

---

Optimum-Grundzustände quantenmechanischer  
Spin-Systeme in zwei und drei Dimensionen

---

Inaugural-Dissertation  
zur  
Erlangung des Doktorgrades  
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Universität zu Köln

vorgelegt von  
Marc André Ahrens  
aus Karlsruhe

Köln 2005

---

Berichterstatter: Prof. Dr. J. Zittartz  
Prof. Dr. E. Müller-Hartmann

Vorsitzender der Prüfungskommission: Prof. Dr. M. Abd-Elmeguid

Tag der mündlichen Prüfung: 28.11.2005

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Optimum-Grundzustände</b>	<b>9</b>
2.1. Allgemeine Theorie	9
2.1.1. Definition: Optimum-Grundzustand	9
2.1.2. Eigenschaften und Beispiele von Optimum-Grundzuständen	11
2.2. Symmetrien der lokalen Wechselwirkungen	12
<b>3. Vertex-Zustands-Modelle</b>	<b>17</b>
3.1. Matrix-Produkt-Grundzustände	17
3.2. Eigenschaften der Matrix-Produkt-Grundzustände	22
3.3. Vertex-Zustands-Modelle	28
3.4. Eigenschaften von Vertex-Zustands-Modellen	32
3.4.1. Das korrespondierende klassische Vertex-Modell	33
3.5. Entartung der Grundzustände	35
<b>4. Monte-Carlo-Simulationen</b>	<b>37</b>
4.1. Monte-Carlo-Integration	37
4.1.1. „simple sampling“	38
4.1.2. „importance sampling“	39
4.2. Metropolis-Algorithmus	41
4.2.1. Markov-Kette	41
4.2.2. Metropolis-Algorithmus	42
4.3. Phasenübergänge und Monte-Carlo-Simulationen	44
4.3.1. Die Methode des „Finite-size-scaling“	44
4.3.2. Phasenübergänge erster Ordnung in Monte-Carlo-Simulationen	46
4.4. Monte-Carlo-Simulation von Vertex-Modellen	50
4.4.1. Loop-Algorithmus	51
<b>5. Vertex-Zustands-Modelle auf unterschiedlichen Gittern</b>	<b>67</b>
5.1. Spin-2 auf dem Quadratgitter	67
5.1.1. 8-Vertex-Modell als Näherung	74
5.2. Spin-3 Modelle	79
5.2.1. Spin-3 auf dem kubischen Gitter	79
5.2.2. Spin-3 auf dem Hexagonalgitter	101
5.2.3. Spin-3 auf dem Dreiecksgitter	114

---

5.3. Spin-2 Modelle . . . . .	127
5.3.1. Spin-2 auf dem Hexagonalgitter: der schwache Anti-Ferromagnet . . . . .	127
5.3.2. Spin-2 auf dem Hexagonalgitter: der schwache Ferromagnet/ Fer- rimagnet . . . . .	137
<b>6. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>147</b>
6.1. Zusammenfassung . . . . .	147
6.2. Ausblick . . . . .	151
<b>A. Lokale Zwei-Spin-Zustände</b>	<b>153</b>
A.1. Lokale Zwei-Spin-Zustände für Spin-3 . . . . .	154
A.2. Lokale Zwei-Spin-Zustände für Spin-2 . . . . .	157
<b>B. Abhängigkeiten der Superpositionsparameter</b>	<b>159</b>
<b>C. Entartung der Grundzustände</b>	<b>161</b>
<b>Bibliography</b>	<b>163</b>

# 1. Einleitung

Quanten-Spin-Systeme bilden ein aktives und spannendes Feld physikalischer Forschung. Dabei ist das Interesse zurückzuführen auf ein reichhaltiges Auftreten unterschiedlichster Eigenschaften, wie zum Beispiel Magnetismus, Ordnung, Phasenübergänge, kritisches Verhalten. Dies gilt sowohl für die Experimentalphysik als auch für die theoretische Physik.

Exakt lösbare Modelle quantenmechanischer Systeme bilden hier wichtige Stützpfeiler in der Beschreibung dieser unterschiedlichen physikalischen Phänomene.

Näherungsmethoden, wie zum Beispiel Reihenentwicklungen nach Potenzen geeigneter Variablen, Molekularfeld-Näherungen, dynamische Molekularfeld-Näherungen [Georges u. a. 1996] und kontinuierliche unitäre Transformationen [Wegner 1994] können im Einzelfall weitreichende Aussagen über das betrachtete System treffen, unterliegen aber oft der Maßgabe, nur auf beschränkte Bereiche, etwa in der Umgebung eines Entwicklungspunktes, qualitativ gute Ergebnisse zu liefern. Auch sind die meisten Näherungsverfahren in der Nähe von Phasenübergängen wegen der auftretenden Singularitäten nicht anwendbar. Rechnungen der Renormierungsgruppe [Wilson 1971a, Wilson 1971b], die am Phasenübergangspunkt zweiter Ordnung angewendet werden können, kommen bei der Lösung der Renormierungsfluß-Gleichungen meist nicht ohne Näherungen aus. Andererseits ist es nicht immer möglich, eine Aussage über die Güte der Näherung zu erzielen. Variationsrechnungen könnten hier genannt werden.

Näherungsmethoden bergen oft die Gefahr, in den Ergebnissen der Rechnung Artefakte zu zeigen, die auf die Methode zurückzuführen sind. An solchen Punkten kann es dann schwer sein zu entscheiden, ob ein neuartiger physikalischer Effekt zu Tage tritt, oder ob die Näherung versagt. Hier sind exakte Resultate, die in geschlossener Form darstellbar sind, sehr nützlich.

Insbesondere sind exakte Lösungen nicht nur dann relevant, wenn sie für real existierende Systeme gefunden werden, sondern sie können auch als Paradigmen für Verhaltensweisen von Modellklassen angesehen werden.

Ein weiteres sehr mächtiges Werkzeug moderner (theoretischer) Physik ist der Bereich der Computerphysik. Viele Publikationen greifen auf Ergebnisse aus Computerberechnungen zurück, deren Genauigkeit der Vorhersagen oft eine beeindruckende Güte erreichen. Einfache, exakt lösbare Modelle dienen auch hier als Referenzgrößen für numerische Näherungsverfahren (zum Beispiel NRG [Wilson 1975] oder DMRG [White und Noack 1992]) ferner

für Computersimulationen (z.B. Monte-Carlo-Simulationen). Aber auch auf dem Computer erzielte Ergebnisse bedürfen der Verifikation durch exakte Lösungen.

In der vorliegenden Arbeit werden Spin-Systeme auf verschiedenen Gittern betrachtet. Jedem Gitterpunkt wird eine quantenmechanische Spin-Variable zugeschrieben. Die Spin-Systeme werden dabei von Hamilton-Operatoren  $\mathbf{H}$  beschrieben, die sich als Summe lokaler Hamilton-Operatoren  $\mathbf{h}_{ij}$  schreiben lassen. Die lokalen Operatoren  $\mathbf{h}_{ij}$  wirken nicht-trivial immer nur auf benachbarte Gitterplätze.

In dieser Arbeit werde ich mich auf quantenmechanische Spin-Modelle beschränken, deren Grundzustände exakt angegeben werden können. Das Anregungs-Spektrum dieser Modelle ist nicht exakt in geschlossener Form anzugeben. Daher sind die Ergebnisse dieser Arbeit nur für das Tieftemperaturverhalten dieser Systeme relevant. Da vor allem in Dimensionen  $D > 1$  nur wenige exakt lösbare Modelle bekannt sind, können die hier vorgestellten exakten Grundzustände in dem oben beschriebenen Zusammenhang dennoch einen wichtigen Beitrag leisten. Einige der untersuchten Modelle besitzen dabei zum Beispiel universelle kritische Exponenten in der Nähe eines Ising-artigen Phasenübergangs.

Konkret werde ich Spin-Systeme in zwei und drei Dimensionen vorstellen, die eine spezielle Struktur von Grundzuständen, sogenannte *Optimum-Grundzustände* (siehe Kapitel 2), aufweisen. Optimum-Grundzustände können in einer Dimension mit Hilfe von *Matrix-Produkt-Grundzuständen* ([Klümper u. a. 1992, Klümper u. a. 1991, Klümper u. a. 1993, Ahrens u. a. 2002], siehe auch Kapitel 3.1) und in beliebiger Dimension durch *Vertex-Zustands-Modelle* ([Niggemann u. a. 1997, Niggemann u. a. 2000, Ahrens u. a. 2005], siehe auch Kapitel 3.3) realisiert werden. Dabei lassen sich Optimum-Grundzustände auch in Hubbard-Modellen [de Boer und Schadschneider 1995] realisieren; zudem können auch stochastische Modelle wie der ASEP (asymmetric simple exclusion process) [Derrida u. a. 1993, Derrida 1998] stationäre Zustände in Form von Matrix-Produkt-Zuständen aufweisen.

Zur Berechnung physikalischer Größen und Erwartungswerte unterschiedlicher Operatoren werden die Vertex-Zustands-Modelle auf *korrespondierende klassische Vertex-Modelle* in *derselben* Dimension abgebildet (siehe Kapitel 3.4.1). Bei dieser Abbildung fließen keine Näherungen ein. Korrespondierende klassische Vertex-Modelle sind Vertex-Modelle mit Zustandsvariablen auf den Bonds. Für die in dieser Arbeit untersuchten Modelle sind analytische Lösungen nicht bekannt. Die Modelle habe ich daher auf dem Computer mittels Monte-Carlo-Simulationen (siehe Kapitel 4) in großen Parameterbereichen untersucht.

Die hier untersuchten Grundzustände werden dabei durch bis zu fünf kontinuierliche Parameter gesteuert und die Simulationen zeigen eine Vielzahl unterschiedlicher Eigenschaften der untersuchten Modelle auf. Besonders interessant erscheinen dabei die Modelle, die einen  $T = 0$ -Phasenübergang in Abhängigkeit von den Systemparametern zeigen.

In den letzten Jahren stieg das Interesse an Phasenübergängen bei  $T = 0$  [Sachdev 1999, Stewart 2001, Vojta 2003, Pfeleiderer 2005a, Pfeleiderer 2005b], die hier generell als Quantenphasenübergänge bezeichnet werden sollen (unabhängig von der Ordnung des Phasenübergangs). Die Abbildung 1.1 zeigt schematisch ein typisches Phasendiagramm, das einen quantenkritischen Punkt enthält. Für  $T = 0$  steuert ein nicht-thermischer Kontrollpa-

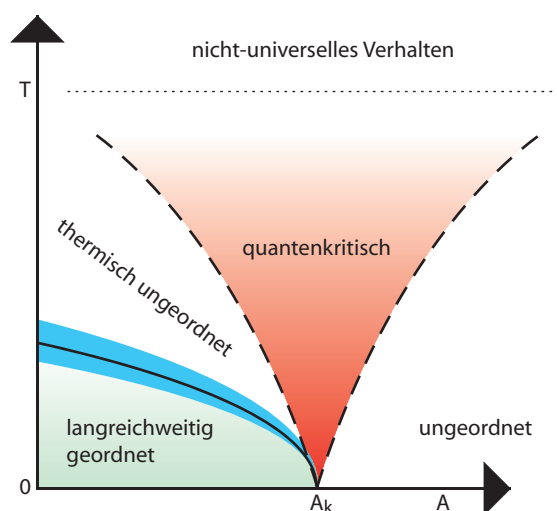


Abbildung 1.1.: Ein Phasenübergang bei  $T = 0$  hat auch in einem Bereich endlicher Temperaturen (roter Bereich) eine Wirkung.

parameter  $A$  das System von einer geordneten Phase über einen quantenkritischen Punkt bei  $A_c$  in eine ungeordnete Phase. Es besteht die Möglichkeit, dass auch bei endlichen Temperaturen eine geordnete Phase existiert (in Abb. 1.1 der grüne Bereich), die sich mit einem kritischen Bereich (blau) von der thermisch ungeordneten Phase abgrenzt. Ein geordneter Bereich bei endlichen Temperaturen ist nicht zwingend notwendig, wie das Beispiel des quantenmechanischen Ising-Modells in einer Dimension mit transversalem Magnetfeld zeigt, das *nur für*  $T = 0$  und entsprechend kleine Magnetfelder eine Ordnung aufweist<sup>1</sup>. Besonders interessant ist nun der Bereich endlicher Temperatur in einer Umgebung des quantenkritischen Punktes (roter Bereich). In diesem Bereich ist der Phasenübergangspunkt  $A_c$  auch noch für *endliche Temperaturen* spürbar. Der eingezeichnete quantenkritische Bereich selber ist durch ein Cross-over (gestrichelte Linien) von den anderen Bereichen abgetrennt. Hier zeigt das System anomales Verhalten in thermodynamischen Größen und in Transportgrößen. Das Verhalten unterscheidet sich von dem in den ungeordneten Bereichen. In diesem Sinne sind Quantenphasenübergänge auch für experimentelle Situationen  $T > 0$  interessant und relevant.

<sup>1</sup>Aufgrund der Abbildung auf ein zweidimensionales klassisches System (siehe Kapitel 4.4.1), befindet sich der hier beschriebene Quantenphasenübergang in der Universalitätsklasse des zweidimensionalen, klassischen Ising-Modells.

Bei den hier betrachteten Modellen tritt der  $T = 0$ -Phasenübergang in Zusammenhang mit dem Bruch einer entsprechenden diskreten Symmetrie auf. Damit schließt das Mermin-Wagner-Theorem<sup>2</sup> [Mermin und Wagner 1966] eine geordnete Phase bei endlichen Temperaturen nicht aus. Auch ist die untere kritische Dimension für Systeme diskreter Symmetrien mit  $D = 1$  kleiner als die der hier betrachteten Modelle. Insoweit mag eine magnetische Ordnung auch bei endlichen Temperaturen bei den hier betrachteten Modellen möglich sein und das vorgestellte Phasendiagramm in Abbildung 1.1 erscheint als möglich, wenn nicht sogar als generisch für die hier untersuchten Modelle.

In den meisten Fällen lässt sich ein  $D$ -dimensionales quantenmechanisches Modell auf ein  $D+z$ -dimensionales klassisches Modell abbilden, wobei  $z$  der kritische dynamische Exponent des quantenkritischen Punktes ist [Sachdev 1999] (Ausnahmen siehe [Vojta u. a. 2005]). Bei vielen interessanten  $D$ -dimensionalen, quantenmechanischen Modellen, mit dem dynamischen Exponenten  $z = 1$  ist der zu beobachtende Quantenphasenübergang eng mit dem Phasenübergang der entsprechenden  $D + 1$ -dimensionalen klassischen Modelle [Elliott u. a. 1970, Suzuki 1976a, Fradkin und Susskind 1978, Young 1975] verknüpft. Von diesem Standpunkt aus kann man Quantenphasenübergänge als thermische Phasenübergänge entsprechender klassischer Modelle verstehen. Es zeigt sich aber bei vielen Modellen, dass etwa der dynamische Exponent  $z \neq 1$  ist. In einem solchen Fall skalieren Korrelationen unterschiedlich in den Raumdimensionen und der imaginären Zeitdimension.

Bei den Modellen, die ich in dieser Arbeit untersucht habe, können Quantenphasenübergänge in Abhängigkeit nicht-thermischer Kontrollparameter auftreten. Je nach betrachtetem Modell und Parameterbereich sind die Übergänge erster oder zweiter Ordnung.

Quantenphasenübergänge zweiter Ordnung und damit auch die quantenkritischen Punkte stehen dabei schon seit längerem im Blickfeld der Forschung [Sachdev 1999]. In vielen Arbeiten über Hochtemperatursupraleiter [Vojta 2003], Instabilitäten in fermionischen Systemen [Senthil u. a. 2004, Senthil u. a. 2005, Flouquet] sowie Kritikalitäten antiferromagnetischer Systeme [Vishwanath u. a. 2004] und in anderen Bereichen spielen diese eine wichtige Rolle. Zunehmend interessant sind aber auch Quantenphasenübergänge erster Ordnung, da diese möglicherweise interessante neue Phänomene am Phasenübergangspunkt aufweisen [Pfleiderer 2005b].

Bei den hier betrachteten Modellen war es mir möglich, einen geeigneten Ordnungsparameter zu finden, der den jeweiligen Quantenphasenübergang beschreibt. Überdies konnte ich einige kritische Exponenten im Falle eines Phasenübergangs zweiter Ordnung bestimmen.

---

<sup>2</sup>Im Wesentlichen schließt das Mermin-Wagner-Theorem einen spontanen Symmetriebruch einer kontinuierlichen Symmetrie bei endlicher Temperatur und Dimensionen  $\leq 2$  aus.



## VBS-Zustände und die Haldane-Vermutung

Von einer anderen Perspektive aus lassen sich die hier untersuchten Modelle in die Klasse der *valence bond solid Modelle* (VBS-Modelle) [Affleck u. a. 1988] einordnen. Diese Modelle fußen dabei auf der Idee, einen Spin der Größe  $S$  mit Hilfe von  $2S$  Spin- $\frac{1}{2}$  und der anschließenden Symmetrisierung dieser  $2S$  Spins an einem Gitterplatz  $x$  zu erzeugen. Jeder der  $2S$  Spin- $\frac{1}{2}$  wechselwirkt mit einem Spin- $\frac{1}{2}$  eines nächsten Nachbarn  $y$  derart, dass sie ein Singulett zusammen bilden. Betrachtet man nun zwei Gitterplätze mit je einem Spin- $S$ , so kann der Gesamtspin  $S'$  beider Gitterplätze auf Grund des Singuletts zwischen beiden Gitterplätzen nicht  $2S$  sein; der Gesamtspin muss kleiner sein, und es gilt  $S' < 2S$ . Ein Projektionsoperator  $\mathcal{P}_{xy}$ , der auf die Gitterplätze  $x$  und  $y$  wirkend auf den Unterraum mit Spin  $2S$  projiziert, annihiliert also den so konstruierten Zwei-Spin-Zustand. Der Zwei-Spin-Zustand mit maximalem Spin  $S' = 2S$  hingegen wird mit dem Eigenwert 1 auf sich projiziert.

Der Hamilton-Operator  $\mathbf{H} = \sum_{\langle x,y \rangle} \mathcal{P}_{xy}$ , der sich als Summe über nächste Nachbarn  $\langle x, y \rangle$  schreiben lässt und nur solche Projektionsoperatoren beinhaltet, besitzt also einen Grundzustand, der aus folgender Vorschrift hervorgeht:

An jedem Gitterplatz werden  $2S$  Spin- $\frac{1}{2}$  platziert. Jeder dieser Spin- $\frac{1}{2}$  wird mit einem Spin- $\frac{1}{2}$  einem seiner  $z = 2S$  nächsten Nachbarn antisymmetrisiert. Die  $2S$  Spin- $\frac{1}{2}$  an jedem Gitterplatz werden symmetrisiert, sodass ein Spin der Größe  $S$  entsteht. Der entstehende globale Zustand ist ein Grundzustand zu obigem Hamilton-Operator des entsprechenden Spin- $S$  Modells.

In den einzelnen Kapiteln wird immer wieder auf diese Konstruktionsweise eingegangen und das Bild wird vertieft werden. Nach der hier gegebenen Definition ist dabei zu beachten, dass man von einem Spin der Größe  $S$  ausgeht, der gerade dem Zweifachen der Koordinationszahl  $z$  entspricht. Es ist auch möglich, VBS-Zustände des AKLT-Modells zu konstruieren, deren Spingröße ein Vielfaches der doppelten Koordinationszahl ist. Man geht dann etwa von zwei Spin- $\frac{1}{2}$  aus, wovon jeder mit einem Spin- $\frac{1}{2}$  des nächsten Nachbarn antisymmetrisiert wird und so fort.

Ein typischer VBS-Zustand kann für eine Spin-1-Kette realisiert werden, wie sie in dieser Arbeit als Beispiel dient (siehe 2.16). Der so konstruierte VBS-Zustand dient noch heute als Muster-Beispiel eines Systems in der *Haldane-Phase* (siehe unten).

