 0 \quad (\text{C.18})$$

$$\langle s, 1, -1 | PVSV P | s, 0, 0 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.19})$$

$$\langle s, 0, 1 | PVSV P | s, 0, 1 \rangle = 0 \quad (\text{C.20})$$

$$\langle s, 1, 0 | PVSV P | s, 0, 1 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.21})$$

$$\langle s, -1, 1 | PVSV P | s, 1, -1 \rangle = 0 \quad (\text{C.22})$$

$$\langle s, 0, 0 | PVSV P | s, 1, -1 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.23})$$

$$\langle s, 1, -1 | PVSV P | s, 1, -1 \rangle = -\frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.24})$$

$$\langle s, 0, 1 | PVSV P | s, 1, 0 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.25})$$

$$\langle s, 1, 0 | PVSV P | s, 1, 0 \rangle = 0 \quad (\text{C.26})$$

$$\langle s, 1, 1 | PVSV P | s, 1, 1 \rangle = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} \quad (\text{C.27})$$

wobei die Matrixelemente, welche aufgrund der S^z -Erhaltung nicht auftreten können, weggelassen wurden. Werden nun die Matrixelemente

$$\langle s'_2, s'_3 | H_{\text{eff}} | s_2, s_3 \rangle \quad (\text{C.28})$$

des Hamiltonoperators

$$H_{\text{eff}} = E_{0,\text{eff}} + J_{\text{eff}} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (\text{C.29})$$

ausgerechnet und mit den Matrixelementen $\langle s, s'_2, s'_3 | PVSV P | s, s_2, s_3 \rangle$ verglichen, so ergibt

sich

$$J_{\text{eff}} = \frac{4}{3} \frac{J_1 J_2}{J'} . \quad (\text{C.30})$$

Durch Gleichsetzen von $J_1 = J_2 = J$ folgt dann die effektive antiferromagnetische Heisenbergkopplung zwischen den Spins an der Spitze der Dreiecke:

$$J_{\text{eff}} = \frac{4}{3} \frac{J^2}{J'} . \quad (\text{C.31})$$

Literaturverzeichnis

- [1] M. N. BAIBICH, J. M. BROTO, A. FERT, F. N. VAN DAU, F. PETROFF, P. ETIENNE, G. CREUZET, A. FRIEDERICH, J. CHAZELAS. *Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices*. Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).
- [2] G. BINASCH, P. GRÜNBERG, F. SAURENBACH, W. ZINN. *Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange*. Phys. Rev. B **39**, 4828 (1989).
- [3] L. D. LANDAU. *Theory of phase transformations. I*. Phys. Z. Sowjetunion **11**, 26 (1937).
- [4] L. D. LANDAU. *Theory of phase transformations. II*. Phys. Z. Sowjetunion **11**, 545 (1937).
- [5] P. W. ANDERSON. *Resonating valence bonds: A new kind of insulator?* Materials Research Bulletin **8**, 153 (1973).
- [6] L. BALENTS. *Spin liquids in frustrated magnets*. Nature **464**, 7286, 199 (2010).
- [7] D. J. THOULESS, M. KOHMOTO, M. P. NIGHTINGALE, M. DEN NIJS. *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*. Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
- [8] X.-G. WEN. *Topological orders and edge excitations in fractional quantum Hall states*. Advances in Physics **44**, 405 (1995).
- [9] M. Z. HASAN, C. L. KANE. *Colloquium : Topological insulators*. Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
- [10] B. A. BERNEVIG, T. L. HUGHES. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press (2013).
- [11] K. V. KLITZING, G. DORDA, M. PEPPER. *New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance*. Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
- [12] D. C. TSUI, H. L. STORMER, A. C. GOSSARD. *Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit*. Phys. Rev. Lett. **48**, 1559 (1982).
- [13] R. B. LAUGHLIN. *Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations*. Phys. Rev. Lett. **50**, 1395 (1983).
- [14] C. L. KANE, E. J. MELE. *Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect*. Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).