Im Jahre 1983 sagte Haldane fundamentale Unterschiede zwischen Spin-Systemen mit ganzzahligen und halbzahligen Spins voraus [Haldane 1983a, Haldane 1983b]. Für den Heisenberg-Antiferromagneten einer halbzahligen Spin-Kette beobachtet man einen algebraischen Zerfall der Zwei-Punkt-Korrelation und ein (im thermodynamischen Limes) kontinuierliches, lückenloses Anregungsspektrum. Für ganzzahligen Spin hingegen soll die Korrelationsfunktion exponentiell abklingen und es soll eine Anregungslücke zwischen dem nun eindeutigen Grundzustand und der ersten Anregung auftauchen. Haldanes Vermutung stützt sich auf eine Abbildung der Heisenbergkette auf eine zweidimensionale Feldtheorie, die erst für große Spins und langwellige Anregungen korrekt wird. Ein rigoroser Beweis dieser Vermutung steht noch aus, aber viele experimentelle Ergebnisse (zum Beispiel [Ave-

nel u. a. 1992, Katsumata u. a. 1989, Renard u. a. 1987]) und numerische Arbeiten (zum Beispiel [Botet u. a. 1983, Delica u. a. 1991, Golinelli u. a. 1992, White und Huse 1993]) bestätigen die Aussage. Die Vermutung Haldanes wird heute allgemein akzeptiert. Aber auch andere Systeme, die sich nicht mit einem Heisenberg-Hamilton-Operator beschreiben lassen, zeigen ähnliche Eigenschaften, sodass man ganz allgemein von dem *Haldane-Szenario* sprechen kann, das sich wie folgt definiert:

- i. der Grundzustand ist einfach (nicht-entartet),
- ii. es existiert eine Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand,
- iii. die Grundzustands-Korrelationen klingen exponentiell ab (als Funktion des Abstandes).

Die Haldanesche Vermutung besagt nun, dass dieses Szenario für antiferromagnetische Heisenberg-Modelle mit ganzzahligem Spin realisiert ist. Die oben beschriebene Spin-1-Kette mit VBS-Zustand entspricht diesem Szenario und befindet sich somit in der Haldane-Phase. Wie später gezeigt wird, kann der Matrix-Produkt-Grundzustand aus Kapitel 3.1 als eine Verallgemeinerung der VBS-Spin-1-Kette angesehen werden. Dieser Matrix-Produkt-Grundzustand wird von einem kontinuierlichen und einem diskreten Parameter gesteuert. Für alle Parameterwerte hängt der Matrix-Produkt-Grundzustand kontinuierlich mit dem VBS-Zustand zusammen. Ein Phasenübergang kann nicht beobachtet werden. Damit ist verständlich, dass sich dieser Matrix-Produkt-Grundzustand für alle Parameterwerte in der Haldane-Phase befindet.

Ähnliche Überlegungen werden für einige der später betrachteten Vertex-Zustands-Modelle auch gelten. Da bei diesen Modellen Phasenübergänge auftreten können, gelten solche Betrachtungen nur innerhalb der Phase, in der auch der VBS-Zustand zu finden ist.

Aus dem obigen Beispiel wird klar, dass die hier vorgestellten Methoden der Matrix-Produkt-Grundzustände und der Vertex-Zustands-Modelle Verallgemeinerungen auf anisotrope Systeme der AKLT-Modelle sind. Insbesondere tritt die Antisymmetrisierung der Spin- $\frac{1}{2}$  nur im Spezialfall hervor.

Überdies werden in den Kapiteln 5.3.1 und 5.3.2 weitere Verallgemeinerungen in Hinblick auf die Zerlegung in Spin- $\frac{1}{2}$  vorgestellt. Einige der Spin- $\frac{1}{2}$  werden mit keinem Nachbarn wechselwirken und somit "freie Bonds" bilden.

Die in dieser Arbeit betrachteten Modelle zeigen innerhalb der Phasen exponentiell abfallende Korrelationsfunktionen. Diese gehen in der Regel mit endlichen Anregungslücken einher. Es ist daher zu erwarten, dass die hier untersuchten Eigenschaften, die innerhalb der Phasen beobachtet werden können, auch außerhalb des Parameterbereiches, in dem die Konstruktion der Vertex-Zustands-Modelle Gültigkeit besitzt, bis zu einem gewissen Grad

beobachtet werden können.

Mit demselben Argument kann man den VBS-Zustand der Spin-1-Kette, der ja exakt angegeben werden kann, als Repräsentant eines Spin-Systems mit ganzzahligen Spins ansehen, für den die Vermutung Haldanes zutrifft. Die Spin-1-Heisenbergkette liegt in derselben Phase wie der VBS-Zustand der Spin-1-Kette. Im gleichen Sinne können die hier vorgestellten Modelle als Prototypen einer ganzen Klasse physikalischer Systeme angesehen werden.

Die in dieser Arbeit betrachteten Modelle unterscheiden sich dabei in der Größe der betrachteten Spins ebenso wie in der zu Grunde liegenden Topologie, auf der die Spins angeordnet werden. Dadurch ist es möglich ein umfassendes Bild der Möglichkeiten zu zeichnen, die Vertex-Zustands-Modelle eröffnen. Eine Vielzahl unterschiedlicher physikalischer Phänomene lässt sich so nachvollziehen und ihre Abhängigkeit von der Gitterstruktur und der Größe des Spins kann studiert werden.

### **Aufbau der Arbeit**

In den beiden folgenden Kapiteln 2 und 3 werde ich die allgemeine Theorie der Optimum-Grundzustände und deren Realisation anhand von Vertex-Zustands-Modellen und Matrix-Produkt-Grundzuständen erläutern.

In dem Kapitel 4 werde ich dann auf Monte-Carlo-Simulationen eingehen, die in dieser Arbeit ihre Anwendung gefunden haben, um die Vertex-Zustands-Modelle zu untersuchen.

Das Kapitel 5 wird sich mit den konkreten Modellen beschäftigen. Dabei wird sich das Unterkapitel 5.1 mit einem Spin-2-Modell auf dem Quadratgitter beschäftigen, das bereits in der Veröffentlichung [Niggemann u. a. 2000] vorgestellt wurde. An diesem Modell habe ich die Implementierung meiner Simulationen getestet und ich konnte Ergebnisse auf der einen Seite bestätigen und auf der anderen zu weiteren Ergebnissen gelangen. In dem Unterkapitel 5.2 habe ich Spin-3-Modelle auf unterschiedlichen Gittern untersucht. Es war möglich Vertex-Zustands-Modelle auf einem dreidimensionalen kubischen Gitter zu konstruieren (Abschnitt 5.2.1), auf einem zweidimensionalen Hexagonalgitter (Abschnitt 5.2.2) und einem ebenso zweidimensionalen Dreiecksgitter (Abschnitt 5.2.3). In dem Unterkapitel 5.3 stelle ich zwei Spin-2-Modelle auf einem Hexagonalgitter vor. Dabei unterscheiden sich die physikalischen Eigenschaften beider Modellklassen deutlich voneinander.

In dem Kapitel 6 werde ich dann eine Zusammenfassung der Ergebnisse liefern und, sofern dies nicht schon in den Kapiteln zu den einzelnen Modellen selber geschehen ist, diese interpretieren. Dabei wird an dieser Stelle mehr das Augenmerk auf dem Vergleich der Modelle untereinander liegen.



## 2. Optimum-Grundzustände

In diesem und dem nächsten Kapitel möchte ich die Methodik vorstellen, mit der ich die in dieser Arbeit vorgestellten Modelle konstruiert und untersucht habe. Eine zentrale Rolle wird dabei der Begriff der *Optimum-Grundzustände* einnehmen, den ich in diesem Kapitel vorstelle. Überdies spezifiziere ich die Symmetrien, die den betrachteten Modellen gemeinsam sein sollen und komme zu allgemeinen Schlußfolgerungen aus den Symmetrieüberlegungen. Im nächsten Kapitel werde ich dann zwei Möglichkeiten vorstellen, Optimum-Grundzustände in Form von Matrix-Produkt-Grundzuständen und als Vertex-Zustands-Modelle zu konstruieren und zu untersuchen.

### 2.1. Allgemeine Theorie

*Optimum-Grundzustände sind (quantenmechanische) Zustände besonders einfacher Struktur und niedrigster Energie.*

Optimum-Grundzustände sind *globale* Grundzustände für quantenmechanische Spin-Systeme, die vollständig durch Grundzustände *lokaler* Hamiltonian bestimmt werden. Es müssen bestimmte Forderungen an den globalen Hamiltonian gestellt werden, damit eine solche Vereinfachung möglich ist. Die resultierenden Modelle können aber ein reichhaltiges Verhalten zeigen und sind nicht zwangsläufig einfacher Struktur. Hierzu werde ich Beispiele aufzeigen, welche die praktische Anwendung verdeutlichen. An den Beispielen wird dann auch deutlich, welche Anforderungen erfüllt sein müssen, damit ein Optimum-Grundzustand realisiert werden kann.

In dieser Arbeit möchte ich mich auf eine Formulierung der Optimum-Grundzustände für (quantenmechanische) Spin-Systeme beschränken. Wie in der Einleitung bereits erwähnt, können aber neben den hier beschriebenen Modellen auch Optimum-Grundzustände für andere Modellklassen realisiert werden.

#### 2.1.1. Definition: Optimum-Grundzustand

Auf einem beliebigen zu Grunde liegenden Gitter soll ein quantenmechanisches Spin-System durch folgenden Hamiltonian beschrieben werden:

$$\mathbf{H} := \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{h}_{ij}, \quad (2.1)$$

mit der Notation, dass die spitzen Klammern  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  hier und im Folgenden Paare nächster Nachbarn bezeichnen. Die mit kleinen Buchstaben bezeichneten Hamiltonians  $\mathbf{h}_{ij}$  sind lokale, hermitesche Operatoren, die nur auf die zwei Gitterplätze  $i$  und  $j$  wirken sollen.

Das Spektrum der lokalen Hamiltonians ist sowohl nach oben als auch nach unten beschränkt<sup>1</sup>. Der Off-Set der lokalen Hamiltonians kann so bestimmt werden, dass sie positiv semi-definit werden, und der niedrigste Eigenwert gerade Null ist:

$$\mathbf{h}_{ij} \geq 0 \text{ für alle } i, j. \quad (2.2)$$

Damit ist der globale Hamiltonian als Summe positiv semi-definiter Operatoren auch wieder positiv semi-definit. Diese Eigenschaft bleibt auch im thermodynamischen Limes erhalten, bei dem der globale Hamiltonian eine Summe unendlich vieler Summanden ist.

Sind die niedrigsten Eigenwerte der lokalen Hamiltonian Null, so ist der niedrigste Eigenwert des globalen Hamiltonian Null oder größer. Damit stellt Null eine untere Schranke dar. Eine ausgezeichnete Klasse von globalen Hamiltonian hat gerade diese untere Schranke Null als Eigenwert und verleitet so zu folgender

**Definition 2.3 (Optimum-Grundzustand)** *Ein globaler Grundzustand  $|\Psi_0\rangle$  ist genau dann ein Optimum-Grundzustand, wenn der globale Grundzustand die untere Schranke der Energie annimmt. Die untere Schranke wird dabei durch die Summe der niedrigsten Eigenwerte der lokalen Hamilton-Operatoren bestimmt.*

Dies bedeutet in dem Fall, dass alle lokalen Hamiltonian Null als niedrigsten Eigenwert haben, dass

$$\mathbf{H}|\Psi_0\rangle = 0 \quad (2.4)$$

ist. In diesem Fall lässt sich ein Optimum-Grundzustand alternativ charakterisieren durch:

**Lemma 2.5 (Optimum-Grundzustand)** *Ein globaler Zustand  $|\Psi_0\rangle$  ist Optimum-Grundzustand eines positiv semidefiniten Hamilton-Operators  $\mathbf{H}$ , wenn folgende Äquivalenz gilt:*

$$\mathbf{H}|\Psi_0\rangle = 0 \Leftrightarrow \mathbf{h}_{ij}|\Psi_0\rangle = 0 \text{ für alle } i, j. \quad (2.6)$$

In dieser Formulierung wird ersichtlich, dass ein Optimum-Grundzustand ein globaler Grundzustand ist, der aus lokalen Grundzuständen aufgebaut wird.

Der Beweis des Lemmas geht wie folgt: .

*Beweis.* Die „ $\Leftarrow$ “-Richtung ist trivial.

Für die „ $\Rightarrow$ “-Richtung wird ausgegangen von

$$0 = \langle \Psi_0 | \mathbf{H} | \Psi_0 \rangle = \sum_{\langle i, j \rangle} \langle \Psi_0 | \mathbf{h}_{ij} | \Psi_0 \rangle. \quad (2.7)$$

<sup>1</sup>Der Hilbertraum zweier endlicher Spins, etwa Spins der Größe  $s_1$  und  $s_2$ , ist endlichdimensional. Das Spektrum der lokalen Wechselwirkungen ist somit nach unten beschränkt. Durch Addition einer geeigneten Konstante kann der niedrigste Eigenwert auf Null verschoben werden. Geschieht das für alle lokalen Wechselwirkungen, so tritt im globalen Hamiltonian eine Konstante hinzu (die Summe der „lokalen Konstanten“).

Neben den globalen Hamiltonian sind aber auch die lokalen Hamiltonian hermitesche, positiv semi-definite Operatoren, sodass in obiger Gleichung jeder Summand einzeln verschwinden muss, um die Gleichung zu erfüllen.

Schreibt man die lokalen Wechselwirkungen in spektraler Darstellung  $\mathbf{h}_{ij} = \sum_k \lambda_k |k\rangle\langle k|$  mit Eigenzuständen  $|k\rangle$ , so folgt:

$$0 = \langle \Psi_0 | \mathbf{h}_{ij} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \left( \sum_k \lambda_k |k\rangle\langle k| \right) | \Psi_0 \rangle = \sum_k \lambda_k |\langle \Psi_0 | k \rangle|^2. \quad (2.8)$$

Wie oben erwähnt sind die lokalen Wechselwirkungen positiv semi-definit, sodass alle  $\lambda_k \geq 0$  sind. Als Konsequenz muss jeder Summand verschwinden:

$$\lambda_k = 0 \text{ oder } \langle \Psi_0 | k \rangle = 0, \text{ mit } \mathbf{h}_{ij} = \sum_k \lambda_k |k\rangle\langle k| \text{ folgt also:} \quad (2.9)$$

$$\mathbf{h}_{ij} | \Psi_0 \rangle = 0. \quad \square$$

**Bemerkung 2.10** Gleichung (2.6) liefert die wichtige Erkenntnis, dass sich das Problem, den Grundzustand für den globalen Hamiltonian zu finden, auf ein lokales Problem zurückführen lässt.

In vielen Fällen ist der Übergang von einem endlichen System hin zu einem unendlich großen System notwendig, um bestimmte Aussagen treffen zu können, die nur exakt im thermodynamischen Limes gelten. Ist bei einem Optimum-Grundzustand hingegen eine Eigenschaft bekannt, so gilt diese bei endlichen Systemgrößen ebenso, wie bei unendlich großen Systemen.

Aber: Die Betrachtung des thermodynamischen Limes ist bei Optimum-Grundzuständen durch das Auftreten von (Quanten)-Phasenübergängen interessant, die nur für unendlich große Systeme existieren können.

## 2.1.2. Eigenschaften und Beispiele von Optimum-Grundzuständen

Gleichung (2.6) liefert die entscheidende Idee der Optimum-Grundzustände das Problem, einen *globalen* Grundzustand zu finden ( $\mathbf{H} | \Psi_0 \rangle = 0$ ), wird auf das *lokale* Problem, Zwei-Spin-Grundzustände für lokale Hamiltonians zu finden, reduziert.

**Beispiel 2.11 (Die ferromagnetische Spin-1 Heisenbergkette)** Die ferromagnetische Heisenbergkette ist für positive  $\mathfrak{J} > 0$  gegeben durch:

$$\mathbf{H} = -\mathfrak{J} \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - 1) = \sum_i \mathbf{h}_{i,i+1}. \quad (2.12)$$

Der Off-Set der lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{i,i+1} = -\mathfrak{J} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - 1)$  ist bereits so gewählt, das  $\mathbf{h}_{ij} \geq 0$  gilt.

Die lokalen Grundzustände sind einfach anzugeben. Das Tensorprodukt zweier Spin-1 mit maximaler  $\mathbf{S}^z$ -Komponente ist ein solcher Grundzustand, und es gilt

$$\mathbf{h}_{i,i+1} |1, 1\rangle_{i,i+1} = 0, \quad (2.13)$$

für Zwei-Spin-Zustände  $|1, 1\rangle_{i,i+1}$ <sup>[2]</sup> an beliebigen Gitterplätzen  $i, i + 1$ . Damit ist das einfache, tensorielle Produkt von Zwei-Spin-Zuständen

$$|\Psi_0\rangle = \prod_i^{\otimes} |1\rangle_i = |1, 1, 1, \dots\rangle \quad (2.14)$$

ein globaler Grundzustand, ein Optimum-Grundzustand, der ferromagnetischen Spin-1 Heisenbergkette.

Aber auch Optimum-Grundzustände mit komplizierteren Produktstrukturen lassen sich realisieren. So ist es unter anderem möglich, auch quantenmechanische Antiferromagneten in Form von Optimum-Grundzuständen zu schreiben, die in der Regel keine einfache Produktstruktur aufweisen. Ein Beispiel ist die Spin-1-Kette, die durch folgenden Hamiltonian gegeben ist:

### Beispiel 2.15 (Spin-1-Kette)

$$H = \sum_i \left( \vec{\mathbf{s}}_i \cdot \vec{\mathbf{s}}_{i+1} + \frac{1}{3} \left( \vec{\mathbf{s}}_i \cdot \vec{\mathbf{s}}_{i+1} \right)^2 + \frac{2}{3} \right). \quad (2.16)$$

Das durch den Hamiltonian (2.16) definierte Modell besitzt einen antiferromagnetischen Grundzustand. Dieser lässt sich nicht durch ein einfach tensorielles Produkt darstellen, besitzt aber einen Optimum-Grundzustand. An späterer Stelle (siehe u.a. 3.15, 3.54) gehe ich wieder auf dieses Modell ein.

## 2.2. Symmetrien der lokalen Wechselwirkungen

Nicht jeder Hamiltonian besitzt einen Optimum-Grundzustand als Grundzustand. Diese spezielle Struktur tritt nur bei den wenigsten Modellen zu Tage, liefert aber dann wertvolle analytische Ergebnisse. Um systematisch diejenigen Modelle zu finden, bei denen eine solche Struktur vorliegt, sucht man zunächst die Eigenzustände von lokalen Wechselwirkungen, ausgehend von den Symmetrien, die das System aufweisen soll. Die folgenden Symmetrien können für viele Systeme als sinnvoll angesehen werden:

### i. Homogenität im (Orts-) Raum :

Das Modell habe die volle Symmetrie des zu Grunde liegenden Gitters, zum Beispiel sollen alle lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{ij}$ , wirkend auf Spin-Paare an den Gitterplätzen  $i$  und  $j$ , gleich sein.

<sup>2</sup>Die  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustände zum Eigenwert 1 seien mit  $|1\rangle$  gekennzeichnet.



ii. *Paritätsinvarianz:*

Die lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{ij}$  sollen mit dem Paritätsoperator  $\mathbf{P}_{ij}$  kommutieren, der die Spins an den Plätzen  $i$  und  $j$  untereinander austauscht ( $[\mathbf{P}_{ij}, \mathbf{H}_{ij}] = 0$ ).

iii. *Rotationsinvarianz* in der  $(x, y)$ -Ebene des Spin-Raumes:

Als eine der gängigsten Abweichungen von der vollen  $SO(3)$ -Symmetrie im Spin-Raum soll eine Anisotropie in eine bestimmte Richtung zugelassen werden. Wird diese Richtung als  $z$ -Richtung benannt, so muss folgende Kommutatorbeziehung<sup>3</sup> gelten:

$$[\mathbf{h}_{ij}, \mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z] = 0. \quad (2.17)$$

iv. *Zeitumkehrinvarianz/ Spin-Flip-Invarianz:*

Das Modell soll unter der Transformation  $\mathbf{T}$  invariant bleiben für die gilt:  $\mathbf{T}\mathbf{S}_i^z\mathbf{T}^{-1} = -\mathbf{S}_i^z$  und  $\mathbf{T}\mathbf{H}\mathbf{T}^{-1} = \mathbf{H}$ . Speziell soll kein äußeres Magnetfeld anliegen.

Die Symmetrien beschränken die (theoretische) Allgemeinheit des Modells, sind aber in physikalischen Systemen oft realisiert. Im Falle der oben beschriebenen Symmetrien findet man die dazugehörigen Eigenvektoren, indem man eine Basis bestimmt, die sowohl aus Eigenvektoren zu  $\mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z$  (den Spin-Operatoren am Platz  $i$  bzw.  $j$  in  $z$ -Richtung), als auch zu  $\mathbf{P}_{ij}$  (dem Paritäts-Operator wirkend auf die Plätze  $i$  und  $j$ ) besteht. Schreibt man den Hamilton-Operator  $\mathbf{H}$  geeignet als Summe der lokalen Wechselwirkungen, die in spektraler Darstellung dieser Basis vorliegen, so besitzt dieser globale Hamilton-Operator die Symmetrien dieser Basis.

**Beispiel 2.18** Man betrachte ein Paar Gitterplätze  $i, j$ , mit je einem Spin-1 und dazugehörigen Operatoren  $\vec{\mathbf{S}} = \vec{\mathbf{S}}_i + \vec{\mathbf{S}}_j$ ,  $\mathbf{S}^z = \mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z$ , etc. So gehören zu den  $\mathbf{S}^z$ -Werten  $\mathfrak{m} = 2$  und  $\mathfrak{m} = -2$  ( $\mathfrak{m}$  bezeichnet die Magnetisierung – hier zweier Spins –, also:  $|\mathfrak{k}\mathfrak{l}\rangle \rightsquigarrow \mathfrak{m} := \mathfrak{k} + \mathfrak{l}$ ) eindimensionale Unterräume, die aufgespannt werden durch  $|v_2\rangle := |11\rangle$  und  $|v_{-2}\rangle := |\overline{1}\overline{1}\rangle$ <sup>4</sup>. Sie sind Eigenzustände zu den lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{ij}$ . Im Falle  $\mathfrak{m} = 1$  und  $\mathfrak{m} = -1$  zerfällt der dazugehörige Unterraum in jeweils einen symmetrischen (Parität  $\mathfrak{p} = 1$ ) und einen antisymmetrischen ( $\mathfrak{p} = -1$ ) Vektor, der sich schreiben lässt als

$$\begin{aligned} \mathfrak{m} = 1, \mathfrak{p} = 1 : & \quad |v_1^+\rangle = |10\rangle + |01\rangle \\ \mathfrak{m} = 1, \mathfrak{p} = -1 : & \quad |v_1^-\rangle = |10\rangle - |01\rangle \\ \mathfrak{m} = -1, \mathfrak{p} = 1 : & \quad |v_{-1}^+\rangle = |\overline{1}0\rangle + |0\overline{1}\rangle \\ \mathfrak{m} = -1, \mathfrak{p} = -1 : & \quad |v_{-1}^-\rangle = |\overline{1}0\rangle - |0\overline{1}\rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Man sieht, dass in den Unterräumen für  $\mathfrak{m} = 2, -2, 1, -1$  die Eigenzustände der lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{ij}$  bereits vollständig durch die Symmetrien (2.2) bestimmt sind. Für die

<sup>3</sup>Diese ergibt sich durch Anwenden einer Drehung um  $\alpha$  in der  $xy$ -Ebene  $\mathbf{U} = e^{-i\alpha(\mathbf{S}_i^x + \mathbf{S}_j^x)}$  angewendet auf  $H$ , also:  $\mathbf{H} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{H} \cdot \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{H} - i\alpha[\mathbf{S}_i^x + \mathbf{S}_j^x, \mathbf{H}] + O(\alpha^2)$ . Gleichheit ergibt sich für  $[\mathbf{S}_i^x + \mathbf{S}_j^x, \mathbf{H}] = 0$ .

<sup>4</sup>Zu negativen  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwerten gehörende Zustände sollen mit Überstrichen gekennzeichnet sein, also:  $\forall \mathfrak{n} \in \mathbb{N} : S^z |\overline{\mathfrak{n}}\rangle = -\mathfrak{n} |\overline{\mathfrak{n}}\rangle$ .

Quantenzahlen  $\mathfrak{m} = 0$  und  $\mathfrak{p} = 1$  ist der Unterraum 2-dimensional. Damit jede Orientierung in dem Unterraum verwirklicht werden kann muss ein Superpositions-Parameter  $a$  eingeführt werden. Es ergeben sich die zwei orthogonalen Eigenzustände

$$\begin{aligned} \mathfrak{m} = 0, \mathfrak{p} = 1 : \quad |v_{01}^+\rangle &= |00\rangle + \frac{a}{2} (|1\bar{1}\rangle + |\bar{1}1\rangle) \\ |v_{02}^+\rangle &= a|00\rangle - (|1\bar{1}\rangle + |\bar{1}1\rangle). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Für jeden Parameterwert  $a$  sind die Vektoren  $|v_{01}^+\rangle$  und  $|v_{02}^+\rangle$  Eigenvektoren zu  $\mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z$  und  $P_{ij}$ , und damit auch zu  $\mathbf{h}_{ij}$ . Man erhält einen weiteren freien Parameter für das Modell, welches möglichst allgemein gehalten werden soll. In dem antisymmetrischen Fall ( $\mathfrak{p} = -1$ ) liegt ein eindimensionaler Unterraum vor. Hier gibt es keinen Superpositionsparameter

$$m = 0, \mathfrak{p} = -1 : \quad |v_0^-\rangle = |1\bar{1}\rangle - |\bar{1}1\rangle. \quad (2.21)$$

Damit liegen alle möglichen Eigenzustände vor und der lokale Hamilton-Operator kann spektral dargestellt werden, mit den Projektoren  $|v_k\rangle\langle v_k|$  und den Spektralparametern ( $\lambda$ -Parameter)  $\lambda_k$ :

$$\mathbf{h}_{ij} = \sum_k \lambda_k |v_k\rangle\langle v_k|. \quad (2.22)$$

Man wählt  $\lambda_k \geq 0$  für alle  $k$ . Somit kann kein Eigenwert negativ sein, wie in (2.2) gefordert.

Auf Grund der geforderten Spin-Flip-Invarianz muss man allerdings darauf achten, dass für  $|\mathfrak{m}| \geq 0$  die  $\lambda$ -Parameter zu konjugierter Magnetisierung  $\mathfrak{m}$  und  $-\mathfrak{m}$  gleich zu wählen sind. Die Anzahl der möglichen  $\lambda$ -Parameter verringert sich daher. Die lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{ij}$  lassen sich schreiben, als

$$\begin{aligned} \mathbf{h}_{ij} = & \lambda_2 (|v_2\rangle\langle v_2| + |v_{-2}\rangle\langle v_{-2}|) \\ & + \lambda_1^+ (|v_1^+\rangle\langle v_1^+| + |v_{-1}^+\rangle\langle v_{-1}^+|) \\ & + \lambda_1^- (|v_1^-\rangle\langle v_1^-| + |v_{-1}^-\rangle\langle v_{-1}^-|) \\ & + \lambda_{01}^+ |v_{01}^+\rangle\langle v_{01}^+| \\ & + \lambda_{02}^+ |v_{02}^+\rangle\langle v_{02}^+| \\ & + \lambda_0^- |v_0^-\rangle\langle v_0^-|. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Mit (2.23) ist die allgemeinste Darstellung der Spin-1-Kette gefunden, die sich mit den geforderten Symmetrien vereinbaren lässt. Es liegt ein 7-Parameter-Modell vor – sechs  $\lambda$ -Parameter und der Superpositionsparameter  $a \in \mathbb{R}$ , der in den Zuständen  $|v_{01}^+\rangle$  und  $|v_{02}^+\rangle$  auftritt. Es bleiben fünf relevante Parameter übrig, wenn man einen für Skalierung und einen für die Wahl des Energienullpunktes (der Wert der niedrigsten Energie kann frei gewählt werden; nach (2.2) wird mindestens ein  $\lambda$ -Wert gleich Null gewählt, die übrigen  $\lambda$ -Parameter positiv) abzieht.

Das obige Beispiel zeigt, wie anhand von geforderten Symmetrien der globale Hamilton-Operator geschrieben werden kann. In Hinblick auf Optimum-Grundzustände drängt sich die Frage auf, wie ein solcher Zustand für einen Hamiltonian gefunden werden kann, der in obiger Darstellung gegeben ist. Die Frage läuft darauf hinaus, die Parameter des allgemeinen Hamiltonians so einzuschränken, dass der Grundzustand ein Optimum-Grundzustand ist. Es ist zu erwarten, dass einige der verbleibenden Parameter des Hamiltonians auch in den Grundzustand einfließen, sodass eine ganze Schar an Grundzuständen angegeben werden kann. In den folgenden Kapiteln werde ich zwei mögliche Konstruktionen der Optimum-Grundzustände in Form der Matrix-Produkt-Grundzuständen für eindimensionale Modelle und Vertex-Zustands-Modelle für beliebige Dimensionen vorstellen. An dieser Stelle werden auch die Bedingungen erläutert, die an das vorliegende Modelle gestellt werden müssen, damit ein Optimum-Grundzustand vorliegt.



## 3. Vertex-Zustands-Modelle

In diesem Kapitel möchte ich zunächst die Realisation von Optimum-Grundzuständen mittels Matrix-Produkt-Grundzuständen vorstellen. Mit der Methode der Matrix-Produkt-Grundzustände ist es möglich, für eindimensionale Systeme Optimum-Grundzustände zu konstruieren, deren Eigenschaften in großem Umfang analytisch zugänglich sind. Diese Methode ist leider auf eindimensionale Systeme beschränkt. Für höher dimensionale Systeme eignet sich eine Formulierung der Optimum-Grundzustände in Form von Vertex-Zustands-Modellen, auf die ich anschließend eingehen möchte.

Viele wichtige Eigenschaften der Vertex-Zustands-Modelle sind auch bei den Matrix-Produkt-Grundzuständen zu finden. Da sie konzeptionell etwas überschaubarer sind, möchte ich auch zur Vollständigkeit mit diesen eindimensionalen Zuständen beginnen.

### 3.1. Matrix-Produkt-Grundzustände

Die Eigenschaften eines Optimum-Grundzustandes werden bereits in strukturell sehr einfachen Spin-Systemen verwirklicht, wie z.B. der vollständig polarisierte Grundzustand eines Spin-1 Ferromagneten

$$|\Psi_F\rangle = \prod_i^{\otimes} |1\rangle_i, \quad (3.1)$$

der bereits als Beispiel 2.11 diente. Die hier vorliegende Tensor-Produkt-Struktur ermöglicht es auf einfache Art und Weise, wichtige Erwartungswerte zu berechnen, wie etwa Korrelationsfunktionen und Erwartungswerte einzelner Operatoren.

Liegt ein bipartites Gitter mit *zwei disjunkten Untergittern* vor, so kann man das antiferromagnetische Analogon zu (3.1) – den sog. Néel-Zustand – schreiben als

$$|\Psi_N\rangle = \prod_{i \in \mathfrak{A}}^{\otimes} |1\rangle_i \otimes \prod_{i \in \mathfrak{B}}^{\otimes} |\bar{1}\rangle_i, \quad (3.2)$$

wobei das Gitter in zwei Untergitter ( $\mathfrak{A}$ ,  $\mathfrak{B}$ ) zerlegt wurde, sodass  $\mathfrak{A}$  nur nächste Nachbarn in  $\mathfrak{B}$ , und  $\mathfrak{B}$  nur nächste Nachbarn in  $\mathfrak{A}$  hat. Dieser Zustand kann tatsächlich ein Grundzustand des globalen Hamiltonian  $\mathbf{H}$  sein. Eine der wichtigsten Voraussetzungen dafür ist eine starke z-Achsen-Anisotropie der lokalen Wechselwirkungen. Nur in seltenen Fällen erhält man diese strukturell sehr einfache Form des Grundzustandes. Im Allgemeinen zerstören die

quantenmechanischen Fluktuationen diese strenge antiferromagnetische Polarisation. Der Grundzustand hat dann eine komplexere Struktur.

Aber auch für generischere Quanten-Antiferromagnete ist es möglich, Optimum-Grundzustände zu konstruieren. Dies geschieht mit Hilfe einer *verallgemeinerten Produkt-Struktur*.

Für eine Spin-Kette, also ein eindimensionales System, ist eine solche Produkt-Struktur durch folgendes Vorgehen darstellbar: jedem Gitterplatz  $i$  wird eine Matrix  $m^{(i)}$  zugeschrieben. Statt gewöhnlicher Zahlen (reelle oder komplexe) haben die Matrizen jetzt Ein-Spin-Zustände des entsprechenden Gitterplatzes als Einträge. Es ergeben sich Matrizen

$$m^{(i)} = \begin{pmatrix} |\phi_{11}\rangle_i & |\phi_{12}\rangle_i & & \\ |\phi_{21}\rangle_i & |\phi_{22}\rangle_i & \cdots & \\ & \vdots & & \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Einer Spin-Kette der Länge  $L$  liegt ein Hilbertraum der Dimension  $\dim[\mathcal{H}] = (2S + 1)^L$  zu Grunde.  $2S + 1$  ist gerade die Dimension des Hilbertraumes des Ein-Spin-Zustandes. Um mit den oben definierten Matrizen (mit Ein-Spin-Zuständen) einen Zustand der  $L$  Spins auf der Kette zu konstruieren, muss die tensorielle Multiplikation zweier Matrizen erklärt werden.

**Definition 3.4 (Tensorielle Multiplikation)** *Es seien  $m^{(i)}$  und  $m^{(i+1)}$  Matrizen (3.3) und  $m_{\mu\nu}^{(i)}$  bzw.  $m_{\mu\nu}^{(i+1)}$  ihre Einträge. Dann lässt sich die Multiplikation zweier Matrizen komponentenweise erklären, indem man die Multiplikation der Zahlen einer gewöhnlichen Matrix durch die tensorielle Multiplikation der Ein-Spin-Zustände ersetzt. Das Ergebnis ist ein Zwei-Spin-Zustand. Genauer definiert man*

$$(m^{(i)} \cdot m^{(i+1)})_{\mu\nu} = \sum_k m_{\mu k}^{(i)} \otimes m_{k\nu}^{(i+1)}. \quad (3.5)$$

Wie bei der üblichen Matrix-Multiplikation muss die Anzahl der Spalten der ersten Matrix mit der der Zeilen der zweiten übereinstimmen.

Das Assoziativ-Gesetz gilt jedoch entsprechend

$$\begin{aligned} (m^{(i)} \cdot m^{(i+1)}) \cdot m^{(i+2)} &= m^{(i)} \cdot (m^{(i+1)} \cdot m^{(i+2)}) \\ &= m^{(i)} \cdot m^{(i+1)} \cdot m^{(i+2)}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Möchte man nun für eine Kette der Länge  $L$  einen solchen Zustand konstruieren, so wird einem jeden Gitterplatz  $i$  eine Matrix  $m^{(i)}$  zugeschrieben. Das Produkt über diese  $L$  Matrizen enthält  $\#\{\mu, \nu\}$ -viele Einträge, von denen jeder einen quantenmechanischen Zustand aus dem globalen Hilbertraum der  $L$  Spins darstellt

$$|(\Psi)_{\mu\nu}\rangle = (m^{(1)} \cdot m^{(2)} \cdot m^{(3)} \cdots m^{(L-1)} \cdot m^{(L)})_{\mu\nu}. \quad (3.7)$$

**Definition 3.8 (Matrix-Produkt-Grundzustand)** *Einen globalen Grundzustand eines ein-dimensionalen Spin-Systems nennt man Matrix-Produkt-Grundzustand, wenn dieser in der Form*

$$|\Psi_0\rangle = \text{Tr} \left( m^{(1)} \cdot m^{(2)} \cdot m^{(3)} \dots m^{(L-1)} \cdot m^{(L)} \right) \quad (3.9)$$

mit den oben beschriebenen Matrizen  $m^{(i)}$  geschrieben werden kann.

Die Spur bildet dabei periodische Randbedingungen nach. Da unter der Spur zyklisch vertauscht werden darf, ließe sich dann das Produkt auch bei dem Gitterplatz  $i = 2$  beginnen und bis  $i = L + 1 = 1$  fortsetzen. Diese Eigenschaft wird später u.a. bei der Berechnung der Zwei-Punkt-Korrelationen ausgenutzt werden. Periodische Randbedingungen lassen sich interpretieren als Zusammenschluss der Enden einer Kette zu einem Ring. So stellt die Spurbildung gerade die Multiplikation der letzten Matrix am Gitterplatz  $L$  mit der ersten am Gitterplatz 1 dar. Für die Erzeugung abweichender Randbedingungen sind andere Linearkombinationen der  $|\Psi\rangle_{\mu\nu}$  zu nehmen. Dies kann praktisch dadurch geschehen, dass man Vektoren an den Anfang und an das Ende der Kette multipliziert <sup>1</sup>.

Der in (3.9) definierte Matrix-Produkt-Grundzustand ist nach (2.6) genau dann ein Optimum-Grundzustand, wenn für alle  $i$  gilt

$$\mathbf{h}_{i,i+1} |\Psi_0\rangle \quad (3.10)$$

$$= \mathbf{h}_{i,i+1} \left[ \text{Tr} \left( m^{(1)} \cdot m^{(2)} \cdot m^{(3)} \dots m^{(L-1)} \cdot m^{(L)} \right) \right] = 0. \quad (3.11)$$

Da die lokalen Wechselwirkungen  $h_{i,i+1}$  lediglich auf die Gitterplätze  $i$  und  $i + 1$  nicht trivial wirken, erreicht man obige Bedingung, wenn man fordert

$$\mathbf{h}_{i,i+1} \left( m^{(i)} \cdot m^{(i+1)} \right)_{\mu\nu} = 0 \text{ für alle } i, \mu, \nu. \quad (3.12)$$

Die in (2.2) geforderte Symmetrie der Homogenität im (Orts-) Raum (Translationsinvarianz) führt dazu, dass alle lokalen Wechselwirkungen  $h_{i,i+1}$  im Prinzip gleich sind; sie wirken nur auf unterschiedliche Spin-Paare. Naheliegend ist es daher, sich auf solche Matrix-Produkt-Grundzustände zu konzentrieren, die auch komplette Translationsinvarianz haben, also Ansätze mit Matrizen  $m^{(i)} = m$  für alle  $i$ . Damit ergibt sich der Grundzustand zu

$$|\Psi_0\rangle = \text{Tr} \left( \underbrace{m \cdot m \cdot m \dots m}_{L \text{ Faktoren}} \right). \quad (3.13)$$

Die, noch von dem Gitterplatz abhängige, Bedingung (3.12) verkürzt sich in diesem Fall auf

$$\mathbf{h}(m \cdot m)_{\mu\nu} = 0 \text{ für alle } \mu, \nu. \quad (3.14)$$

<sup>1</sup>Die gleiche Wirkung lässt sich erzielen, indem am Anfang der Kette eine Matrix  $R$ , aus Zahlen bestehend, multipliziert wird und dann, wie gewohnt, die Spur genommen wird:  $|\Psi_0\rangle = \text{Tr} (R \cdot m^{(1)} \cdot m^{(2)} \dots m^{(L)})$ .

Da diese Gleichung unabhängig von den Gitterplätzen  $i$  und  $i + 1$  ist, wurde der Index unterdrückt.

**Beispiel 3.15 (Spin-1-Kette)** Wie schon im vorigen Kapitel, soll hier die Spin-1-Kette als Beispiel dienen. In [Klümper u. a. 1992, Klümper u. a. 1991, Klümper u. a. 1993, Ahrens u. a. 2002] wurden bereits die interessanten Fälle, in denen ein Ansatz für Matrix-Produkt-Grundzustände sinnvoll ist, vorgestellt.

Es wurde ein Grundzustand durch ein homogenes Produkt folgender  $2 \times 2$ -Matrizen dargestellt

$$m = \begin{pmatrix} |0\rangle & \sqrt{a}|1\rangle \\ \sqrt{a}|\bar{1}\rangle & \sigma|0\rangle \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

wobei  $a$  ein reeller Parameter ist und  $\sigma = \pm 1$ . Um zu prüfen, unter welchen Bedingungen man einen Optimum-Grundzustand erhält, muss das Produkt zweier Matrizen errechnet werden

$$m \cdot m = \begin{pmatrix} |00\rangle + a|1\bar{1}\rangle & \sqrt{a}(|01\rangle + \sigma|10\rangle) \\ \sqrt{a}(|\bar{1}0\rangle + \sigma|0\bar{1}\rangle) & |00\rangle + a|\bar{1}\bar{1}\rangle \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Jeder Eintrag der Produkt-Matrix muss von den lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{i,i+1}$  nach (3.14) vernichtet werden, z.B. muss mit dem Hamiltonian aus (2.23) gelten

$$\mathbf{h}_{i,i+1} [ |00\rangle + a|1\bar{1}\rangle ] = 0. \quad (3.18)$$

Passt man die Parameter so an, dass dies auch für die anderen drei Einträge gilt, so erhält man folgende Bedingungen an die Parameter

$$\lambda_1^\sigma = \lambda_{01}^+ = \lambda_0^- = 0 \text{ und} \quad (3.19)$$

$$\lambda_2, \lambda_1^{-\sigma}, \lambda_{02}^+ > 0, \quad (3.20)$$

dabei steht  $\lambda_1^\sigma$  für  $\lambda_1^+$  falls  $\sigma = 1$  und für  $\lambda_1^-$  falls  $\sigma = -1$  ist. Entsprechendes gilt für die anderen  $\lambda$ -Werte, die  $\sigma$  enthalten.