- [15] C. L. KANE, E. J. MELE. *Quantum Spin Hall Effect in Graphene*. Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).
- [16] J. E. MOORE, L. BALENTS. *Topological invariants of time-reversal-invariant band structures*. Phys. Rev. B **75**, 121306 (2007).
- [17] B. A. BERNEVIG, T. L. HUGHES, S.-C. ZHANG. *Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*. Science **314**, 1757 (2006).
- [18] M. KÖNIG, S. WIEDMANN, C. BRÜNE, A. ROTH, H. BUHMANN, L. W. MOLENKAMP, X.-L. QI, S.-C. ZHANG. *Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*. Science **318**, 766 (2007).
- [19] D. HSIEH, D. QIAN, L. WRAY, Y. XIA, Y. S. HOR, R. J. CAVA, M. Z. HASAN. *A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase*. Nature **452**, 970 (2008).
- [20] J. M. LEINAAS, J. MYRHEIM. *On the theory of identical particles*. Il Nuovo Cimento B (1971-1996) **37**, 1 (1977).
- [21] F. WILCZEK. *Quantum Mechanics of Fractional-Spin Particles*. Phys. Rev. Lett. **49**, 957 (1982).
- [22] C. NAYAK, S. H. SIMON, A. STERN, M. FREEDMAN, S. DAS SARMA. *Non-Abelian anyons and topological quantum computation*. Rev. Mod. Phys. **80**, 1083 (2008).
- [23] A. KITAEV. *Fault-tolerant quantum computation by anyons*. Annals of Physics **303**, 2 (2003).
- [24] A. KITAEV. *Anyons in an exactly solved model and beyond*. Annals of Physics **321**, 2 (2006).
- [25] H. YAO, S. A. KIVELSON. *Exact Chiral Spin Liquid with Non-Abelian Anyons*. Phys. Rev. Lett. **99**, 247203 (2007).
- [26] P. FAZEKAS, P. W. ANDERSON. *On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet*. Philosophical Magazine **30**, 423 (1974).
- [27] C. LACROIX, P. MENDELS, F. MILA (Hg.). *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2011).
- [28] J. HUBBARD. *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences **276**, 1365, 238 (1963).
- [29] J. G. BEDNORZ, K. A. MÜLLER. *Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter **64**, 189 (1986).
- [30] E. DAGOTTO. *Correlated electrons in high-temperature superconductors*. Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [31] A. GEORGES, G. KOTLIAR, W. KRAUTH, M. J. ROZENBERG. *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*. Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

-
- [32] D. J. KLEIN, W. A. SEITZ. *Perturbation Expansion of the Linear Hubbard Model*. Phys. Rev. B **8**, 2236 (1973).
- [33] M. TAKAHASHI. *Half-filled Hubbard model at low temperature*. Journal of Physics C: Solid State Physics **10**, 1289 (1977).
- [34] A. H. MACDONALD, S. M. GIRVIN, D. YOSHIOKA. $\frac{t}{U}$ expansion for the Hubbard model. Phys. Rev. B **37**, 9753 (1988).
- [35] MÜLLER-HARTMANN, E., REISCHL, A. *Derivation of effective spin models from a three band model for CuO₂-planes*. Eur. Phys. J. B **28**, 173 (2002).
- [36] A. REISCHL, E. MÜLLER-HARTMANN, G. S. UHRIG. *Systematic mapping of the Hubbard model to the generalized t-J model*. Phys. Rev. B **70**, 245124 (2004).
- [37] S. A. HAMERLA, S. DUFFE, G. S. UHRIG. *Derivation of the t-J model for finite doping*. Phys. Rev. B **82**, 235117 (2010).
- [38] H.-Y. YANG, A. M. LÄUCHLI, F. MILA, K. P. SCHMIDT. *Effective Spin Model for the Spin-Liquid Phase of the Hubbard Model on the Triangular Lattice*. Phys. Rev. Lett. **105**, 267204 (2010).
- [39] H.-Y. YANG, A. ALBUQUERQUE, S. CAPPONI, A. M. LÄUCHLI, K. P. SCHMIDT. *Effective spin couplings in the Mott insulator of the honeycomb lattice Hubbard model*. New Journal of Physics **14**, 115027 (2012).
- [40] D. IXERT, F. F. ASSAAD, K. P. SCHMIDT. *Mott physics in the half-filled Hubbard model on a family of vortex-full square lattices*. Phys. Rev. B **90**, 195133 (2014).
- [41] F. WEGNER. *Flow-equations for Hamiltonians*. Annalen der Physik **506**, 77 (1994).
- [42] S. D. GLĄZEK, K. G. WILSON. *Renormalization of Hamiltonians*. Phys. Rev. D **48**, 5863 (1993).
- [43] S. D. GLĄZEK, K. G. WILSON. *Perturbative renormalization group for Hamiltonians*. Phys. Rev. D **49**, 4214 (1994).
- [44] F. MILA, K. P. SCHMIDT. *Strong-Coupling Expansion and Effective Hamiltonians*. In C. LACROIX, P. MENDELS, F. MILA (Hg.), *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*, S. 537–562. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2011).
- [45] H. MORITA, S. WATANABE, M. IMADA. *Nonmagnetic Insulating States near the Mott Transitions on Lattices with Geometrical Frustration and Implications for κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃*. Journal of the Physical Society of Japan **71**, 2109 (2002).
- [46] O. I. MOTRUNICH. *Variational study of triangular lattice spin-1/2 model with ring exchanges and spin liquid state in κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃*. Phys. Rev. B **72**, 045105 (2005).
- [47] B. KYUNG, A.-M. S. TREMBLAY. *Mott Transition, Antiferromagnetism, and d-Wave Superconductivity in Two-Dimensional Organic Conductors*. Phys. Rev. Lett. **97**, 046402 (2006).