Hier stimmt der kontinuierliche, reelle Parameter  $a$  aus der Matrix mit dem Superpositionsparameter aus den lokalen Eigenzuständen (2.20) überein. Später treten, wie im Allgemeinen zu erwarten ist, auch komplexere Beziehungen zwischen den Parametern aus den Matrizen und den Superpositionsparametern auf. Damit wird der vorliegende Matrix-Produkt-Grundzustand dann ein Optimum-Grundzustand. Während (3.19) dafür sorgt, dass die lokalen Grundzustände von den lokalen Wechselwirkungen annihiliert werden, sorgt (3.20) dafür, dass alle anderen Zustände energetisch darüber liegen.



Der gewählte Weg ist also umgekehrt zur üblichen Vorgehensweise, bei der zu einem vorgegebenen Hamilton-Operator die Grundzustände gefunden werden müssen (und wenn möglich das gesamte Spektrum). Nach Konstruktion des Matrix-Produkt-Grundzustandes, der dann Optimum-Grundzustand werden soll, wählt man den entsprechenden Hamiltonian. Dieses Vorgehen kennt man bereits aus den (isotropen) VBS-Modellen, bei denen man Zustände konstruiert, die einen z.B. geringeren Gesamtspin haben, als die Projektoren, die im Hamilton-Operator mit positivem Faktor auftauchen. Wie bereits erwähnt, liegen bei den Matrix-Produkt-Grundzuständen in der Regel nicht-isotrope Modelle zu Grunde.

In dem vorliegenden Fall erhält man ein Modell, das drei positive  $\lambda$ -Parameter ( $\lambda_2$ ,  $\lambda_1^{-\sigma}$ ,  $\lambda_{02}^+$ ) enthält, sowie den reellen Parameter  $a$  und den diskreten Parameter  $\sigma$ . Die Skala ist noch frei wählbar (der Nullpunkt (Offset) wurde mit  $\varepsilon = 0$  schon gewählt) und übrig bleiben 3 kontinuierliche und ein diskreter, nicht-trivialer Parameter. Der Grundzustand selber wird nur von den Parametern  $a$  und  $\sigma$  bestimmt. Die vier lokalen Grundzustände sind die Einträge der Matrix (3.17). Es ergibt sich der Hamilton-Operator des Modells

$$\mathbf{H} = \sum_i \mathbf{h}_{i,i+1} \quad (3.21)$$

$$\text{mit } \mathbf{h}_{i,i+1} = \lambda_2 (|v_2\rangle \langle v_2| + |v_{-2}\rangle \langle v_{-2}|) \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} &+ \lambda_1^{-\sigma} (|v_1^{-\sigma}\rangle \langle v_1^{-\sigma}| + |v_{-1}^{-\sigma}\rangle \langle v_{-1}^{-\sigma}|) \\ &+ \lambda_{02}^+ |v_{02}^+\rangle \langle v_{02}^+|, \end{aligned} \quad (3.23)$$

mit den lokalen Zuständen

$$\begin{aligned} |v_2\rangle &= |11\rangle, & |v_{-2}\rangle &= |\bar{1}\bar{1}\rangle \\ |v_1^{-\sigma}\rangle &= |10\rangle + \sigma \cdot |01\rangle \\ |v_{-1}^{-\sigma}\rangle &= |\bar{1}0\rangle + \sigma \cdot |0\bar{1}\rangle \\ |v_{02}^+\rangle &= a|00\rangle - (|1\bar{1}\rangle + |\bar{1}1\rangle). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Neben solchen translationsinvarianten Modellen soll noch die Möglichkeit einer spontanen Symmetriebrechung (speziell: Bruch der Translations-Invarianz) betrachtet werden. In einem solchen Fall ist der Ansatz mit gleichen Matrizen an jedem Gitterplatz nicht Erfolg versprechend. Als Beispiel betrachte man den Néel-Zustand, der unter bestimmten Bedingungen ein antiferromagnetischer Grundzustand sein kann. Hier liegt eine Aufteilung des Gitters in zwei Untergitter vor, bei dem eines die „up“-Zustände trägt, das andere die „down“-Zustände. Es liegt also eine  $Z_2$ -Symmetriebrechung vor, die eine der häufigsten für antiferromagnetische Ordnungen ist. Einen Matrix-Produkt-Grundzustand mit einer solchen Struktur konstruiert man mit Hilfe zweier Matrizen, z.B.  $g$  und  $m$ , die man dann abwechselnd miteinander multipliziert. Man erhält wieder eine Zerlegung der Kette in zwei Untergitter; das eine enthält gerade Gitterplätze  $2j$ , das andere ungerade  $2j - 1$ . Bei dieser Konstruktion ist es notwendig anzunehmen, die Kette habe eine gerade Länge  $L$ , bevor

man sie periodisch schließt. Der Zustand schreibt sich dann als:

$$|\Psi_0\rangle = \text{Tr}(m \cdot g \cdot m \cdot g \cdots m \cdot g) = \text{Tr}(m \cdot g)^{L/2}. \quad (3.25)$$

Die Matrizen  $m$  und  $g$  müssen entsprechender Dimension sein; sie müssen nicht einzeln quadratisch sein, ihr Produkt  $(m \cdot g)$  bzw.  $(g \cdot m)$  hingegen wohl (d.h.  $g, {}^t m \in M(n_1 \times n_2; \mathcal{H})$ , es bezeichnet  $\mathcal{H}$  den entsprechenden Hilbertraum).

Auch hier müssen natürlich die Optimum-Grundzustands-Bedingungen erfüllt sein, die sich dann verkürzen zu

$$\mathbf{h}(g \cdot m)_{\mu\nu} = \mathbf{h}(m \cdot g)_{\mu\nu} = 0 \text{ für alle } \mu, \nu. \quad (3.26)$$

## 3.2. Eigenschaften der Matrix-Produkt-Grundzustände

Die einfache Struktur der Matrix-Produkt-Grundzustände ist sehr von Nutzen bei der Berechnung physikalisch relevanter Größen. So lassen sich Magnetisierung, Korrelationsfunktionen bei  $T = 0$  und generell Grundzustands-Erwartungswerte quantenmechanischer Operatoren sehr einfach analytisch mit Hilfe der Methode der Transfer-Matrizen berechnen. Da die niedrigsten Anregungen von Systemen mit Matrix-Produkt-Grundzuständen im Allgemeinen nicht eine so klare Struktur haben, stellen aber Berechnungen, in denen diese einfließen, nach wie vor eine Herausforderung dar.

Die später vorgestellten Systeme werden nicht durch Matrix-Produkt-Grundzustände realisiert. Für die Berechnung von Erwartungswerten werde ich dann auf Monte-Carlo-Simulationen (siehe Kap. 4.4.1) zurückgreifen. Dabei werden korrespondierende klassische Vertex-Modelle (siehe Definition 3.70) eine wichtige Rolle einnehmen. Die korrespondierenden klassischen Vertex-Modelle sind das Analogon zu den Transfer-Matrizen eindimensionaler Systeme, die hier definiert werden.

Zunächst sei nur ein Optimum-Grundzustand der Form (3.13) betrachtet und nach dem Quadrat der Norm gefragt, das sich als

$$\begin{aligned} Z &= \|\Psi_0\|^2 = \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \\ &= \sum_{\{\mu, \nu\}} \langle m_{\mu_1 \mu_2} | m_{\nu_1 \nu_2} \rangle \cdot \langle m_{\mu_2 \mu_3} | m_{\nu_2 \nu_3} \rangle \cdot \langle m_{\mu_3 \mu_4} | m_{\nu_3 \nu_4} \rangle \cdots \langle m_{\mu_L \mu_1} | m_{\nu_L \nu_1} \rangle \end{aligned} \quad (3.27)$$

schreiben lässt. Die einzelnen Faktoren veranlassen zu folgender

**Definition 3.28 (Transfer-Matrix)** Die Transfer-Matrix des homogenen Matrix-Produkt-Grundzustandes (3.13) wird definiert als

$$T_{(\mu_1 \nu_1), (\mu_2 \nu_2)} = \langle m_{\mu_1 \mu_2} | m_{\nu_1 \nu_2} \rangle. \quad (3.29)$$

Der Übersicht dienend kann man direkt die Doppel-Indizes durch Einfache ersetzen. Dabei schreibt man jedem Paar  $(\mu_i \nu_i)$  eine Zahl – im Falle einer Matrix  $m \in M(2 \times 2; \mathcal{H})$  eine Zahl  $k \in \{1, 2, 3, 4\}$  – zu, die dann das Paar repräsentiert. Dabei ist die Wahl sehr willkürlich (später wird über alle Indizes summiert, die Reihenfolge fällt dann nicht ins Gewicht), die folgende ist für das vorliegende Beispiel aber sehr praktikabel

$$\begin{aligned} (1, 1) &\rightarrow 1 & (1, 2) &\rightarrow 3 \\ (2, 2) &\rightarrow 2 & (2, 1) &\rightarrow 4. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Mit der Ersetzung der Doppel-Indizes durch einfache, reduziert sich die Transfer-Matrix  $T$  auf eine einfache Matrix über dem Körper der komplexen Zahlen ( $T \in M(4 \times 4; \mathbb{C})$ ). Bei Matrix-Produkt-Grundzuständen andersdimensionaler Matrizen erhält man Transfer-Matrizen entsprechender Dimension. So kann man z.B. für einen Matrix-Produkt-Grundzustand  $|\Psi_0\rangle = \text{Tr}(m \cdot g)^L$  mit Matrizen  $m, g^T \in M(2 \times 3; \mathcal{H})$  eine Transfer-Matrix für das Produkt  $m \cdot g$  bzw. für das Produkt  $g \cdot m$  ausrechnen, die dann eine  $4 \times 4$ - bzw.  $9 \times 9$ -Matrix über  $\mathbb{C}$  ergibt.

Die Transfer-Matrix kann zur Berechnung der Norm verwendet werden. Im homogenen Fall führt das zu

$$Z = \sum_{\{k\}} T_{k_1 k_2} T_{k_2 k_3} T_{k_3 k_4} \cdots T_{k_L k_1} = \text{Tr}(T^L). \quad (3.31)$$

Erwartungswerte lokaler Observablen  $A_i$  lassen sich mit dieser Methode einfach berechnen. Dabei sollen die  $A_i$  nur auf den jeweiligen Gitterplatz  $i$  wirken. Das liefert für den Erwartungswert,

$$\begin{aligned} \langle A_i \rangle &= \frac{1}{Z} \langle \Psi_0 | A_i | \Psi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\{\mu, \nu\}} \langle m_{\mu_1 \mu_2} | m_{\nu_1 \nu_2} \rangle \cdots \langle m_{\mu_i \mu_{i+1}} | A_i | m_{\nu_i \nu_{i+1}} \rangle \cdots \langle m_{\mu_L \mu_1} | m_{\nu_L \nu_1} \rangle, \end{aligned} \quad (3.32)$$

d.h. man erhält wieder Transfer-Matrix-Elemente als einzelne Faktoren. An der  $i$ -ten Stelle tritt jedoch ein modifizierter Faktor auf, der als *assoziierte* Transfer-Matrix definiert wird:

**Definition 3.33 (Assoziierte Transfer-Matrix)** Die assoziierte Transfer-Matrix zu einer lokalen Observablen  $A$ , die nur auf den Gitterplatz  $i$  wirkt, wird definiert durch:

$$T_{(\mu_1 \nu_1), (\mu_2 \nu_2)}(A) = \langle m_{\mu_1 \mu_2} | A | m_{\nu_1 \nu_2} \rangle. \quad (3.34)$$

Damit ergibt sich für den Ausdruck

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | A_i | \Psi_0 \rangle &= \sum_{\{k\}} T_{k_1 k_2} \cdots T_{k_{i-1} k_i} \cdot T_{k_i k_{i+1}}(A) \cdot T_{k_{i+1} k_{i+2}} \cdots T_{k_L k_1} \\ &= \text{Tr}(T^{i-1} \cdot T(A) \cdot T^{L-i}). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Unter der Spur dürfen die Matrizen zyklisch vertauscht werden. Dies kann ausgenutzt werden, und man erhält für den Erwartungswert einer lokalen Observablen  $A_i$

$$\langle A_i \rangle = \frac{\text{Tr}(T(A) \cdot T^{L-1})}{\text{Tr}(T^L)}. \quad (3.36)$$

Aber nicht nur Grundzustands-Erwartungswerte einzelner Operatoren lassen sich so berechnen. Eine Verallgemeinerung auf ein Produkt von  $n$  lokalen Observablen  $A_{i_1}^{(1)} \cdots A_{i_n}^{(n)}$ , die jeweils auf einen der Gitterplätze  $i_1, \dots, i_n$  wirken, erfolgt vollständig analog,

$$\langle A_{i_1}^{(1)} \cdots A_{i_n}^{(n)} \rangle = \frac{\text{Tr}(T^{i_1-1} \cdot T(A^{(1)}) \cdot T^{i_2-i_1-1} \cdot T(A^{(2)}) \cdots T^{L-i_n})}{\text{Tr}(T^L)}. \quad (3.37)$$

Es wird also lediglich an den Stellen, an denen auf entsprechenden Gitterplätzen ein Operator wirkt, statt der „einfachen“ Transfer-Matrix die assoziierte geschrieben. Es sei aber erwähnt, dass man hier nicht beliebig tauschen darf, sodass etwa alle assoziierten Transfer-Matrizen nebeneinander zu stehen kommen. Für Matrizen gilt nicht das Kommutativ-Gesetz. So erhält man für eine so wichtige Größe wie die *Zwei-Punkt-Korrelation* zwischen der Observablen  $A$ , die auf den Gitterplatz 1 wirkt, und der Observablen  $B$  auf Gitterplatz  $r$  wirkend

$$\langle A_1 B_r \rangle = \frac{\text{Tr}(T(A) \cdot T^{r-2} \cdot T(B) \cdot T^{L-r})}{\text{Tr}(T^L)}. \quad (3.38)$$

Da nun eine allgemeine Vorschrift für die Berechnung gegeben ist, muss man noch überlegen, wie man das Produkt aus  $L$  Matrizen berechnet. Hierfür kann man die lineare Algebra befragen. Man berechne einen vollständigen Satz an Eigenvektoren und Eigenwerten zu der Transfer-Matrix  $T$ . In der Regel kann erreicht werden, dass die Transfer-Matrix zu einer Matrix  $m$ , die im Matrix-Produkt-Ansatz auftaucht, unter einer unitären Transformation  $U \in \mathfrak{U}(3)$  von  $m$  zu  $\tilde{m} = UmU^{-1}$  zu einer symmetrischen Matrix wird<sup>2</sup>. Der Matrix-Produkt-Grundzustand selbst wird durch diese Transformation nicht verändert, da sich die Matrizen  $U^{-1}U = \mathbb{I}$  im Produkt der  $L$  Matrizen gegenseitig aufheben. Da die Spur über das Produkt gebildet wird, gilt dies auch für die erste und die letzte Matrix. Im Folgenden soll von einer symmetrischen Transfer-Matrix  $T$  ausgegangen werden. Dann gibt es zu dieser  $n \times n$ -Transfer-Matrix einen Satz  $n$  orthogonaler (sogar orthonormaler) Eigenvektoren  $\{|u_k\rangle\}$  und dazugehörige Eigenwerte  $\{\chi_k\}$  mit

$$T |u_k\rangle = \chi_k |u_k\rangle, \quad \langle u_k | u_l \rangle = \delta_{kl}. \quad (3.39)$$

Durch eine vollständige Zerlegung der Einheit

$$\mathbb{I} = \sum_k |u_k\rangle \langle u_k| \quad (3.40)$$

<sup>2</sup>Ist es nicht möglich, die Transfer-Matrix durch eine unitäre Transformation in eine symmetrische Gestalt zu bringen, muss zwischen rechtem und linken Eigenvektor unterschieden werden, was die Rechnung etwas verkompliziert.

und das Einfügen dieser zwischen je zwei Transfer-Matrizen in (3.37) erhält man

$$\begin{aligned}\langle A_i \rangle &= \frac{\text{Tr} \left( \sum_{k_1, \dots, k_L} T(A) |u_{k_1}\rangle \langle u_{k_1}| T |u_{k_2}\rangle \langle u_{k_2}| \cdots T |u_{k_L}\rangle \langle u_{k_L}| \right)}{\text{Tr} \left( \sum_{k_1, \dots, k_L} T |u_{k_1}\rangle \langle u_{k_1}| \cdots T |u_{k_L}\rangle \langle u_{k_L}| \right)} \\ &= \left( \sum_k \chi_k^L \right)^{-1} \sum_k \langle u_k | T(A) | u_k \rangle \chi_k^{L-1},\end{aligned}\quad (3.41)$$

wobei wieder ausgenutzt wurde, dass man unter der Spur zyklisch tauschen darf und dass die Relation:  $\langle u_{k_i} | T | u_{k_j} \rangle = \chi_{k_i} \delta_{k_i, k_j}$  gilt. Ebenso kann der Erwartungswert für zwei Operatoren ausgerechnet werden. Betrachtet man (3.38) so folgt analog

$$\langle A_1 B_r \rangle = \left( \sum_k \chi_k^L \right)^{-1} \sum_{k,l} \langle u_k | T(A) | u_l \rangle \chi_l^{r-2} \langle u_l | T(B) | u_k \rangle \chi_k^{L-r}.\quad (3.42)$$

Dieses Verfahren setzt sich nun ebenso für  $n$  Operatoren fort. Es ist also möglich, explizit und exakt die Erwartungswerte (beliebig vieler) lokaler Observablen zu berechnen. Von größtem Interesse sind dabei die Ein- und Zwei-Punkt-Korrelationen, die als Beispiel oben dargestellt sind.

Im Fall des thermodynamischen Limes (also  $L \rightarrow \infty$ ), der für die Physik oft betrachtet wird, vereinfachen sich obige Formeln weiter. Es sei mit  $\chi_1$  der größte der Eigenwerte der Transfer-Matrix benannt. Ist die (algebraische)<sup>3</sup> Vielfachheit von  $\chi_1$  Eins, so vereinfachen sich (3.41) und (3.42) zu

$$\begin{aligned}\langle A_i \rangle_\infty &= \lim_{L \rightarrow \infty} \left[ \left( 1 + \sum_{k \geq 2} \left( \frac{\chi_k}{\chi_1} \right)^L \right)^{-1} \frac{1}{\chi_1} \sum_k \langle u_k | T(A) | u_k \rangle \left( \frac{\chi_k}{\chi_1} \right)^{L-1} \right] \\ &= \frac{\langle u_1 | T(A) | u_1 \rangle}{\chi_1}\end{aligned}\quad (3.43)$$

und

$$\langle A_1 B_r \rangle_\infty = \frac{1}{\chi_1^2} \sum_k \langle u_1 | T(A) | u_k \rangle \cdot \langle u_k | T(B) | u_1 \rangle \left( \frac{\chi_k}{\chi_1} \right)^{r-2}.\quad (3.44)$$

In der oben angegebenen Formel kann sich der Ausdruck im Falle *selbstadjungierter Operatoren*  $A_i$  weiter vereinfachen:

$$\langle A_1 A_r \rangle_\infty = \frac{1}{\chi_1^2} \sum_k |\langle u_1 | T(A) | u_k \rangle|^2 \left( \frac{\chi_k}{\chi_1} \right)^{r-2}.\quad (3.45)$$

<sup>3</sup>Da von einer symmetrischen Matrix  $T$  ausgegangen wird, zerfällt diese vollständig; algebraische und geometrische Vielfachheit sind also gleich.