- [48] P. SAHEBSARA, D. SÉNÉCHAL. *Hubbard Model on the Triangular Lattice: Spiral Order and Spin Liquid*. Phys. Rev. Lett. **100**, 136402 (2008).
- [49] L. F. TOCCHIO, F. BECCA, A. PAROLA, S. SORELLA. *Role of backflow correlations for the nonmagnetic phase of the $t-t'$ Hubbard model*. Phys. Rev. B **78**, 041101 (2008).
- [50] T. YOSHIOKA, A. KOGA, N. KAWAKAMI. *Quantum Phase Transitions in the Hubbard Model on a Triangular Lattice*. Phys. Rev. Lett. **103**, 036401 (2009).
- [51] S. RACHEL, M. LAUBACH, J. REUTHER, R. THOMALE. *Quantum Paramagnet in a π Flux Triangular Lattice Hubbard Model*. Phys. Rev. Lett. **114**, 167201 (2015).
- [52] R. KANEKO, S. MORITA, M. IMADA. *Gapless Spin-Liquid Phase in an Extended Spin $1/2$ Triangular Heisenberg Model*. Journal of the Physical Society of Japan **83**, 093707 (2014).
- [53] Z. ZHU, S. R. WHITE. *Spin liquid phase of the $S = \frac{1}{2}$ $J_1 - J_2$ Heisenberg model on the triangular lattice*. Phys. Rev. B **92**, 041105 (2015).
- [54] S. N. SAADATMAND, B. J. POWELL, I. P. MCCULLOCH. *Phase diagram of the spin $-\frac{1}{2}$ triangular $J_1 - J_2$ Heisenberg model on a three-leg cylinder*. Phys. Rev. B **91**, 245119 (2015).
- [55] W.-J. HU, S.-S. GONG, W. ZHU, D. N. SHENG. *Competing spin-liquid states in the spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg model on the triangular lattice*. Phys. Rev. B **92**, 140403 (2015).
- [56] Y. IQBAL, W.-J. HU, R. THOMALE, D. POILBLANC, F. BECCA. *Spin liquid nature in the Heisenberg $J_1 - J_2$ triangular antiferromagnet*. Phys. Rev. B **93**, 144411 (2016).
- [57] A. WIETEK, A. M. LÄUCHLI. *Chiral Spin Liquid and Quantum Criticality in Extended $S = 1/2$ Heisenberg Models on the Triangular Lattice*. ArXiv e-prints (2016). 1604.07829.
- [58] S. YAN, D. A. HUSE, S. R. WHITE. *Spin-Liquid Ground State of the $S = 1/2$ Kagome Heisenberg Antiferromagnet*. Science **332**, 1173 (2011).
- [59] S. DEPENBROCK, I. P. MCCULLOCH, U. SCHOLLWÖCK. *Nature of the Spin-Liquid Ground State of the $S = 1/2$ Heisenberg Model on the Kagome Lattice*. Phys. Rev. Lett. **109**, 067201 (2012).
- [60] S.-S. GONG, W. ZHU, D. N. SHENG. *Emergent Chiral Spin Liquid: Fractional Quantum Hall Effect in a Kagome Heisenberg Model*. Scientific Reports **4**, 6317 (2014).
- [61] B. BAUER, L. CINCIO, B. P. KELLER, M. DOLFI, G. VIDAL, S. TREBST, A. W. W. LUDWIG. *Chiral spin liquid and emergent anyons in a Kagome lattice Mott insulator*. Nat. Commun. **5**, 5137 (2014).
- [62] A. WIETEK, A. STERDYNIAK, A. M. LÄUCHLI. *Nature of chiral spin liquids on the kagome lattice*. Phys. Rev. B **92**, 125122 (2015).
- [63] Y.-C. HE, D. N. SHENG, Y. CHEN. *Chiral Spin Liquid in a Frustrated Anisotropic Kagome Heisenberg Model*. Phys. Rev. Lett. **112**, 137202 (2014).