Wie bereits im vorigen Abschnitt sei auch hier erwähnt, dass diese Methode auch dann funktioniert, wenn eine spontane Symmetriebrechung vorliegt. Es muss dann die Transfermatrix zu einer Matrix  $M = m \cdot g$  oder einer Matrix  $G = g \cdot m$  ( $m, g$  wie in (3.25)) berechnet werden. Die lokale Observable  $A_i$  wird als Operator interpretiert, der nur auf den  $i$ -ten Gitterplatz wirkt. Die Zwei-Punkt-Korrelation für  $r = 2$  wird dann durch einen Operator  $C = A_1 \cdot B_2$  berechnet.

**Beispiel 3.46 (Spin-1-Kette)** *Im Beispiel aus (3.15) soll die Spin-1-Kette betrachtet werden. Der Matrix-Produkt-Grundzustand sei durch das homogene Produkt  $|\Psi_0\rangle = \text{Tr}(m^L)$  mit der Matrix  $m$  wie in (3.16) gegeben. Berechnet man die dazugehörige Transfer-Matrix  $T$ , so ergibt sich (nach Eliminieren der Doppel-Indizes mit der Regel aus (3.30))*

$$\begin{aligned} T_{(1,1),(1,1)} &\hat{=} T_{1,1} = T_{2,2} = 1 \\ T_{1,2} &= T_{2,1} = |a| \\ T_{3,3} &= T_{4,4} = \sigma \\ T_{i,j} &= 0, \quad \forall i, j \text{ sonst,} \end{aligned} \quad (3.47)$$

oder in Matrixform:

$$T = \begin{pmatrix} 1 & |a| & 0 & 0 \\ |a| & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

in Übereinstimmung mit [Klümper u. a. 1993]. Diese Matrix ist symmetrisch. Die Eigenvektoren und Eigenwerte zu den einzelnen Blöcken der Matrix können leicht berechnet werden und es ergibt sich

$$\begin{aligned} \chi_1 &= 1 + |a|, \chi_2 = 1 - |a|, \chi_3 = \sigma, \chi_4 = \sigma \\ |u_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^t, \quad |u_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^t, \\ |u_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^t, \quad |u_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^t. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Hier ist  $\chi_1$  der größte der Eigenwerte für  $a \neq 0$ . Für  $a = 0$  führt der Matrix-Produkt-Ansatz zu einem Grundzustand, der aus einem Tensor-Produkt von  $S^z$ -Eigenvektoren zum Eigenwert  $m = 0$  gehörend aufgebaut ist. Also:  $|\Psi_0\rangle = \prod_{i=1}^L |0\rangle$ . Neben diesem Grundzustand treten dann noch zwei weitere Grundzustände auf, welche durch zwei sich absenkende Bänder für  $a \rightarrow 0$  hinzukommen. Dieser Fall soll hier aber nicht betrachtet werden. Dennoch sei angemerkt, dass Korrelationsfunktionen und Erwartungswerte, die im Folgenden angegeben werden, auch für  $a = 0$  gültig bleiben.

Auch die assoziierte Transfer-Matrix zu dem Operator  $S^z$  lässt sich errechnen

$$T(S^z) = \begin{pmatrix} 0 & |a| & 0 & 0 \\ -|a| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Mit der in (3.43) angegebenen Formel errechnet sich so eine verschwindende *Magnetisierung*, die bereits an der Spin-Flip-Symmetrie der Matrix (3.16) hätte abgelesen werden können:

$$\langle S_i^z \rangle_\infty = \frac{\langle u_1 | T(A) | u_1 \rangle}{\chi_1} = 0. \quad (3.51)$$

Dasselbe Ergebnis erhält man für die Magnetisierung in  $x$ - und  $y$ -Richtung des Spin-Raumes (hier benötigt man die Transfer-Matrizen  $T(S^x)$  bzw.  $T(S^y)$ ). Die totalen Magnetisierungen  $\sum_i \langle S_i^z \rangle = \sum_i \langle S_i^x \rangle = \sum_i \langle S_i^y \rangle$  verschwinden. Der Grundzustand ist in diesem Sinne antiferromagnetisch. Mit derselben Transfer-Matrix  $T(S^z)$  wie oben angegeben errechnet man die *longitudinale Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion*

$$\langle S_1^z S_r^z \rangle_\infty = \frac{1}{\chi_1^2} \sum_k \langle u_1 | T(S^z) | u_k \rangle \cdot \langle u_k | T(S^z) | u_1 \rangle \left( \frac{\chi_k}{\chi_1} \right)^{r-2}, \quad (3.52)$$

zu

$$\begin{aligned} \langle S_1^z S_r^z \rangle_\infty &= -\frac{a^2}{(1+|a|)^2} \cdot \left( \frac{1-|a|}{1+|a|} \right)^{r-2} \\ &= -\frac{a^2}{(1-|a|)^2} \cdot (\operatorname{sgn}(1-|a|))^r \cdot e^{-r/\xi_l}, \\ &\text{mit } \xi_l^{-1} = \ln \left| \frac{1+|a|}{1-|a|} \right|. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Hier sei angemerkt, dass die Transfer-Matrix  $T(S^z)$  nicht hermitesch ist.

Es wurde die *Zwei-Punkt-Korrelationslänge*  $\xi_l$  eingeführt, die einen Unordnungspunkt bei  $a = \pm 1$  aufweist. An dieser Stelle überlebt nur der Erwartungswert der Nächste-Nachbarn-Korrelation  $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle_\infty = \frac{1}{4}$ . Der Erwartungswert von  $\langle S_1^z S_r^z \rangle_\infty$  verschwindet für  $r > 2$  vollständig. Die Korrelationsfunktion zeigt ein exponentielles Abklingen in  $r$  mit endlicher Korrelationslänge für alle  $a$ . Für  $|a| > 1$  alterniert die Korrelationsfunktion in Abhängigkeit von  $r$ .

Auch die transversale Korrelationsfunktion zeigt exponentielles Abklingen und die transversale Korrelationsfunktion bleibt ebenfalls endlich ( $a = 0$  sei nicht betrachtet). Es liegt ein

nicht kritisches Modell für alle  $a$  vor. Beide Korrelationslängen bleiben endlich, und das Modell zeigt *keine langreichweitige Ordnung*, d.h.  $\lim_{r \rightarrow \infty} \langle S_1^z S_r^z \rangle = 0$ .

Besonders der exponentielle Verlauf der Korrelationsfunktionen und der nicht entartete Grundzustand des Spin-1-Modells sind wichtige Hinweise auf eine Spin-Energielücke, die von Haldane [Haldane 1983] für die Heisenbergkette vorhergesagt wurde.

Für  $a = 2$  und  $\sigma = -1$  entspricht der Matrix-Produkt-Grundzustand dem VBS-Modell [Affleck u. a. 1987]. Der Hamilton-Operator zeigt die volle  $SO(3)$ -Symmetrie und entspricht dem aus Beispiel 2.16. Die hier vorgestellten Ergebnisse lassen sich also auf das VBS-Modell übertragen und man erhält zum Beispiel als longitudinale Korrelationslänge:

$$\xi_l^{-1} = \ln \left| \frac{1 + |a|}{1 - |a|} \right| = \ln 3 \approx 1.10 \quad (3.54)$$

Auch weitere relevante Größen können direkt durch Einsetzen in obigen Formeln erzielt werden.

### 3.3. Vertex-Zustands-Modelle

Für eine Formulierung von Optimum-Grundzuständen in höheren Dimensionen  $D > 1$  muss das zuvor verwendete Produkt der Matrizen (für die Konstruktion in  $D = 1$ ) verallgemeinert und leicht abgeändert werden. Die hier vorgestellte Definition ist aber, trotz der höheren Dimension, sehr anschaulich und kann intuitiv begriffen werden, da ihr eine grafische Repräsentation zu Grunde liegt.

Zunächst möchte ich wieder auf die eindimensionale Spin-1-Kette schauen, für die auch eine entsprechende grafische Interpretation gegeben ist.

Auf der Kette sind in regelmäßigen Abständen Spin-1-Teilchen angeordnet. Sie bildet also ein einfaches, eindimensionales Gitter. Auf jeden Gitterplatz soll nun ein Vertex angeheftet werden, der in Richtung der nächsten Nachbarn über Bonds mit dem jeweils nächsten Vertex verbunden ist.

Jeder Bond soll nun eine Bondvariable tragen, die im Allgemeinen unterschiedlich viele Zustände annehmen kann. In dem Fall der Spin-1-Kette sollen es zwei Zustände sein, etwa bezeichnet mit einem hereinlaufenden und einem herauslaufenden Pfeil  $\{<, >\}$ .

Die zuvor erarbeiteten Eigenschaften der Matrix-Produkt-Grundzustände übertragen sich dabei nur teilweise auf die Vertex-Zustands-Modelle. Der direkte Vergleich ist daher sehr lehrreich, um die Schwierigkeiten höherdimensionaler Modelle zu verstehen.

Zunächst soll das eindimensionale Modell betrachtet werden und in die angestrebte grafische Darstellung überführt werden. Folgende Identifikation der einzelnen Einträge der Matrix in (3.16) soll dabei gelten:



$$\begin{aligned}
m_{11} &\mapsto \leftarrow \bullet \leftarrow \\
m_{22} &\mapsto \rightarrow \bullet \rightarrow \\
m_{12} &\mapsto \leftarrow \bullet \rightarrow \\
m_{21} &\mapsto \rightarrow \bullet \leftarrow
\end{aligned} \tag{3.55}$$

Dabei korrespondieren jeweils der linke Index mit der linken Bondvariablen und der rechte mit der rechten. So steht z.B. ein Pfeil nach links für eine eins, ein Pfeil nach rechts für eine zwei. Im Fall einer  $3 \times 3$ -Matrix muss noch eine weitere Bondvariable (etwa eine Null) eingeführt werden, sodass dann der Satz  $\{<, 0, >\} (\hat{=} \{-1, 0, 1\})$  den Indizes  $\{1, 2, 3\}$  entspricht. Ein Vertex-Zustands-Modell, bei dem Bonds mit drei Zuständen betrachtet werden, wird in Kapitel 5.2.2 vorgestellt.

Das Multiplizieren der Matrizen zum Matrix-Produkt-Grundzustand überträgt sich zum Aussummieren der inneren Bondvariablen. Dabei werden die Ein-Platz-Vertices „zusammengesteckt“ und alle möglichen Kombinationen addiert. Man schreibt den kontrahierten Vertex dann ohne innere Variable

$$\begin{aligned}
&= \leftarrow \bullet \leftarrow \bullet \rightarrow + \leftarrow \bullet \rightarrow \bullet \rightarrow \\
&\equiv \leftarrow \bullet \bullet \rightarrow
\end{aligned} \tag{3.56}$$

Wendet man diese Möglichkeit der Darstellung auf den im Unterkapitel (3.1) als Beispiel gebrachten Matrix-Produkt-Ansatz an, so erhält man als Werte der einzelnen Vertices Ein-Spin-Zustände. Das Aussummieren führt dann auf die einzelnen Einträge der tensoriell multiplizierten Matrizen. Das Aussummieren der beiden äußeren Bonds miteinander kommt so der Spurbildung gleich. Man erhält eine vollständig äquivalente Darstellung der ursprünglichen Matrixdarstellung.

Damit liegt das notwendige Rüstzeug parat, das Konzept der Matrix-Produkt-Grundzustände auf höhere Dimensionen zu verallgemeinern. Man bildet das zu Grunde liegende Gitter mit Hilfe der Vertices nach, verwendet also in der Regel mehr als nur zwei Bonds. Ein 2D-Quadratgitter kann so durch die folgenden Vertices dargestellt werden

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ \bullet \\ \downarrow \end{array} , \begin{array}{c} \uparrow \\ \bullet \\ \downarrow \end{array} , \text{etc.} \tag{3.57}$$

Analog zum eindimensionalen Fall definiert man die Kontraktion zweier solcher Vertices

durch das Aussummieren der inneren Bondvariablen:

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{ccc}
 \uparrow & & \uparrow \\
 \leftarrow \bullet & \text{---} & \bullet \rightarrow \\
 \downarrow & & \downarrow
 \end{array}
 \equiv
 \begin{array}{ccc}
 \uparrow & & \uparrow \\
 \leftarrow \bullet & \leftarrow \bullet & \rightarrow \\
 \downarrow & & \downarrow
 \end{array}
 \\
 +
 \\
 \begin{array}{ccc}
 \uparrow & & \uparrow \\
 \leftarrow \bullet & \rightarrow \bullet & \rightarrow \\
 \downarrow & & \downarrow
 \end{array}
 \end{array}
 \quad (3.58)$$

Dabei ist das Aussummieren der inneren Variable analog zu dem klassischer Vertex-Modelle. Der Unterschied besteht aber darin, dass Ein-Spin-Zustände statt einfacher Zahlen als „Gewichte“ auftreten. Demnach muss das Produkt der Boltzmann-Gewichte auch durch das Tensor-Produkt im Spinraum ersetzt werden. Diese Ersetzung ist ebenso zu sehen, wie die zuvor bei dem Matrix-Produkt-Ansatz (siehe *tensorielle Multiplikation* Gl. 3.5). Es vergrößert sich auch hier der zu Grunde liegende Hilbertraum.

Aber auch ein Unterschied wird augenfällig. Für höhere Dimensionen, wie hier für das zwei-dimensionale Quadratgitter, wächst die Anzahl der freien Bonds rapide. Dies führt zu einer drastischen Einschränkung der Menge analytisch lösbarer Modelle (vgl. Kap. 3.4).

Der *globale Grundzustand* wird konstruiert, indem man jedem Gitterplatz einen Vertex zuschreibt und alle Bondvariablen aussummiert. Diese Kontraktion aller Vertices ist eine direkte Verallgemeinerung der Definition (3.8).

**Definition 3.59 (Vertex-Zustands-Modell)** Ein globaler Zustand der Form

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{\{\mu\}} \prod_i \begin{array}{c} \mu_2 \\ \mu_3 \bullet \mu_1 \\ \mu_4 \end{array} \quad (3.60)$$

wird *Vertex-Zustands-Modell* genannt.

Dabei muss die Grundzustands-Bedingung (2.6) für das Quadratgitter interpretiert werden als

$$h_{ij} \left[ \begin{array}{c} \mu_2 \\ \mu_3 \bullet \mu_1 \\ \mu_4 \bullet \mu_6 \\ \mu_5 \end{array} \right] = h_{ij} \left[ \begin{array}{cc} \mu_3 & \mu_2 \\ \mu_4 \bullet & \bullet \mu_1 \\ \mu_5 & \mu_6 \end{array} \right] = 0, \quad (3.61)$$

für alle Nächste-Nachbarn  $\langle i, j \rangle$  und alle Bond-Konfigurationen  $\{\mu\}$ . Ist diese Bedingung erfüllt, so ist (3.60) ein Optimum-Grundzustand des globalen Hamiltonian.

Wie bereits oben angedeutet, bleibt dieses Konzept nicht nur auf die eindimensionale Kette und das (zweidimensionale) Quadratgitter beschränkt. Vielmehr kann eine beliebige Topologie zu Grunde liegen, etwa ein Hexagonalgitter, das durch Vertices mit drei „Beinen“ repräsentiert wird:



oder eine (quasi-eindimensionale) Leiter, für die ebenfalls dreibeinige Vertices verwendet werden.



In dem Kapitel 5.2.1 wird auch ein dreidimensionales Modell konstruiert werden, dessen Vertices dann sechs Bonds haben und ein kubisches Gitter formen.

Um eine experimentell untersuchte Substanz theoretisch zu beschreiben, ist im Allgemeinen die Struktur des (Kristall-)Gitters nachzubilden. Dabei ist zu berücksichtigen, wie viele „Wechselwirkungsarme“ auf einen Spin wirken. Schwache Kopplung der Spins, die in einem System vernachlässigt werden können, müssen nicht nachgebildet werden. Dies gilt in der Regel dann, wenn das Verhältnis zwischen Inter- und Intragitteraustausch im Promillebereich liegt<sup>4</sup> [Avenel u. a. 1992].

Ist die Struktur des Gitters dargestellt, so muss jedem Vertex ein Ein-Spin-Zustand zugeschrieben werden, der sich aus der Konfiguration der Bondvariablen ableiten lässt. Die in (2.2) geforderte Rotations-Invarianz in der  $xy$ -Ebene verlangt, dass jedes kontrahierte Paar zweier Spins Eigenzustände zu  $\mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z$  sind. Im einfachsten Fall – da die Bondvariablen nur die beiden Zustände „<“ und „>“ annehmen können – wählt man die folgende

**Rechenvorschrift:** Einem Vertex mit Bondvariablen „<“ und „>“ wird der  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustand  $\alpha |m\rangle$  zugeschrieben mit:

$$m := \frac{1}{2}(\text{Anzahl der auslaufenden Bond-Pfeile} - \text{Anzahl der einlaufenden Bond-Pfeile}), \quad (3.64)$$

dabei wird der Vorfaktor  $\alpha$  allerdings nicht festgelegt. Dieser wird (wie später vorgeführt) so gewählt, dass die lokalen Grundzustandsbedingungen erfüllt werden.

Nach dieser Vorschrift weist man den Vertices (3.57) entsprechend die Spin-Zustände  $|0\rangle$  bzw.  $|1\rangle$  zu. Mit der Rechenvorschrift und der zuvor definierten Kontraktion zweier Vertices ergeben sich so die Zwei-Spin-Zustände

$$\alpha_1 \alpha_2 |m_1, m_2\rangle + \alpha_3 \alpha_4 |m_1 + 1, m_2 - 1\rangle \quad (3.65)$$

<sup>4</sup>Dies ist ein nur ungefährender Wert, der im Einzelfall abweichen kann.

nachdem man aussummiert hat. Wie gewünscht sind diese Zustände auch Eigenzustände zum Operator  $\mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z$ . Der Spin  $S$  muss dabei mindestens so groß sein wie die halbe Koordinationszahl (die Anzahl der nächsten Nachbarn). Ist der Spin  $S$  größer, so muss u.U. eine andere Rechenvorschrift gewählt werden. Platziert man zum Beispiel Spin-3 auf einem Hexagonalgitter (Kapitel 5.2.2), so sind Bondvariablen  $\mu_i \in \{-1, 0, 1\}$  sinnvoll und die Rechenvorschrift würde lauten:

$$\mathbf{m} := \sum_{i=1}^3 \mu_i, \quad (3.66)$$

mit der Einschränkung  $|\mathbf{m}| \leq 3$ . Ordnet man auf dem gleichen Gitter Spin- $\frac{3}{2}$  an, so verwendet man die Rechenvorschrift (3.64). Für einen kleineren Spin als diesen lässt sich das Vertex-Zustands-Modell nicht auf das Hexagonalgitter anwenden. Die Koordinationszahl würde das Zweifache des Spins überschreiten, was unzulässig ist.

**Beispiel 3.67 (Spin-1 Vertex-Zustands-Modell)** Die Vorfaktoren  $\alpha_j$  können nicht aus den Bondvariablen heraus bestimmt werden. Diese müssen so gewählt werden, dass die kontrahierten Zwei-Spin-Zustände nicht die Allgemeingültigkeit des Ansatzes verletzen. Diese Überlegung ist vollständig analog zu der Wahl der Vorfaktoren der Ein-Spin-Zustände aus dem Matrix-Produkt-Ansatz. So ergeben sich im eindimensionalen Fall für das Spin-1 Vertex-Zustands-Modell<sup>5</sup> die folgenden Zustände:

$$\begin{aligned} \leftarrow \bullet \leftarrow & : |0\rangle \\ \rightarrow \bullet \rightarrow & : \sigma \cdot |0\rangle \\ \leftarrow \bullet \rightarrow & : \sqrt{a} \cdot |1\rangle \\ \rightarrow \bullet \leftarrow & : \sqrt{a} \cdot |\bar{1}\rangle \end{aligned} \quad (3.68)$$

Die ersten beiden haben jeweils einen hereinlaufenden sowie einen herauslaufenden Pfeil. Nach Rechenregel (3.64) ist der resultierende Ein-Spin-Zustand also  $|\mathbf{m} = 0\rangle$ . Der Vorfaktor ist nicht festgelegt und wird im ersten Fall zu  $\alpha_1 = 1$  gewählt, im zweiten zu  $\alpha_2 = \sigma$ . Der dritte (bzw. vierte) Vertex hat zwei herauslaufende (bzw. hereinlaufende) Pfeile und korrespondiert daher mit den Größen  $|1\rangle$  (bzw.  $|\bar{1}\rangle$ ). Auch hier muss der Vorfaktor noch gewählt werden. Wählt man  $\alpha_{3,4} = \sqrt{a}$ , so erhält man mit den anderen Vorfaktoren das allgemeine Modell (andere Vorfaktoren führen nur zur Renormierung, wie im Fall des MPA).