-
- [64] W. HEISENBERG. *Zur Theorie des Ferromagnetismus*. Zeitschrift für Physik **49**, 619 (1928).
- [65] B. BERNU, C. LHUILLIER, L. PIERRE. *Signature of Néel order in exact spectra of quantum antiferromagnets on finite lattices*. Phys. Rev. Lett. **69**, 2590 (1992).
- [66] B. BERNU, P. LECHEMINANT, C. LHUILLIER, L. PIERRE. *Exact spectra, spin susceptibilities, and order parameter of the quantum Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice*. Phys. Rev. B **50**, 10048 (1994).
- [67] L. CAPRIOTTI, A. E. TRUMPER, S. SORELLA. *Long-Range Néel Order in the Triangular Heisenberg Model*. Phys. Rev. Lett. **82**, 3899 (1999).
- [68] S. R. WHITE, A. L. CHERNYSHEV. *Néel Order in Square and Triangular Lattice Heisenberg Models*. Phys. Rev. Lett. **99**, 127004 (2007).
- [69] H. J. CHANGLANI, A. M. LÄUCHLI. *Trimerized ground state of the spin-1 Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice*. Phys. Rev. B **91**, 100407 (2015).
- [70] W. LI, A. WEICHSELBAUM, J. VON DELFT, H.-H. TU. *Hexagon-singlet solid ansatz for the spin-1 kagome antiferromagnet*. Phys. Rev. B **91**, 224414 (2015).
- [71] T. LIU, W. LI, A. WEICHSELBAUM, J. VON DELFT, G. SU. *Simplex valence-bond crystal in the spin-1 kagome Heisenberg antiferromagnet*. Phys. Rev. B **91**, 060403 (2015).
- [72] P. GHOSH, A. K. VERMA, B. KUMAR. *Plaquette-triplon analysis of magnetic disorder and order in a trimerized spin-1 kagome Heisenberg antiferromagnet*. Phys. Rev. B **93**, 014427 (2016).
- [73] J. OITMAA, R. R. P. SINGH. *Competing orders in spin-1 and spin- $\frac{3}{2}$ XXZ kagome antiferromagnets: A series expansion study*. Phys. Rev. B **93**, 014424 (2016).
- [74] D. IXERT, T. TISCHLER, K. P. SCHMIDT. *Nonperturbative linked-cluster expansions for the trimerized ground state of the spin-one kagome Heisenberg model*. Phys. Rev. B **92**, 174422 (2015).
- [75] O. GÖTZE, D. J. J. FARNELL, R. F. BISHOP, P. H. Y. LI, J. RICHTER. *Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice with arbitrary spin: A higher-order coupled cluster treatment*. Phys. Rev. B **84**, 224428 (2011).
- [76] D. A. HUSE, A. D. RUTENBERG. *Classical antiferromagnets on the Kagomé lattice*. Phys. Rev. B **45**, 7536 (1992).
- [77] C. L. HENLEY. *Long-range order in the classical kagome antiferromagnet: Effective Hamiltonian approach*. Phys. Rev. B **80**, 180401 (2009).
- [78] T. JOLICOEUR, E. DAGOTTO, E. GAGLIANO, S. BACCI. *Ground-state properties of the $S = 1/2$ Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice*. Phys. Rev. B **42**, 4800 (1990).
- [79] A. V. CHUBUKOV, T. JOLICOEUR. *Order-from-disorder phenomena in Heisenberg antiferromagnets on a triangular lattice*. Phys. Rev. B **46**, 11137 (1992).

- [80] P. LECHEMINANT, B. BERNU, C. LHUILLIER, L. PIERRE. *J_1 - J_2 quantum Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice: A group-symmetry analysis of order by disorder*. Phys. Rev. B **52**, 6647 (1995).
- [81] O. I. MOTRUNICH. *Orbital magnetic field effects in spin liquid with spinon Fermi sea: Possible application to κ -(ET) $_2$ Cu $_2$ (CN) $_3$* . Phys. Rev. B **73**, 155115 (2006).
- [82] M. HERMELE, V. GURARIE, A. M. REY. *Mott Insulators of Ultracold Fermionic Alkaline Earth Atoms: Underconstrained Magnetism and Chiral Spin Liquid*. Phys. Rev. Lett. **103**, 135301 (2009).
- [83] M. HERMELE, V. GURARIE. *Topological liquids and valence cluster states in two-dimensional $SU(N)$ magnets*. Phys. Rev. B **84**, 174441 (2011).
- [84] G. CHEN, K. R. A. HAZZARD, A. M. REY, M. HERMELE. *Synthetic-gauge-field stabilization of the chiral-spin-liquid phase*. Phys. Rev. A **93**, 061601 (2016).
- [85] P. NATAF, M. LAJKÓ, A. WIETEK, K. PENC, F. MILA, A. M. LÄUCHLI. *Chiral spin liquids in triangular lattice $SU(N)$ fermionic Mott insulators with artificial gauge fields*. ArXiv e-prints (2016). 1601.00958.
- [86] A. V. GORSHKOV, M. HERMELE, V. GURARIE, C. XU, P. S. JULIENNE, J. YE, P. ZOLLER, E. DEMLER, M. D. LUKIN, A. M. REY. *Two-orbital $SU(N)$ magnetism with ultracold alkaline-earth atoms*. Nat. Phys. **6**, 289 (2010).
- [87] F. SCAZZA, C. HOFRICHTER, M. HOFER, P. C. DE GROOT, I. BLOCH, S. FOLLING. *Observation of two-orbital spin-exchange interactions with ultracold $SU(N)$ -symmetric fermions*. Nat. Phys. **10**, 779 (2014).
- [88] G. PAGANO, M. MANCINI, G. CAPPELLINI, P. LOMBARDI, F. SCHAFER, H. HU, X.-J. LIU, J. CATANI, C. SIAS, M. INGUSCIO, L. FALLANI. *A one-dimensional liquid of fermions with tunable spin*. Nat. Phys. **10**, 198 (2014).
- [89] X. ZHANG, M. BISHOF, S. L. BROMLEY, C. V. KRAUS, M. S. SAFRONOVA, P. ZOLLER, A. M. REY, J. YE. *Spectroscopic observation of $SU(N)$ -symmetric interactions in Sr orbital magnetism*. Science **345**, 1467 (2014).
- [90] A. WEISSE, H. FEHSKE. *Exact Diagonalization Techniques*. In H. FEHSKE, R. SCHNEIDER, A. WEISSE (Hg.), *Computational Many-Particle Physics*, Bd. 739 von *Lecture Notes in Physics*, S. 529–544. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2008).
- [91] A. M. LÄUCHLI. *Numerical Simulations of Frustrated Systems*. In C. LACROIX, P. MENDELS, F. MILA (Hg.), *Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*, S. 481–511. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2011).
- [92] F. ASSAAD, H. EVERTZ. *World-line and Determinantal Quantum Monte Carlo Methods for Spins, Phonons and Electrons*, S. 277–356. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg (2008).
- [93] S. R. WHITE. *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).

-
- [94] S. R. WHITE. *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [95] F. VERSTRAETE, J. I. CIRAC. *Renormalization algorithms for Quantum-Many Body Systems in two and higher dimensions*. ArXiv e-prints (2004). cond-mat/0407066.
- [96] V. MURG, F. VERSTRAETE, J. I. CIRAC. *Variational study of hard-core bosons in a two-dimensional optical lattice using projected entangled pair states*. Phys. Rev. A **75**, 033605 (2007).
- [97] J. JORDAN, R. ORÚS, G. VIDAL, F. VERSTRAETE, J. I. CIRAC. *Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in Two Spatial Dimensions*. Phys. Rev. Lett. **101**, 250602 (2008).
- [98] J. JORDAN, R. ORÚS, G. VIDAL. *Numerical study of the hard-core Bose-Hubbard model on an infinite square lattice*. Phys. Rev. B **79**, 174515 (2009).
- [99] M. RIGOL, T. BRYANT, R. R. P. SINGH. *Numerical Linked-Cluster Approach to Quantum Lattice Models*. Phys. Rev. Lett. **97**, 187202 (2006).
- [100] M. RIGOL, T. BRYANT, R. R. P. SINGH. *Numerical linked-cluster algorithms. I. Spin systems on square, triangular, and kagomé lattices*. Phys. Rev. E **75**, 061118 (2007).
- [101] M. RIGOL, T. BRYANT, R. R. P. SINGH. *Numerical linked-cluster algorithms. II. t - J models on the square lattice*. Phys. Rev. E **75**, 061119 (2007).
- [102] B. TANG, E. KHATAMI, M. RIGOL. *A short introduction to numerical linked-cluster expansions*. Computer Physics Communications **184**, 557 (2013).
- [103] H. Y. YANG, K. P. SCHMIDT. *Effective models for gapped phases of strongly correlated quantum lattice models*. EPL (Europhysics Letters) **94**, 17004 (2011).
- [104] K. COESTER, S. CLEVER, F. HERBST, S. CAPPONI, K. P. SCHMIDT. *A generalized perspective on non-perturbative linked-cluster expansions*. EPL (Europhysics Letters) **110**, 20006 (2015).
- [105] C. DOMB, M. GREEN (Hg.). *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Bd. 3. Academic Press (1974).
- [106] J. OITMAA, C. J. HAMER, W. ZHENG. *Series expansion methods for strongly interacting lattice models*. Cambridge University Press (2006).
- [107] E. M. STOUDENMIRE, P. GUSTAINIS, R. JOHAL, S. WESSEL, R. G. MELKO. *Corner contribution to the entanglement entropy of strongly interacting $O(2)$ quantum critical systems in $2+1$ dimensions*. Phys. Rev. B **90**, 235106 (2014).
- [108] A. B. KALLIN, K. HYATT, R. R. P. SINGH, R. G. MELKO. *Entanglement at a Two-Dimensional Quantum Critical Point: A Numerical Linked-Cluster Expansion Study*. Phys. Rev. Lett. **110**, 135702 (2013).
- [109] D. IXERT, K. P. SCHMIDT. *Non-perturbative linked-cluster expansions in long-range ordered quantum systems*. ArXiv e-prints (2016). 1608.05618.