### 3.4. Eigenschaften von Vertex-Zustands-Modellen

Im Kapitel (3.1) habe ich den Formalismus der Transfer-Matrizen eingeführt, mit Hilfe dessen sich Erwartungswerte sehr einfach ausrechnen lassen. Die zu betrachtenden Transfer-Matrizen waren dort gewöhnliche Matrizen niedriger Dimension, deren Eigenwerte und Eigenvektoren leicht zu berechnen waren. Leider stimmt dies für Transfer-Matrizen

<sup>5</sup>Es liegen hier zwei Bonds vor, daher muss die Größe des Spins mindestens  $S = 1$  sein.

höherdimensionaler Vertex-Zustands-Modelle nicht mehr. *Die Größe der Transfer-Matrix wächst mit der Systemgröße.* Damit bedarf es zur Berechnung von Erwartungswerten des Lösens eines klassischen Vertex-Modells auf demselben Gitter. In Kapitel 4 stelle ich vergleichend die Abbildung eines quantenmechanischen Modells mittels Trotter-Suzuki-Zerlegung [Trotter 1959, Suzuki 1976b] auf ein klassisches Modell einer Dimension höher vor. Bei der hier verwendeten Methode bleibt die Betrachtung in derselben Dimension.

### 3.4.1. Das korrespondierende klassische Vertex-Modell

Wieder soll ein Vertex-Zustands-Modell eines quadratischen Gitters als Beispiel dienen (die folgenden Aussagen gelten natürlich auch für andere Gitter, z.B. für das Hexagonalgitter etc.). Ein Optimum-Grundzustand sei, wie in (3.60) dargestellt, gegeben. Die Norm des Zustandes schreibt sich dann als:

$$Z = \|\Psi_0\|^2 = \sum_{\{\mu\}, \{\nu\}} \prod_i \left\langle \begin{array}{c} \mu_2 \\ \mu_3 \text{---} \bullet_i \text{---} \mu_1 \\ \mu_4 \end{array} \middle| \begin{array}{c} \nu_2 \\ \nu_3 \text{---} \bullet_i \text{---} \nu_1 \\ \nu_4 \end{array} \right\rangle \quad (3.69)$$

Analog zu der Definition der Transfer-Matrix in einer Dimension folgt die

**Definition 3.70 (Das korrespondierende klassische Vertex-Modell)** *Das korrespondierende klassische Vertex-Modell wird durch die Vertices:*

$$\begin{array}{c} \mu_2 \nu_2 \\ \mu_3 \text{---} \bullet_i \text{---} \mu_1 \\ \nu_3 \\ \mu_4 \nu_4 \end{array} = \left\langle \begin{array}{c} \mu_2 \\ \mu_3 \text{---} \bullet_i \text{---} \mu_1 \\ \mu_4 \end{array} \middle| \begin{array}{c} \nu_2 \\ \nu_3 \text{---} \bullet_i \text{---} \nu_1 \\ \nu_4 \end{array} \right\rangle \quad (3.71)$$

*aufgebaut. Die rechte Seite ist als Skalarprodukt zweier quantenmechanischer Zustände anzusehen, repräsentiert durch die entsprechenden Vertices dieser Zustände.*

Die Vertices tragen nun *zwei unabhängige* Bondvariablen auf jedem Bond. Wie im Formalismus der Transfer-Matrizen ist es möglich, wieder eine Variablensubstitution der Paare  $\{\mu_i, \nu_i\}$  zu Variablen  $\{k_i\}$  durchzuführen. Die einzelnen Vertices dieses korrespondierenden klassischen Vertex-Modells sind wieder einfache Zahlen <sup>6</sup>. Zusammenfassend führt das auf die

**Aussage 1** *Die Zustandssumme des korrespondierenden klassischen Vertex-Modells (3.71) ist gegeben durch das innere Produkt  $Z = \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle$  des Optimum-Grundzustandes  $|\Psi_0\rangle$ .*

Dem Vorgehen aus Kapitel (3.1) folgend, definiert man für eine beliebige, lokale Observable  $A_i$ , die auf einen Gitterplatz  $i$  wirkt, den *assoziierten korrespondierenden klassischen Vertex* durch:

<sup>6</sup>Im Gegensatz zu den Vertices (3.57), die Spin-Zustände darstellen.

$$\begin{matrix} (\mu_1, \nu_1) \\ (\mu_2, \nu_2) \end{matrix} \Gamma_{A_i} \begin{matrix} (\mu_3, \nu_3) \\ (\mu_4, \nu_4) \end{matrix} = \left\langle \begin{array}{c} \mu_2 \\ \mu_3 \text{---} \bullet \text{---} \mu_1 \\ | \\ \mu_4 \end{array} \Big| \mathbf{A}_i \Big| \begin{array}{c} \nu_2 \\ \nu_3 \text{---} \bullet \text{---} \nu_1 \\ | \\ \nu_4 \end{array} \right\rangle \quad (3.72)$$

Dabei kann der Operator  $A_i$ , statt auf die *Spin-Zustände* wirkend, auf die *Bondvariablen* des korrespondierenden klassischen Vertex-Modells wirkend, reinterpretiert werden. Daher folgt die zweite

**Aussage 2** *Quantenmechanische Erwartungswerte des Vertex-Zustands-Modells korrespondieren mit den statistischen Erwartungswerten des klassischen Vertex-Modells.*

Natürlich können auf beliebig vielen Gitterplätzen Operatoren  $A_{i_1}^{(1)}, A_{i_2}^{(2)}, \dots, A_{i_n}^{(n)}$  wirken und man erhält entsprechend den statistischen Erwartungswert des korrespondierenden klassischen Vertex-Modells zum Matrix-Element

$$\langle \Psi_0 | A_{i_1}^{(1)}, A_{i_2}^{(2)}, \dots, A_{i_n}^{(n)} | \Psi_0 \rangle \quad (3.73)$$

Verwendet man eine Rechenregel gleich oder ähnlich der in (3.64), die einem Vertex einen Spin-Zustand zuschreibt, so folgt für das korrespondierende klassische Vertex-Modell der

**Erhaltungssatz:** Nur Vertices, deren Summe auslaufender Pfeile auf den  $\mu$ -Bonds mit der auf den  $\nu$ -Bonds übereinstimmt, haben nicht-verschwindendes Gewicht.

Für eine Rechenvorschrift (3.66) bedeutet dies, dass der  $\mathbf{m}$ -Wert auf den  $\mu$ -Bonds mit dem auf den  $\nu$ -Bonds übereinstimmen muss. Beides resultiert aus der Tatsache, dass das innere Produkt  $\langle \mathbf{m}_1 | \mathbf{m}_2 \rangle$  unterschiedlicher  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustände Null ist.

Im Kapitel über Matrix-Produkt-Ansätze wurde gezeigt, wie Erwartungswerte analytisch zu bestimmen sind. Allgemein gültige Rechenvorschriften wurden angegeben. Leider sind klassische Vertex-Modelle in zwei oder mehr Dimensionen in der Regel nicht analytisch lösbar. Als eine der wichtigsten Ausnahmen seien hier *Bethe-Ansatz*-lösbare Modelle [Bethe 1931] und das Modell *freier Fermionen* genannt. Es ist daher notwendig, zur Berechnung physikalischer Größen auf die Simulation der korrespondierenden klassischen Vertex-Modelle mittels Monte-Carlo-Algorithmen zurückzugreifen.

An dieser Stelle möchte ich noch einmal auf die Besonderheit dieser Abbildung eingehen. Wie ich im Kapitel 4.4.1 beschreibe, ist es möglich,  $D$ -dimensionale quantenmechanische Modelle auf  $D + 1$ -dimensionale klassische Modelle abzubilden. Die hier verwendete Abbildung belässt das Modell aber in der ursprünglich betrachteten Dimension. Sie führt von einem Vertex-Zustands-Modell mit  $m$  Zuständen pro Bond auf ein klassisches Vertex-Modell mit  $2m$  Zuständen pro Bond. Durch die Trotter-Suzuki-Abbildung aus Kapitel 4.4.1 wird

deutlich, dass die hier verwendete Abbildung nur für sehr spezielle quantenmechanische Modelle verwendet werden kann.

Für die Simulation dieser Modelle mittels Monte-Carlo-Simulationen wird es einfacher sein, auf ein Vertex-Modell zurückzugreifen, das in einem gewissen Sinn *zweilagig* ist (siehe Kapitel 4.4.1).

### 3.5. Entartung der Grundzustände

In der vorliegenden Arbeit möchte ich mich auf Optimum-Grundzustände der Vertex-Zustands-Modelle beschränken, die eine niedrige, von der Systemgröße unabhängige Entartung haben. Im Konkreten werde ich nur Modelle beschreiben, die auf endlichen Gittern einen einfachen Grundzustand haben, oder deren Grundzustand exakt zweifach entartet ist. Im thermodynamischen Limes besteht überdies die Möglichkeit, dass die Modelle einen Quanten-Phasenübergang zeigen, der zu einer höheren Entartung führt.

Bei der Konstruktion der einzelnen Grundzustände werde ich an geeigneter Stelle auch immer wieder darauf hinweisen, was eine Abänderung der Konstruktionsvorschrift für die Entartung bedeutet.

Allen Modellen gemein ist die Anforderung, die Ränder periodisch zu schließen, da ansonsten die freien Bondvariablen ungebunden jeden Zustand annehmen könnten. Damit führt jeder freie Bond, der  $n$  Zustände annehmen kann, zu einer  $n$ -fachen Entartung.

H.Niggemann *et al.* haben in [Niggemann u. a. 1997] den Beweis geliefert, dass der Vertex-Produkt-Zustand des Spin- $\frac{3}{2}$  auf dem Hexagonalgitter nicht entartet ist. Im Anhang C vollziehe ich die Beweisidee anhand des Spin-2 auf dem Quadratgitter nach und verweise für den rigorosen Beweis auf die angegebene Veröffentlichung.

Der Beweis macht auch klar, warum die anderen hier untersuchten Modelle nur die entsprechende in den Kapiteln angegebene Entartung besitzen.

Im thermodynamischen Limes kann der Grundzustand einen Quanten-Phasenübergang zeigen. Die Entartung wächst in diesem Fall korrespondierend zur gebrochenen Symmetrie.





## 4. Monte-Carlo-Simulationen

Wie in dem Kapitel über die Methode der *Vertex-Zustands-Modelle* und der daraus abgeleiteten *korrespondierenden klassischen Vertex-Modellen* verständlich wird, ist ein analytischer Zugang zu Erwartungswerten der, in dieser Arbeit betrachteten, höherdimensionalen Modelle nicht möglich. Um dennoch aussagekräftige Werte für die quantenmechanischen Erwartungswerte zu erhalten, habe ich die korrespondierenden klassischen Vertex-Modelle mittels Monte-Carlo-Simulationen untersucht. Das Ergebnis sind „exakte numerische Daten (abgesehen von statistischen Fehlern)“ ([Binder und Heermann 1988], Seite 1) exakt bekannter Modelle.

Andere numerische Methoden, wie zum Beispiel die Dichte-Matrix-Renormierungsgruppe [Wilson 1975, White und Noack 1992], eignen sich zwar zum Teil sehr gut für eindimensionale Probleme, können aber auf höhere Dimensionen nur schlecht angewendet werden. Im Folgenden sollen daher die grundlegenden Ideen von Monte-Carlo-Simulationen erläutert und die konkrete Implementierung zur Simulation der korrespondierenden klassischen Vertex-Modelle vorgestellt werden. Dabei zeigt sich, dass diese Simulationen schwieriger sind als die für Ising-artige Modelle, wegen der hier vorliegenden topologischen Nebenbedingungen.

### 4.1. Monte-Carlo-Integration

Wird die Physik eines Problems mittels eines Hamiltonian beschrieben, so lassen sich zumindest im Prinzip daraus Erwartungswerte physikalischer Observablen gewinnen, indem man folgende Formel auswertet:

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \text{Spur} (\mathbf{A} e^{-\beta H}), \quad \text{mit } \mathbf{Z} = \text{Spur} (e^{-\beta H}) = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad \text{und } \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (4.1)$$

In der Regel besteht nun aber das Problem darin, dass die Spurbildung im allgemeinen Fall nicht möglich ist, da zum Beispiel nur selten alle Energie-Eigenwerte  $E_i$  bekannt sind.

Selbst im Fall, dass alle Energie-Eigenwerte bekannt sind oder berechnet werden können, heißt das noch nicht, dass die Summen aus Gleichung (4.1) auch ausgeführt werden können. Bei klassischen Modellen der statistischen Physik können die Energie-Eigenwerte direkt aus den einzelnen Konfigurationen abgelesen werden, die in dem Modell auftreten können. Dabei können je nach Modell *kontinuierliche* oder *diskrete* Zustandsvariable zu einer Konfiguration führen.

**Beispiel 4.2 (Ising-Modell)** Gegeben sei ein Ising-Modell auf einem zweidimensionalen Gitter der Abmessung  $(N, M)$ , das durch folgenden Hamilton-Operator beschrieben werden soll:

$$\mathbf{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (4.3)$$

mit Spin-Variablen  $s_i, s_j \in \{-1, 1\}$ ,  $\forall_i \in \{(1, 1), \dots, (N, M)\}$ .

In diesem Fall führt jede Konfiguration von Spins zu einem Energie-Eigenwert und die Zustandssumme ergibt sich zu

$$\mathbf{Z} = \text{Spur}(e^{-\beta\mathbf{H}}) = \sum_{\text{Konf.}} e^{-\beta\mathbf{H}}, \text{ mit } \sum_{\text{Konf.}} = \sum_{s_{1,1}=\pm 1} \sum_{s_{1,2}=\pm 1} \dots \sum_{s_{N,M}=\pm 1}. \quad (4.4)$$

Ebenso lassen sich Erwartungswerte von Observablen, hier als eine mögliche Observable die Magnetisierung

$$\mathbf{m} := \frac{1}{V} \sum_i s_i, \text{ mit } V = M \cdot N, \quad (4.5)$$

bestimmen:

$$\langle \mathbf{m} \rangle = \frac{\sum_{\text{Konf.}} \sum_i s_i e^{-\beta\mathbf{H}}}{V\mathbf{Z}}. \quad (4.6)$$

#### 4.1.1. „simple sampling“

Bei der oben erwähnten Erwartungswert-Berechnung liegt also die Schwierigkeit nicht etwa in der Bestimmung einzelner Energie-Eigenwerte, was bei quantenmechanischen Modellen oft das Problem ist, sondern darin die Summe auszuführen. Schon bei relativ kleinen Gittern steigt die Zahl der aufzusummierenden Konfigurationen schnell an. Bei einem Gitter der Kantenlängen  $N$  und  $M$  (dem Volumen  $V := M \cdot N$ ) ergibt sich die Anzahl beim Ising-Modell zu  $= 2^{N \cdot M} = 2^V$ . Dies spiegelt einen exponentiellen Anstieg mit der Gittergröße wider. Selbst auf einem modernen Computer ist schnell die Grenze (z.B. des aufgrund des dafür notwendigen Speicherbedarfs) erreicht, bei der die Rechenzeit für solche Summationen eine Auswertung unmöglich macht.

Mit der Monte-Carlo-Methode lassen sich jedoch Schätzwerte für die Summen im Zähler und Nenner der Gleichung (4.6) finden: Mittels einfacher Zufallszahlen erzeugt man eine Konfiguration  $X$  (in obigem Beispiel eine Konfiguration von Spins), die man in Gleichung (4.6) einsetzt und als einen Summanden zur Schätz-Summe beitragen lässt. Wiederholt man dies  $\mathfrak{N}$  mal, so ergibt sich der Schätzwert der Zustandssumme zu:

$$\mathbf{Z} = \text{Spur}(e^{-\beta\mathbf{H}}) \approx \frac{2^V}{\mathfrak{N}} \sum_{i=1}^{\mathfrak{N}} e^{-\beta\mathbf{H}(X_i)} \quad (4.7)$$

und der Erwartungswert der Magnetisierung damit zu:

$$\langle \mathbf{m} \rangle \approx \frac{\frac{2^V}{\mathfrak{N}} \sum_{i=1}^{\mathfrak{N}} m(X_i) e^{-\beta H(X_i)}}{V \mathbf{Z}} \approx \frac{\sum_{i=1}^{\mathfrak{N}} m(X_i) e^{-\beta H(X_i)}}{V \sum_{i=1}^{\mathfrak{N}} e^{-\beta H(X_i)}}. \quad (4.8)$$

Es werden also die Summen mittels gleichverteilter Zufallszahlen approximiert. Man geht hier davon aus, dass man so für eine genügend große Anzahl an Zufallskonfigurationen einen guten Näherungswert erhält. Dies gelingt tatsächlich in zufriedenstellender Weise. Allerdings hat die Methode des „simple sampling“ einen gravierenden Nachteil, der klar wird, wenn man sich die Beiträge der einzelnen Konfigurationen zur Gesamtsumme genauer ansieht. Die Abbildung 4.1(a) zeigt schematisch einen Ausschnitt eines Phasenraums. Dabei bedeuten rote Farben Bereiche des Phasenraums mit großem Boltzmannfaktor und blaue die mit geringem Gewicht. Die Punkte stellen zufällig erzeugte Konfigurationen dar. *Nur die wenigsten Konfigurationen tragen mit einem großen Boltzmannfaktor entscheidend zum Gewicht der Summe bei.*

Es werden also mittels der Zufallszahlen viele Konfigurationen erzeugt, die nur geringen Einfluss auf das Ergebnis haben, aber ebenso wie die mit hohem Gewicht Rechenzeit in Anspruch nehmen. Wie eklatant dieses Verhältnis zur Verlangsamung einer Monte-Carlo-Messung führt, soll kurz an einem periodisch geschlossenen 2D-Ising-Modell der Kantenlängen  $L \cdot L$  veranschaulicht werden. Nimmt man nur die Konfigurationen mit dem größten Gewicht, und versucht man damit 90% der Zustandssumme zu erreichen, so sind mit steigender Gittergröße prozentual immer weniger Zustände dazu nötig. Umgekehrt heißt das aber auch, dass man mit einer gleichverteilten Zufallskonfiguration nur selten diese „wichtigen“ Zustände zieht. So muss man bei dem Ising-Modell, welches nur vier Gitterplätze beinhaltet ( $L = 2$ ), 87,5% der Zustände aufsummieren, um auf 90% des Werts der Zustandssumme zu kommen. Bei einer Seitenlänge von  $L = 4$  sind hierzu nur noch 3% vonnöten und bei  $L = 6$  sind hierzu keine 0.02% mehr aufzusummieren. Bei Gittern mit  $80 \cdot 80$  Gitterplätzen ist es einsichtig, dass die Methode des „simple sampling“ nicht sehr effektiv sein kann.

#### 4.1.2. „importance sampling“

Die Lösung ist, die Physik auf dem Rechner dahingehend nachzubilden, dass Konfigurationen genau mit ihrem Boltzmannfaktor als relativem Gewicht erzeugt werden. Es muss also eine Konfiguration  $X_j$  mit der Wahrscheinlichkeit

$$W(X_j) = \frac{1}{\mathbf{Z}} e^{-\beta H(X_j)} \quad (4.9)$$

erzeugt werden. Die Schwierigkeit hierbei ist allerdings die, dass in dieser Formel die Zustandssumme selber auftritt, die noch unbekannt ist.