- [110] C.-C. CHANG, R. T. SCALETTAR. *Quantum Disordered Phase near the Mott Transition in the Staggered-Flux Hubbard Model on a Square Lattice*. Phys. Rev. Lett. **109**, 026404 (2012).
- [111] S. WENZEL, L. BOGACZ, W. JANKE. *Evidence for an Unconventional Universality Class from a Two-Dimensional Dimerized Quantum Heisenberg Model*. Phys. Rev. Lett. **101**, 127202 (2008).
- [112] C. KNETTER. *Störungstheorie mit Hilfe von Flußgleichungen angewendet auf dimerisierte Spinmodelle*. Diplomarbeit, Universität zu Köln (1999).
- [113] C. KNETTER, G. UHRIG. *Perturbation theory by flow equations: dimerized and frustrated $S = 1/2$ chain*. The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems **13**, 209 (2000).
- [114] C. KNETTER. *Perturbative Continuous Unitary Transformations: Spectral Properties of Low Dimensional Spin Systems*. Dissertation, Universität zu Köln (2003).
- [115] K. P. SCHMIDT, G. S. UHRIG. *Excitations in One-Dimensional $S = \frac{1}{2}$ Quantum Antiferromagnets*. Phys. Rev. Lett. **90**, 227204 (2003).
- [116] T. DE NEEF, I. G. ENTING. *Series expansions from the finite lattice method*. Journal of Physics A: Mathematical and General **10**, 801 (1977).
- [117] I. G. ENTING, R. J. BAXTER. *A special series expansion technique for the square lattice*. Journal of Physics A: Mathematical and General **10**, L117 (1977).
- [118] S. DUSUEL, M. KAMFOR, K. P. SCHMIDT, R. THOMALE, J. VIDAL. *Bound states in two-dimensional spin systems near the Ising limit: A quantum finite-lattice study*. Phys. Rev. B **81**, 064412 (2010).
- [119] C. LANCZOS. *An Iteration Method for the Solution of the Eigenvalue Problem of Linear Differential and Integral Operators*. J. Res. Nat. Bur. Stand. **45**, 255 (1950).
- [120] P. W. ANDERSON. *An Approximate Quantum Theory of the Antiferromagnetic Ground State*. Phys. Rev. **86**, 694 (1952).
- [121] T. JOLICOEUR, J. C. LE GUILLOU. *Spin-wave results for the triangular Heisenberg antiferromagnet*. Phys. Rev. B **40**, 2727 (1989).
- [122] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING, B. P. FLANNERY. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, New York, 3. Aufl. (2007).
- [123] A. MIELKE. *Flow equations for band-matrices*. The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems **5**, 605 (1998).
- [124] K. COESTER, K. P. SCHMIDT. *Optimizing linked-cluster expansions by white graphs*. Phys. Rev. E **92**, 022118 (2015).
- [125] D. KLAGGES. *Effektive Zweispinmodelle für Cluster-State-Hamilton-Operatoren*. Diplomarbeit, Technische Universität Dortmund (2011).

-
- [126] K. CÖSTER. *Quasiparticle pictures and graphs - from perturbative to non-perturbative linked-cluster expansions*. Dissertation, Technische Universität Dortmund (2015).
- [127] H. KRULL, N. A. DRESCHER, G. S. UHRIG. *Enhanced perturbative continuous unitary transformations*. Phys. Rev. B **86**, 125113 (2012).
- [128] T. FISCHER, S. DUFFE, G. S. UHRIG. *Adapted continuous unitary transformation to treat systems with quasi-particles of finite lifetime*. New Journal of Physics **12**, 033048 (2010).
- [129] N. A. DRESCHER, T. FISCHER, G. S. UHRIG. *Truncation errors in self-similar continuous unitary transformations*. The European Physical Journal B **79**, 225 (2011).
- [130] S. SAHIN, K. P. SCHMIDT, R. ORUS. *Entanglement Continuous Unitary Transformations*. ArXiv e-prints (2016). 1607.04645.
- [131] P. WYNN. *On a Device for Computing the $e_m(S_n)$ Transformation*. Math. Tables Other Aids Comput. **10**, 91 (1956).
- [132] A. J. GUTTMANN. *Asymptotic Analysis of Power-Series Expansions*, Bd. 13 von *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Kap. 1. Academic Press (1989).
- [133] P. R. GRAVES-MORRIS (Hg.). *Padé Approximants*. The Institute of Physics London and Bristol (1973).
- [134] K. CÖSTER, K. P. SCHMIDT. *Extracting critical exponents for sequences of numerical data via series extrapolation techniques*. Phys. Rev. E **94**, 022101 (2016).
- [135] A. WEISSE. *Divide and conquer the Hilbert space of translation-symmetric spin systems*. Phys. Rev. E **87**, 043305 (2013).
- [136] H. Q. LIN. *Exact diagonalization of quantum-spin models*. Phys. Rev. B **42**, 6561 (1990).
- [137] J. SCHULENBURG. *SPINPACK*. <https://www-e.uni-magdeburg.de/jschulen/spin/>.
- [138] D. IXERT. *Effektive Niederenergiebeschreibung der Mottphase zweidimensionaler Hubbardmodelle*. Masterarbeit, Technische Universität Dortmund (2013).
- [139] J. E. HIRSCH. *Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study*. Phys. Rev. B **31**, 4403 (1985).
- [140] J. E. HIRSCH, S. TANG. *Antiferromagnetism in the Two-Dimensional Hubbard Model*. Phys. Rev. Lett. **62**, 591 (1989).
- [141] S. R. WHITE, D. J. SCALAPINO, R. L. SUGAR, E. Y. LOH, J. E. GUBERNATIS, R. T. SCALETTAR. *Numerical study of the two-dimensional Hubbard model*. Phys. Rev. B **40**, 506 (1989).
- [142] A. AUERBACH. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Graduate Texts in Contemporary Physics. Springer-Verlag New York, 1. Aufl. (1994).