Der Ausweg aus diesem Dilemma ist die Erzeugung eines „Wegs“, bei dem eine Konfiguration  $X_{j+1}$  aus einer vorhergehenden  $X_j$  erzeugt wird. Diesem „Weg“ soll ein stochastischer

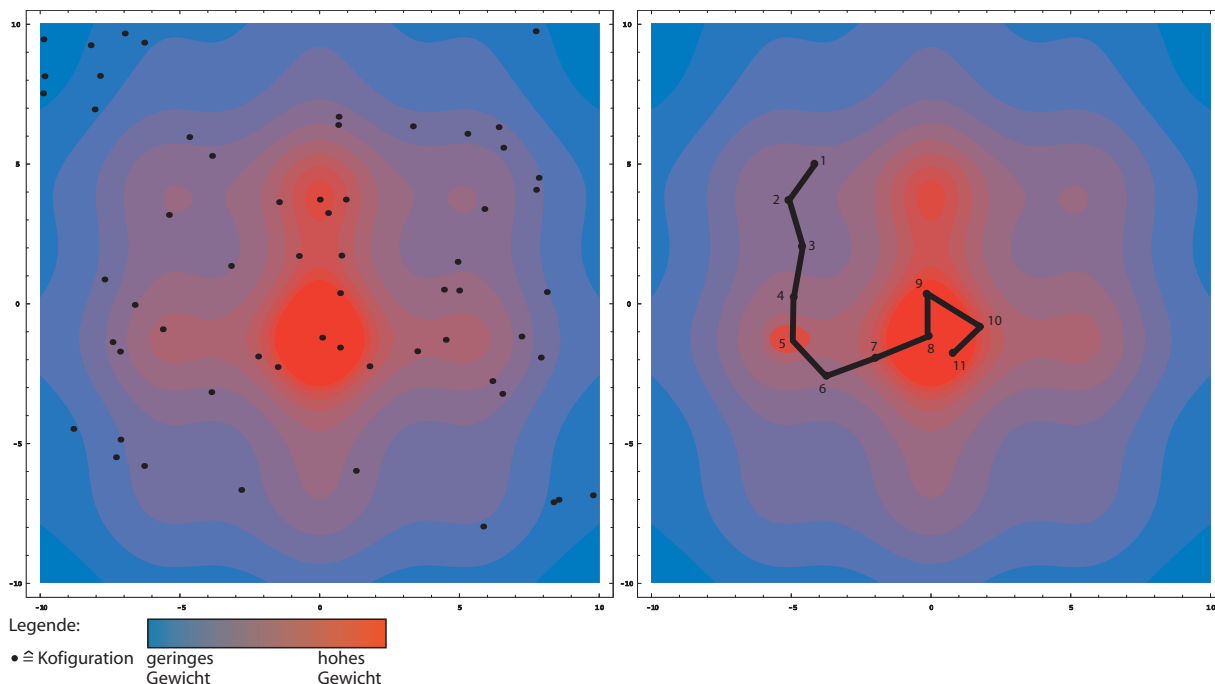


Abbildung 4.1.: Beispielhafter Phasenraum in zwei Dimensionen. Rote Farben bedeuten hohes Boltzmanngewicht, blaue niedriges Boltzmanngewicht. Beim *simple sampling* (links, a)) treffen nur wenige zufällig gezogene Konfigurationen ein hohes Gewicht. Beim *importance sampling* (rechts, b)) führt die Markov-Kette in Bereiche hohen Gewichts.

Prozess zu Grunde liegen. Was man hierdurch gewinnt, ist die Tatsache, dass nun das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten berechnet werden kann:

$$\frac{W(X_{i+1})}{W(X_i)} = \frac{\exp(-\beta H(X_{i+1}))}{\exp(-\beta H(X_i))}. \quad (4.10)$$

Wichtig ist hier, dass die (unbekannte) Zustandssumme weggekürzt werden kann, sodass man das Verhältnis berechnen kann.

In der (klassischen) Physik entspricht ein solcher Weg einfach der Trajektorie im Phasenraum des Teilchens, das durch die Bewegungsgleichung deterministisch bestimmt ist (bei gegebenen Anfangsbedingungen). Bei der Monte-Carlo-Simulation wird eine solche Dynamik künstlich dem System aufgeprägt. Wesentlicher Unterschied zur physikalischen Dynamik ist jedoch, dass nur endliche Zeitschritte betrachtet werden. Weiter ist der Prozess nicht deterministisch, sondern stochastisch bestimmt. Die hier verwendeten Zeitschritte haben nichts mit der physikalischen Zeit zu tun. Die Zeitskala soll daher zur Unterscheidung *Monte-Carlo-Zeit* genannt werden.

An diesen stochastischen Prozess müssen natürlich bestimmte Bedingungen geknüpft sein, damit tatsächlich jede Konfiguration mit dem Boltzmannfaktor geteilt durch die Zustands-summe als Wahrscheinlichkeit erzeugt wird.

## 4.2. Metropolis-Algorithmus

### 4.2.1. Markov-Kette

Der stochastische Prozess, der hier ins Auge gefasst werden soll, ist die sog. *Markov-Kette (erster Ordnung)*.

Eine Markov-Kette hat kein „Gedächtnis“; so soll die Konfiguration  $X_{i+1}$ , die der Konfiguration  $X_i$  folgt, nicht von den Konfigurationen  $X_j$  mit  $j < i$  abhängen. In diesem Sinne ist der (normale) *random-walk* eine Markov-Kette erster Ordnung, der *self-avoiding-random-walk* hingegen nicht, da hier kein bereits besuchter Gitterpunkt erneut betreten werden darf. Es werden alle Konfigurationen  $X_{i+1}$  ausgeschlossen, die bereits einmal angenommen wurden ( $X_{i+1} \notin \{X_j \mid \forall j < i + 1\}$ ).

Alle statistischen Eigenschaften der Markov-Kette sind vollständig durch die Festlegung der Übergangswahrscheinlichkeit  $W(Y, X)$  von einer Konfiguration  $X$  zu einer anderen  $Y$  erfasst. Es muss also  $W(Y, X)$  so festgelegt werden, dass die Konfigurationen gemäß der Boltzmannverteilung erzeugt werden. Hierzu müssen an die Übergangswahrscheinlichkeit drei Forderungen gestellt werden:

#### i) Normierung:

$$\sum_Y W(Y, X) = 1, \quad \forall X. \quad (4.11)$$

Dies läßt sich auch so interpretieren, dass es genau eine Nachfolgekonfiguration  $Y$  gibt.

#### ii) Ergodizität:

$$W(Y, X) > 0, \quad \forall X, Y. \quad (4.12)$$

Jede möglich Konfiguration muss auch mit endlicher Wahrscheinlichkeit von jeder anderen Konfiguration aus erreicht werden können. Dabei kann die Konfiguration  $Y$  über endlich viele Schritt aus  $X$  hervorgehen, auch wenn zum Beispiel direkte Übergänge von  $X$  nach  $Y$  ausgeschlossen sind.

iii) „Stabilität“/„Stationarität“: Der Boltzmannfaktor ist Eigenvektor mit Eigenwert 1 von  $W(Y, X)$ :

$$\sum_X W(Y, X)B(X) = B(Y), \quad \forall Y, \quad (4.13)$$

dabei ist  $B(Y) = \frac{1}{Z}e^{-\beta H(Y)}$

Sind diese Bedingungen gegeben, dann wird für große (Monte-Carlo-) Zeiten  $t$  die Boltzmannverteilung erreicht. In Formeln:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|V_t - B\| = 0, \quad \text{mit} \quad \|V_t - B\| = \sum_X |V_t(X) - B(X)|, \quad (4.14)$$

wenn mit  $V_0(X)$  eine Start-Verteilung und mit  $V_t(X)$  eine Verteilung zum Zeitpunkt  $t$  bezeichnet wird. Eine Folge-Verteilung ergibt sich dann aus:  $V_{t+1}(X) = \sum_X |V_t(X) - B(X)|$ .

Es sei noch erwähnt, dass eine hinreichende Bedingung für die Forderung der Stabilität (Punkt iii)) das sogenannte *detaillierte Gleichgewicht* (*detailed balance*) ist, was man in Formeln ausgedrückt so schreiben kann:

$$\frac{W(X, Y)}{W(Y, X)} = \frac{B(X)}{B(Y)}, \quad \forall X, Y \quad (4.15)$$

Die Gleichung drückt das Gleichgewicht des Wahrscheinlichkeitsflusses zwischen den Zuständen  $X$  und  $Y$  aus.

#### 4.2.2. Metropolis-Algorithmus

Im vorherigen Abschnitt wurden die Eigenschaften einer *Markov-Kette* näher beleuchtet. In diesem Abschnitt soll ein konkreter Algorithmus zur Bildung einer solchen Markov-Kette vorgestellt werden.

Von Vorteil für eine Computer-Simulation sind einfache und vielseitig einsetzbare Algorithmen, wie der in [Metropolis u. a. 1953] vorgestellte *Metropolis-Algorithmus*. Metropolis *et al.* wendeten diesen zuerst auf die Zustandsberechnung von einzelnen, untereinander wechselwirkenden Molekülen an. Heute ist der Metropolis-Algorithmus einer der am besten etablierten Algorithmen für Monte-Carlo-Simulationen.

Die Übergangswahrscheinlichkeit  $W(Y, X)$  (siehe Abschnitt 4.2.1) wird zunächst in zwei Teile aufgeteilt, wobei der eine  $T(Y, X)$  die Wahrscheinlichkeit beschreibt, von einer vorliegenden Konfiguration  $X$  aus eine neue Konfiguration  $Y$  vorzuschlagen. Entscheidend neu ist nun aber der zweite Teil, der mit der Wahrscheinlichkeit  $A(Y, X)$  darüber entscheidet,

ob der Vorschlag auch angenommen wird. Alternativ dazu wird die alte Konfiguration beibehalten. Es ergibt sich für die Übergangswahrscheinlichkeit die Form:

$$W(Y, X) = A(Y, X)T(Y, X) + \left(1 - \sum_U A(U, X)T(U, X)\right) \delta(X, Y). \quad (4.16)$$

Folgende Forderungen an die Funktionen  $T(Y, X)$  und  $A(Y, X)$  stellen die Erfüllung der Punkte i) bis iii) aus dem Abschnitt über Markov-Ketten sicher:

$$\sum_Y T(Y, X) = 1, \quad \forall X, \quad (4.17)$$

$$T(X, Y) = T(Y, X), \quad (4.18)$$

$$A(Y, X) = \min\left(1, e^{-\beta(H(Y)-H(X))}\right). \quad (4.19)$$

Der Punkt *Normierung* ist dabei trivial einzusehen. Auch lässt sich das *detaillierte Gleichgewicht* einfach nachrechnen. Die *Ergodizität* selber lässt sich nicht alleine aus den obigen Forderungen zeigen; die Funktion  $T(Y, X)$  muss hierzu genauer bekannt sein.

Es sei noch erwähnt, dass Gleichung (4.19) nicht die einzige Alternative für die Wahl der Akzeptanzwahrscheinlichkeit ist. Als eine einfache Modifikation lässt sich die Akzeptanzwahrscheinlichkeit wie sie in (4.19) gegeben ist mit einer Konstanten  $q \in \{0, 1\}$  multiplizieren, was in der Regel aber nur zu einer Verschlechterung der Performance des Algorithmus führt.

Die Markov-Kette, die mit Hilfe eines Metropolis-Algorithmus erzeugt wird, liefert nun Folgendes: Von einem zufällig gewählten Startpunkt (siehe Abb. 4.1.b, Punkt 1) aus läuft die Markov-Kette im Phasenraum wahrscheinlich zu Punkten mit höherem Gewicht ( $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow \text{etc.}$ ). Damit eine solche Kette aber nicht in lokalen Maxima der Boltzmannngewichte „hängenbleibt“ (Punkt 5) müssen „hin-und-wieder“ auch Konfigurationen mit geringerem Gewicht angenommen werden (Schritt  $5 \rightarrow 6$ ), was (nach einigen Schritten) aus lokalen Maxima herausführen kann. Die Dynamik wird so zu dem Bereich des Phasenraums höchster Boltzmannngewichte laufen (aber dort nicht statisch enden). Da der Metropolis-Algorithmus eine Markov-Kette mit oben beschriebenen Forderungen erzeugt, werden für lange Zeiten neue Konfigurationen gemäß der Boltzmann-Verteilung erzeugt. Der Nachteil des „simple sampling“, viele Konfigurationen mit verschwindend geringem Gewicht zu erzeugen, tritt so nicht auf und der Algorithmus wird entsprechend effektiver. Zur Untersuchung der in dieser Arbeit vorgestellten Modelle, habe ich mich daher für die Implementierung des Metropolis-Algorithmus in der Form (4.16)-(4.19) entschieden.

### 4.3. Phasenübergänge und Monte-Carlo-Simulationen

#### 4.3.1. Die Methode des „Finite-size-scaling“

Monte-Carlo-Simulationen können auf dem Computer immer nur für endliche Systemgrößen durchgeführt werden. Dies liegt in der Natur der Sache, da ein unendlich großes System zum Beispiel unendlich viel Speicherbedarf hätte. Ebenso würde die Simulationszeit, um jeden Punkt auch nur einmal einem Monte-Carlo-Schritt zu unterwerfen, unendlich werden. (Quanten-)Phasenübergänge zeichnen sich unter anderem durch Singularitäten in der freien Energie oder durch divergierende Korrelationslängen aus. In einem endlichen System können diese Singularitäten nicht auftreten, da eine endliche Summe analytischer Größen analytisch bleibt. Dies macht die Problematik bei der Simulation von Systemen endlicher Größe deutlich. Die Methode des „Finite-size-scaling“ ermöglicht es, durch die Auswertung der systematischen Abhängigkeit verschiedener Systeme von der Systemgröße  $L$  Werte für Größen in der Nähe eines kritischen Punktes zu erhalten.

Unendlichen System mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen, bei denen die Korrelationslänge divergiert, zeigen ähnliches Verhalten, da mikroskopische Unterschiede auf der Skala der Korrelationslänge keinen Einfluss mehr nehmen. In diesem Fall hängen bestimmte Eigenschaften nur von der Dimension  $D$  des Systems und den Symmetrien der Wechselwirkungen ab. Auf dieser Tatsache beruht die Theorie der Universalität von Systemen. Lässt sich ein System in eine Universalitätsklasse einordnen, so kann man daraus zum Beispiel ablesen, mit welchem kritischen Exponenten sich der Ordnungsparameter in der Nähe des kritischen Punktes öffnet. Für die Magnetisierung als Ordnungsparameter kann dieses Verhalten mit dem kritischen Exponenten  $\beta$  angegeben werden:

$$m \propto |t|^\beta, \quad (4.20)$$

wobei  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$  die relative Entfernung zum kritischen Punkt bezeichnet, mit  $T_c$  als kritische Temperatur<sup>1</sup>. Wie bereits erwähnt, zeichnet sich der Phasenübergang zweiter Ordnung durch die Divergenz der entsprechenden Korrelationslänge aus, für die eine ähnliche Abhängigkeit wie in Formel (4.20) angegeben werden kann:

$$\xi \propto |t|^{-\nu}, \quad (4.21)$$

mit einem anderen kritischen Exponenten  $\nu$ .

In den obigen Formeln tritt neben den zu bestimmenden kritischen Exponenten auch der kritische Punkt selber auf. Damit diese Größen korrekt bestimmt werden können, müssen Systeme im thermodynamischen Limes untersucht werden.

<sup>1</sup>Bei Systemen, bei denen der Phasenübergang thermisch getrieben ist, ist dies die kritische Temperatur, bei Quanten-Phasenübergängen (bei  $T = 0$ ) der Parameterwert, bei dem der Phasenübergang eintritt. Wird etwa das System mittels Druckänderungen durch den Phasenübergang getrieben, so wird der kritische Punkt durch den kritischen Druck  $p_c$  charakterisiert.



Der Schwierigkeit, den kritischen Punkt  $T_c$  genau zu bestimmen, kann man durch Einsetzen der Gleichungen (4.20) und (4.21) ineinander entgehen und man erhält:

$$m \propto \xi^{-\frac{\beta}{\nu}} \quad (4.22)$$

Wenn man davon ausgeht, dass diese Formel auch für Systeme  $L < \infty$  gilt, solange nur die Korrelationslänge nicht an die Nähe der Systemgröße kommt<sup>2</sup>,  $\xi \ll L$ , so kann man die obige Formel umschreiben zu:

$$m = \xi^{-\frac{\beta}{\nu}} m_0(L/\xi), \quad (4.23)$$

wobei  $m_0$  eine dimensionslose Funktion darstellt, für die gilt:

$$m_0(x) \propto \begin{cases} \text{const.}, & x \gg 1; \\ x^{-\frac{\beta}{\nu}}, & x \rightarrow 0. \end{cases} \quad (4.24)$$

Die genaue Form, wie  $m$  abgeschnitten wird, steckt dabei in der funktionalen Form von  $m_0$ . Schaut man sich die Gleichung (4.23) an, so erkennt man, dass alle wichtigen Informationen über die Abhängigkeit des Systems von der Größe  $L$  bereits in dieser Formel enthalten sind. Allerdings enthält diese Form noch die Korrelationslänge in Abhängigkeit von der Entfernung zum kritischen Punkt  $\xi(t)$  für das *unendliche* System. Diese Größe ist nicht bekannt.

Aus diesem Grund ist es hilfreich, eine weitere dimensionslose Größe einzuführen, die die Gleichung (4.23) in die Form

$$m(t) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} \tilde{m}\left(L^{\frac{1}{\nu}} t\right), \text{ mit } t > 0 \quad (4.25)$$

umschreibt, wenn die dimensionslose Funktion als:

$$\tilde{m}(x) = x^{\beta} m_0(x^{\nu}) \quad (4.26)$$

definiert wird. Dabei wird die in Gleichung (4.25) eingeführte Funktion  $\tilde{m}(x)$  als „scaling function“, also als Skalenfunktion bezeichnet.

In einer Monte-Carlo-Simulation wird nun die Magnetisierung  $m_L$  für eine gegebene Systemgröße  $L$  für unterschiedliche Werte  $t$  gemessen, also in unterschiedlichen Entfernungen zum kritischen Punkt. Dabei ist es notwendig, nicht zu weit vom kritischen Punkt entfernt zu sein, was in Gleichung (4.24) mit  $m_0(x) \propto x^{-\frac{\beta}{\nu}}$ , für  $x \rightarrow 0$  zum Ausdruck gebracht wurde. Stellt man Gleichung (4.25) ein wenig um, so erhält man:

$$\tilde{m}\left(L^{\frac{1}{\nu}} t\right) = m_L(t) L^{\frac{\beta}{\nu}}. \quad (4.27)$$

<sup>2</sup>Diese Annahme ist sinnvoll, da die Begrenzung des Systems nicht spürbar ist.

Man erhält in der Monte-Carlo-Simulation also verschiedene Werte der Skalierungsfunktion in Abhängigkeit der Skalierungsvariablen  $x = L^{\frac{1}{\nu}} t$ . Da die numerisch bestimmten Skalierungsfunktionen für unterschiedliche Systemgrößen die gleichen sein sollen, werden diese, aufgetragen gegen  $tL^{1/\nu}$ , bei der richtigen Wahl der Exponenten  $\nu$  und  $\beta$  und der korrekten Wahl des kritischen Punktes<sup>3</sup>, für alle Systemgrößen übereinander zu liegen kommen. Dieses Verfahren ermöglicht es so, sowohl den kritischen Punkt als auch die kritischen Exponenten sensibel zu bestimmen.

Ein Beispiel für die Durchführung einer Finite-size-scaling Analyse ist in Abbildung 5.5 aus Kapitel 5.1 dargestellt. Hier konnten die Ergebnisse, die bereits auf einem endlichen Gitter erzielt wurden, bestätigt werden. Die Ergebnisse werden im entsprechenden Kapitel genauer erläutert.

Auch für andere Größen wie die Suszeptibilität oder die spezifische Wärme lassen sich entsprechende Skalierungsfunktionen angeben:

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\gamma} t) \quad (4.28)$$

$$c = L^{\alpha/\nu} \tilde{c}(L^{1/\gamma} t) \quad (4.29)$$

### 4.3.2. Phasenübergänge erster Ordnung in Monte-Carlo-Simulationen

Im vorherigen Abschnitt wurde erläutert, wie man mit Hilfe des Finite-size-scaling kontinuierliche Phasenübergänge bei Monte-Carlo-Simulationen genauer untersucht und so die Problematik eines endlichen Gitters in der Simulation beseitigen kann. Auch Systeme, bei denen Phasenübergänge erster Ordnung auftreten können, leiden unter der Beschränkung der Gittergröße.

Wenn sich ein Phasenübergang erster Ordnung durch einen Sprung in der Magnetisierung bemerkbar macht, so tritt bei jedem endlichen System eine Abrundung des Sprungs auf [Imry 1980, Privman und Fisher 1985]. Bei einem endlichen System sieht man also den, für einen Phasenübergang erster Ordnung charakteristischen, Sprung in der entsprechenden Größe nicht. Im Gegensatz zu kritischen Punkten divergiert die Korrelationslänge am Punkt des Phasenübergangs erster Ordnung nicht. Universelle Exponenten sind nicht zu finden, weshalb ein finite-size-scaling wie in Abschnitt 4.3.1 nur bedingt anwendbar ist. Zwei effektive Methoden, einen Phasenübergang erster Ordnung eindeutig zu identifizieren, möchte ich in den nächsten Abschnitten vorstellen.