- [143] A. BÖHM. *Quantum Mechanics: Foundations and Applications*. Springer-Verlag New York, 3. Aufl. (1993).
- [144] R. SCHNALLE, J. SCHNACK. *Calculating the energy spectra of magnetic molecules: application of real- and spin-space symmetries*. International Reviews in Physical Chemistry **29**, 403 (2010).
- [145] G. H. GOLUB, C. F. VAN LOAN. *Matrix Computations*. The John Hopkins University Press, 3. Aufl. (1996).
- [146] M. CAMPOSTRINI, M. HASENBUSCH, A. PELISSETTO, P. ROSSI, E. VICARI. *Critical exponents and equation of state of the three-dimensional Heisenberg universality class*. Phys. Rev. B **65**, 144520 (2002).
- [147] Z. Y. MENG, T. C. LANG, S. WESSEL, F. F. ASSAAD, A. MURAMATSU. *Quantum spin liquid emerging in two-dimensional correlated Dirac fermions*. Nature **464**, 847 (2010).
- [148] S. SORELLA, Y. OTSUKA, S. YUNOKI. *Absence of a Spin Liquid Phase in the Hubbard Model on the Honeycomb Lattice*. Sci. Rep. **2**, 992 (2012).
- [149] F. F. ASSAAD, I. F. HERBUT. *Pinning the Order: The Nature of Quantum Criticality in the Hubbard Model on Honeycomb Lattice*. Phys. Rev. X **3**, 031010 (2013).
- [150] I. F. HERBUT. *Interactions and Phase Transitions on Graphene's Honeycomb Lattice*. Phys. Rev. Lett. **97**, 146401 (2006).
- [151] I. F. HERBUT, V. JURIČIĆ, B. ROY. *Theory of interacting electrons on the honeycomb lattice*. Phys. Rev. B **79**, 085116 (2009).
- [152] I. F. HERBUT, V. JURIČIĆ, O. VAPEK. *Relativistic Mott criticality in graphene*. Phys. Rev. B **80**, 075432 (2009).
- [153] F. F. ASSAAD, M. BERCX, M. HOHENADLER. *Topological Invariant and Quantum Spin Models from Magnetic π Fluxes in Correlated Topological Insulators*. Phys. Rev. X **3**, 011015 (2013).
- [154] E. H. LIEB. *Two theorems on the Hubbard model*. Phys. Rev. Lett. **62**, 1201 (1989).
- [155] K. KUBO, T. MOMOI. *Ground state of a spin system with two- and four-spin exchange interactions on the triangular lattice*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter **103**, 485 (1997).
- [156] D. IXERT. *Klassischer Limes und Spinwellentheorie für die Mottphase des Hubbardmodells auf dem Dreiecksgitter*. Bachelorarbeit, Technische Universität Dortmund (2010).
- [157] C. LHUILLIER. *Frustrated Quantum Magnets*. ArXiv e-prints (2005). cond-mat/0502464.
- [158] E. MANOUSAKIS. *The spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides*. Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991).

-
- [159] J. D. REGER, A. P. YOUNG. *Monte Carlo simulations of the spin-(1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice*. Phys. Rev. B **37**, 5978 (1988).
- [160] S. CHAKRAVARTY, B. I. HALPERIN, D. R. NELSON. *Two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnet at low temperatures*. Phys. Rev. B **39**, 2344 (1989).
- [161] A. B. KALLIN. *Computational Methods for the Measurement of Entanglement in Condensed Matter Systems*. Dissertation, University of Waterloo (2014).
- [162] S. CLEVER. *Beschreibung kollektiver Anregungen mittels graphenbasierter kontinuierlicher unitärer Transformationen in zwei Dimensionen*. Masterarbeit, Technische Universität Dortmund (2014).
- [163] A. W. SANDVIK. *Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional Heisenberg model*. Phys. Rev. B **56**, 11678 (1997).
- [164] S. E. KRÜGER, J. RICHTER, J. SCHULENBURG, D. J. J. FARNELL, R. F. BISHOP. *Quantum phase transitions of a square-lattice Heisenberg antiferromagnet with two kinds of nearest-neighbor bonds: A high-order coupled-cluster treatment*. Phys. Rev. B **61**, 14607 (2000).
- [165] R. F. BISHOP, D. J. J. FARNELL, S. E. KRÜGER, J. B. PARKINSON, J. RICHTER, C. ZENG. *High-order coupled cluster method calculations for the ground- and excited-state properties of the spin-half XXZ model*. Journal of Physics: Condensed Matter **12**, 6887 (2000).
- [166] P. H. Y. LI, R. F. BISHOP. *Magnetic order in spin-1 and spin-3/2 interpolating square-triangle Heisenberg antiferromagnets*. The European Physical Journal B **85**, 1 (2012).
- [167] P. H. Y. LI, R. F. BISHOP, C. E. CAMPBELL. *Quasiclassical magnetic order and its loss in a spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice with competing bonds*. Phys. Rev. B **91**, 014426 (2015).
- [168] J. B. PARKINSON, D. J. FARNELL. *An Introduction to Quantum Spin Systems*, Kap. 10, S. 109–134. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2010).
- [169] R. R. P. SINGH. *Thermodynamic parameters of the $T=0$, spin-1/2 square-lattice Heisenberg antiferromagnet*. Phys. Rev. B **39**, 9760 (1989).
- [170] Z. WEIHONG, J. OITMAA, C. J. HAMER. *Square-lattice Heisenberg antiferromagnet at $T=0$* . Phys. Rev. B **43**, 8321 (1991).
- [171] S. J. MIYAKE. *Spin-Wave Results for the Staggered Magnetization of Triangular Heisenberg Antiferromagnet*. Journal of the Physical Society of Japan **61**, 983 (1992).
- [172] A. V. CHUBUKOV, S. SACHDEV, T. SENTHIL. *Large- S expansion for quantum antiferromagnets on a triangular lattice*. Journal of Physics: Condensed Matter **6**, 8891 (1994).
- [173] A. L. CHERNYSHEV, M. E. ZHITOMIRSKY. *Spin waves in a triangular lattice antiferromagnet: Decays, spectrum renormalization, and singularities*. Phys. Rev. B **79**, 144416 (2009).

- [174] W. ZHENG, J. O. FJÆRESTAD, R. R. P. SINGH, R. H. MCKENZIE, R. COLDEA. *Excitation spectra of the spin- $\frac{1}{2}$ triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet.* Phys. Rev. B **74**, 224420 (2006).
- [175] F. HALDANE. *Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the $O(3)$ nonlinear sigma model.* Physics Letters A **93**, 464 (1983).
- [176] F. D. M. HALDANE. *Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State.* Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [177] E. BERG, E. G. DALLA TORRE, T. GIAMARCHI, E. ALTMAN. *Rise and fall of hidden string order of lattice bosons.* Phys. Rev. B **77**, 245119 (2008).
- [178] Z.-C. GU, X.-G. WEN. *Tensor-entanglement-filtering renormalization approach and symmetry-protected topological order.* Phys. Rev. B **80**, 155131 (2009).
- [179] F. POLLMANN, E. BERG, A. M. TURNER, M. OSHIKAWA. *Symmetry protection of topological phases in one-dimensional quantum spin systems.* Phys. Rev. B **85**, 075125 (2012).
- [180] M. RIGOL. *Quantum Quenches in the Thermodynamic Limit.* Phys. Rev. Lett. **112**, 170601 (2014).
- [181] M. RIGOL. *Quantum quenches in the thermodynamic limit. II. Initial ground states.* Phys. Rev. E **90**, 031301 (2014).
- [182] W. MALITZ. *Quantum quenches in low-dimensional ordered quantum magnets in the thermodynamic limit.* Masterarbeit, Technische Universität Dortmund (2016).

Teilpublikationen

Teile dieser Doktorarbeit wurden bereits in den folgenden Referenzen publiziert:

- [40] D. IXERT, F. F. ASSAAD, K. P. SCHMIDT. *Mott physics in the half-filled Hubbard model on a family of vortex-full square lattices*. Phys. Rev. B **90**, 195133 (2014).
- [74] D. IXERT, T. TISCHLER, K. P. SCHMIDT. *Nonperturbative linked-cluster expansions for the trimerized ground state of the spin-one kagome Heisenberg model*. Phys. Rev. B **92**, 174422 (2015).
- [109] D. IXERT, K. P. SCHMIDT. *Non-perturbative linked-cluster expansions in long-range ordered quantum systems*. ArXiv e-prints (2016). 1608.05618.

Danksagung

Besonderer Dank geht an Prof. Dr. Kai P. Schmidt für die hervorragende Betreuung während meiner Promotionszeit. Die gemeinsamen physikalischen Diskussionen waren immer hilfreich und seine Begeisterung für die Thematik hat mich stets aufs Neue motiviert. Ich erlangte durch sein Engagement ein fundiertes Wissen über die theoretische Festkörperphysik und das selbstständige wissenschaftliche Arbeiten.

Prof. Dr. Götz S. Uhrig sei an dieser Stelle dafür gedankt, dass er das Zweitgutachten dieser Dissertation übernimmt. Insbesondere möchte ich Prof. Dr. Uhrig auch dafür danken, dass ich an seinem Lehrstuhl als wissenschaftlicher Mitarbeiter tätig sein durfte, wodurch diese Doktorarbeit erst möglich wurde.

Weiterhin spreche ich Prof. Dr. Joachim Stolze speziellen Dank dafür aus, dass er mich während des Studiums durch seine Vorlesungen begeistert hat und ich später als Übungsgruppenleiter diese Begeisterung an die Studierenden weitergeben konnte.

Für die Zusammenarbeit an einer unserer Publikationen und die Bereitstellung von QMC-Ergebnissen möchte ich Prof. Dr. Fakher F. Assaad danken.

Dank geht auch an alle Mitglieder der Arbeitsgruppe und des Lehrstuhls, vor allem Kris Cöster und meinen Bürokollegen, mit denen ich viele nützliche Gespräche geführt habe.

Abschließend danke ich noch meiner Mutter und meiner Freundin, welche mich während der letzten Jahre unterstützt haben.