<sup>3</sup>Die richtige Wahl des kritischen Punktes (zum Beispiel im Sinne einer genauen Bestimmung) ist insoweit entscheidend, als dieser in  $t$  einfließt.

### Messung der Verteilung der Boltzmanngewichte

Ein Phasenübergang erster Ordnung zeichnet sich durch die Koexistenz zweier Phasen am Phasenübergangspunkt aus. Insbesondere bedeutet dies, dass der Ordnungsparameter, der zur Unterscheidung der Phasen dient, an diesem Punkt keinen eindeutigen Wert hat. In der Abbildung 4.2 ist die freie Energie für einen Phasenübergang erster sowie zweiter Ordnung gegen den Ordnungsparameter aufgetragen. In der geordneten Phase (Ib), (IIb) ist das Minimum eindeutig bestimmt. Der Wert des Ordnungsparameters ist bei diesem Minimum zu finden und endlich. In der ungeordneten Phase (Id), (IIId) ist das Minimum wieder eindeutig und bei Null lokalisiert. In der ungeordneten Phase ist der Ordnungsparameter Null.

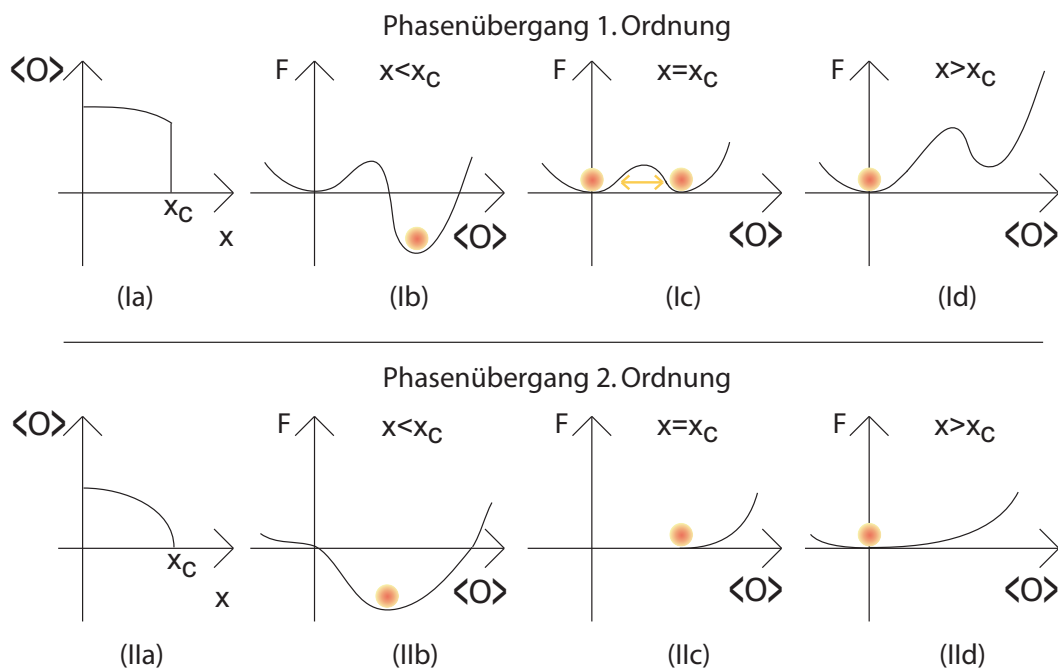


Abbildung 4.2.: Das Minimum der freien Energie  $F$  bestimmt den Ordnungsparameter  $\langle O \rangle$ . Unterschiede treten hier bei einem Phasenübergang erster Ordnung im Vergleich zu einem zweiter Ordnung auf. Der Parameter  $x$  soll hier der, den Phasenübergang treibende, Parameter sein.

Am Phasenübergangspunkt selber liegen bei einem Phasenübergang erster Ordnung mindestens zwei Minima vor. Der Ordnungsparameter kann zwischen diesen beiden Minima springen (Ic). Dies bedeutet für das physikalische System, dass beide Phasen koexistieren. Es wird also örtliche Bereiche geben, in denen der Ordnungsparameter endlich ist, in anderen Bereichen verschwindet der Ordnungsparameter. Die beiden Minima entstehen dadurch, dass sich beim Aufdrehen des kritischen Parameters  $x$  das eine Minimum auf das Niveau

des anderen hebt (oder umgekehrt) und somit beide gleichberechtigt sind. Im Schaukasten (Ia) sieht man den daraus resultierenden, sprunghaften Verlauf des Ordnungsparameters in Abhängigkeit des kritischen Parameters  $x$ .

Das Auftreten zweier Phasen am Phasenübergangspunkt bei einem Phasenübergang erster Ordnung bedeutet aber auch, dass für jede der beiden Phasen eine andere innere Energie bestimmt werden kann. Bezeichnet  $E_+(x)$  die innere Energie für die ungeordnete Phase und  $E_-(x)$  die Energie der geordneten, so beschreibt  $E_+(x_c) - E_-(x_c)$  die latente Wärme.

Für die Monte-Carlo-Simulationen am Phasenübergangspunkt, die ich in dieser Arbeit verwendet habe und die weiter unten beschrieben werden, bedeutet dies, dass sich das System nach einer Anfangszeit in einer der beiden Phasen eingestellt haben wird. In welcher der beiden, ist dabei von Anfang an nicht unbedingt zu sagen. Für sehr lange Laufzeiten besteht nun aber die Möglichkeit, dass das System oder Teile des Systems aus der einen Phase in die andere Phase schwingen und dort eine Weile verharren, bis sie unter Umständen wieder in die Erste zurückkippen, und so fort.

Wie in [Challa u. a. 1986] vorgeschlagen habe ich bei meinen Untersuchungen die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Boltzmanngewichte untersucht, die nach obiger Theorie zwei ausgeprägte, Gauß-verteilte Peaks, entsprechend den beiden Energien  $E_-$ ,  $E_+$ , zeigen sollte. Mit diesem Verfahren lässt sich eindeutig ein Phasenübergang erster Ordnung von einem zweiter Ordnung unterscheiden. Ein Beispiel einer solchen Verteilung ist in Abbildung 5.9 zu sehen, wo ich den Phasenübergang im Vertex-Zustands-Modell des Spin-3 auf dem kubischen Gitter genauer untersucht habe.

Der typische Verlauf des Ordnungsparameters für einen Phasenübergang zweiter Ordnung sieht hingegen anders aus. Bei Veränderung des Parameters  $x$  hebt sich das Minimum an, bis sich ein Plateau ausbildet (IIc). An dieser Stelle ist der Ordnungsparameter wieder nicht eindeutig bestimmt, was dem senkrechten Einmünden des Ordnungsparameters bei  $x_c$  entspricht (siehe (IIa)). Verändert man den Parameter  $x$  weiter, so bildet sich ein eindeutiges Minimum bei  $\langle \mathbf{O} \rangle = 0$  aus, womit die Phase stabilisiert wird.

Der Unterschied zu einem Phasenübergang erster Ordnung zeigt, dass hier keine zwei Gauß-Peaks in einer Monte-Carlo-Messung auftreten und somit zwei Peaks charakteristisch für einen Phasenübergang erster Ordnung sind.

### Hysteresemessungen

Das im vorigem Abschnitt beschriebene Verfahren, einen Phasenübergang erster Ordnung bei Monte-Carlo-Simulationen auf einem endlichen Gitter von einem zweiter Ordnung zu unterscheiden, hat jedoch einen entscheidenden Nachteil. Die Zeitskala, auf der die Simulation von einer Phase in die andere kippt, ist unter Umständen extrem lang. So konnte ich bei meinen Messungen diesen Effekt erst nach 100-1000fach längeren Laufzeiten sehen,

als das System anfänglich braucht, um zu äquilibrieren.

Eine alternative Vorgehensweise kann daher in einer Hysteresemessung bestehen. Unter einer Hysteresemessung in der Experimentalphysik versteht man das Messen einer physikalischen Größe in Abhängigkeit eines äußeren Parameters. Dieser Parameter wird nun kontinuierlich verändert und die auf diesen Parameter empfindlich reagierende Größe gemessen. Als typisches Beispiel sei die Messung der Magnetisierung einer Probe im äußeren Magnetfeld genannt. Die Magnetisierung zeigt sich bei einer Messung unter Umständen empfindlich gegenüber der Messung vorangegangener äußerer Magnetfelder. Es macht also einen Unterschied, ob man die Stärke des äußeren Magnetfeldes von großen Feldstärken auf den gewünschten Wert herunterregelt oder von einer feldfreien Probe kommend hochregelt. Dieser Effekt lässt sich systematisch messen, indem man von einer Feldstärke  $H_+$  kommend, bei der die Magnetisierung Sättigungsverhalten zeigt, das Magnetfeld herunterregelt und die Magnetisierung misst. Dies wird bis zu einer Feldstärke  $H_-$  weitergeführt, bis die Magnetisierung wieder gesättigt ist. Im zweiten Durchgang wird das Feld nun von  $H_-$  auf  $H_+$  hochgeregelt und wieder die Magnetisierung gemessen. Es entsteht eine Schlaufe, die auf ein Gedächtnis der Probe für die letzte Feldstärkeneinstellung zurückzuführen ist.

Auch bei Monte-Carlo-Simulationen können ähnliche Effekte auftreten. Um den Effekt bei einem Monte-Carlo-Lauf zu untersuchen, wird die Simulation für einen Parametersatz nicht immer wieder aus einem definierten Anfangszustand heraus neu gestartet. Es wird vielmehr der Endzustand eines Monte-Carlo-Laufs als Anfangszustand eines neuen Laufs betrachtet. Die in die Simulation einfließenden Parameter werden gegenüber dem vorherigen Lauf nur wenig verändert. Dasselbe gilt nun für die folgenden Läufe, bei denen die Parameter immer in dieselbe Richtung verändert werden und die als Anfangszustand den abgespeicherten Endzustand des Vorgängerlaufs erhalten. Besonders interessant ist dabei die Veränderung des Parameters, der das Modell durch einen Phasenübergang treibt. Mit obiger Methode nähert man sich dem kritischen Punkt einmal „von oben“ und einmal „von unten“. Wie man es bei der Messung der Magnetisierung bei der Veränderung eines angelegten äußeren Feldes kennt, kann eine typische Hysteresekurve entstehen. Bei einer Monte-Carlo-Simulation kann eine solche Hysteresekurve folgende Ursachen haben [Zheng und Zhang 1998]. Dies ist mit dem typischen Unterkühlen und Überhitzen einer Phase, wie man es auch vom Siedeverzug einer erhitzenden Flüssigkeit her kennt, zu vergleichen. Es ist bekannt, dass diese Irreversibilität auf den Bruch der Ergodizität zurückzuführen ist. Dies bedeutet, dass wenn zwei Bereiche des Phasenraumes durch hohe Energiebarrieren voneinander getrennt sind, die Ergodizität durch einen Algorithmus lokaler Monte-Carlo-Schritte nicht mehr sichergestellt werden kann. Dieser Effekt erklärt unter anderem die langen Laufzeiten, die für die Analyse der Wahrscheinlichkeitsverteilungen notwendig waren. Um diesen Effekt genauer zu verstehen, möchte ich noch einmal auf die Doppelpeak-Struktur der Wahrscheinlichkeitsverteilung eingehen. Die beiden Maxima bilden sich dadurch aus, dass in weiten Teilen des Systems eine der beiden koexistierenden Phasen vorliegt. Die Oberflächen dieser Phasengrenzen führen zu einer Energie, die auf die Gesamtenergie des Systems angerechnet werden muss. Dabei sind kleine Bereiche einer Phase ungünstig, da diese in Summe zu großen Oberflächen und

damit zu großen Beiträgen zur Energie führen würden. Das System präferiert daher große Bereiche reiner Phasen. Der Bereich zwischen den beiden Peaks, der die Koexistenz der beiden Phasen auf kleinen Raumgebieten widerspiegelt, wird durch diesen Oberflächenbeitrag exponentiell unterdrückt. Für die Monte-Carlo-Simulation bedeutet dies, wie bereits oben erwähnt, dass es sehr lange dauern kann, bis das System von der einen in die andere Phase gelangt. Diese Verlangsamung wächst exponentiell mit der Systemgröße und ist als *exponential* oder *super-critical slowing down* bekannt [Janke 1994, Janke 1996]. Was auf der einen Seite schlecht ist, kann auf der anderen Seite aber gut genutzt werden. Befindet sich das System in einer der beiden Phasen, so führt der Bruch der Ergodizität dazu, dass nicht direkt am Phasenübergangspunkt der Phasenübergang eintritt, sondern erst für kleinere Parameter, wenn man sich dem Punkt von oben nähert und für größere Werte, wenn man sich dem Punkt von unten nähert. Dieser Effekt des Überhitzens, beziehungsweise der Unterkühlens, ist also ein Charakteristikum eines Phasenübergangs erster Ordnung. In dem Abschnitt 5.2.1 konnte ich so einen Phasenübergang erster Ordnung nachweisen. Die entsprechenden Messreihen sind in Abbildung 5.10 dargestellt. Zum Vergleich dazu zeigt die Abbildung 5.6 einen Hystereselauf für das Spin-2 Modell auf dem Quadratgitter. Die grünen Punkte zeigen dabei Messergebnisse beim Aufdrehen des Parameters  $b^2$  und die roten Punkte Messwerte beim Herunterdrehen des Parameters  $b^2$ . Es ist kein signifikanter Unterschied der beiden Läufe zu erkennen. Eine Hystereseschleife tritt nicht auf. Dies spiegelt das zu erwartende Ergebnis eines Phasenübergangs zweiter Ordnung wider.

Dieses Ergebnis kann noch von einer weiteren Seite aus beleuchtet werden. Um bei einer Monte-Carlo-Simulation möglichst schnell in den Gleichgewichtszustand zu gelangen, kann man einen Monte-Carlo-Lauf unterschiedlichen Anfangsbedingungen unterwerfen. Diese Anfangsbedingungen sollten stets dem erwarteten Ergebnis angepasst sein. Insbesondere heißt das, dass man das System aus einem Zustand heraus startet, der dem Gleichgewichtszustand ähnelt. Dieser sogenannte *Target-Zustand* spiegelt dann schon die zu messenden physikalischen Größen im Wesentlichen wider.

Liegt ein Phasenübergang erster Ordnung vor, so ist die Wahl des Target-Zustands eine entscheidende Größe, da dieser, ähnlich eines Hystereseverhaltens, ein Gedächtnis darstellen kann. Ein Phasenübergang zweiter Ordnung ist nicht empfindlich gegenüber der Wahl des Target-Zustandes. Lediglich die Zeit, die zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes benötigt wird, unterscheidet sich. In Übereinstimmung mit der letzten Aussage sind in Abschnitt 5.2.2 in Abbildung 5.27 Ergebnisse erläutert, die Monte-Carlo-Läufe unterschiedlicher Target-Zustände zeigen.

#### 4.4. Monte-Carlo-Simulation von Vertex-Modellen

Um die zuvor beschriebenen Algorithmen auf die in dieser Arbeit von mir untersuchten Modelle anwenden zu können, muss zuvor noch der *Loop-Algorithmus* eingeführt werden.

### 4.4.1. Loop-Algorithmus

Bei einer Markov-Kette erzeugt man, ausgehend von einer Konfiguration  $X$  eine neue Konfiguration  $Y$ , die mit einer Wahrscheinlichkeit  $W(Y, X)$  angenommen wird. Verwendet man zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit den Metropolis-Algorithmus, so unterscheidet sich die neue Konfiguration  $Y$  nur dann von der vorangegangenen  $X$  mit hoher Wahrscheinlichkeit, wenn die neue Konfiguration ein höheres Boltzmann-Gewicht trägt als ihre Vorgänger-Konfiguration. Um nicht unnötig häufig Konfigurationen vorzuschlagen, die nicht angenommen werden, ist es sinnvoll, von einer Vorgänger-Konfiguration auszugehen und nur wenige Veränderungen daran vorzunehmen, um eine Folge-Konfiguration vorzuschlagen. Für das Beispiel 4.2 des Ising-Modells könnte dies bedeuten, dass von einer vorliegenden Konfiguration  $X$  der Spins aus *ein* zufällig ausgewählter Spin umgeklappt wird ( $s_i \rightarrow -s_i$ ), um so eine neue Konfiguration  $Y$  vorzuschlagen. In einem solchen Fall ist davon auszugehen, dass sich der Boltzmann-Faktor der neuen Konfiguration  $Y$  nicht erheblich von dem der alten unterscheidet. Die Wahrscheinlichkeit, dass diese angenommen wird, ist insbesondere im Vergleich dann höher, wenn man sich schon in einem Bereich hoher Boltzmanngewichte befindet, als wenn man eine beliebige Konfiguration vorschlagen würde.

Oftmals ist es aber nicht möglich, bei einem gegebenen Modell nur eine lokale Variable zu verändern, um so zu einer neuen Konfiguration zu gelangen, die dann ein nicht verschwindendes Gewicht besitzt. Gegebenenfalls, dass die Veränderung nur einer Zustandsvariablen zu einer zulässigen Konfiguration führt, kann sich diese Vorgehensweise dennoch als ineffektiv erweisen. Dies kann entweder daran liegen, dass zum Beispiel bestimmte Auswahlregeln oder Randbedingungen beachtet werden müssen. Ein Ausweg kann hier der *Loop-Algorithmus* sein.

Der Loop-Algorithmus wurde 1972 von Rahman und Stillinger [Rahman und Stillinger 1972] auf das Eis-Modell angewendet vorgestellt und später auf das Sechs-Vertex-Modell und im Rahmen des Quanten-Monte-Carlo auch auf quantenmechanische Modelle wie das  $XXZ$ -Modell ausgeweitet. Sehr ausgefeilte Cluster-Loop-Algorithmen werden u.a. in [Evertz u. a. 1993, Evertz und Marcu 1993] vorgestellt. Die Beschreibung des Loop-Algorithmus soll nun anhand des Sechs-Vertex-Modells und des  $XXZ$ -Modells vorgeführt werden.

### Das Sechs-Vertex-Modell

*Historisches:* Etwa in den zwanziger Jahren des vorigen Jahrhunderts erklärten Maurice Huggins und Gilbert Newton Lewis mittels Wasserstoffbrückenbindungen den unerwartet hohen Schmelz- und Siedepunkt von Wasser. Bei kleinen Molekülen, wie dem Wasser ( $H_2O$ ), sollte man aufgrund der Dipol-Dipol-Wechselwirkungen der Moleküle untereinander einen Schmelzpunkt erwarten, der tiefer als  $-100^\circ C$  liegen sollte. Auch der Siedepunkt sollte entsprechend niedriger sein. Daher müssen weitere Wechselwirkungen vorhanden sein. Dass beim Wasser und anderen Molekülen, wie Fluorwasserstoff<sup>4</sup>  $FH$  deutlich höhere Siede-

<sup>4</sup>Fluorwasserstoff bildet über Wasserstoffbrückenbindungen Komplexe wie etwa  $H_6F_6$  und hat daher einen

und Schmelzpunkte vorliegen, ist auf die Wasserstoffbrückenbindung zurückzuführen. Hierzu ist es wichtig, dass ein elektronegatives Atom  $X$  (bei Wasser das Sauerstoffatom mit einer Elektronegativität von 3,44 (Pauling)) mit dem Wasserstoffatom  $H$  durch eine polarisierte kovalente Bindung verknüpft ist. Diese Gruppe  $X - H$  wird Wasserstoffbrückendonator genannt. Ein zweites elektronegatives Atom  $Y$  (beim Wasser ein von einem zweiten  $H_2O$ -Molekül stammendes Sauerstoffatom), das ein freies Elektronenpaar besitzt und nach außen eine negative Teil-Ladung aufweist, wird Wasserstoffbrückenakzeptor genannt. Diese Wechselwirkung stammt nun aus der Aufteilung des Wasserstoffatoms zwischen den beiden sehr elektronegativen Atomen  $X$  und  $Y$ .

Da der Sauerstoff im Wasser über zwei Wasserstoffatome verfügt und so zweifach als Donor auftritt, andererseits aber auch zweifach als Akzeptor fungieren kann, hat jedes Sauerstoffatom mittels der Wasserstoffbrückenbindungen je vier Sauerstoffatome als übernächste Nachbarn.

Auf jeder der vier Verbindungslinien zwischen den Sauerstoffatomen (den *Bonds*) befindet sich je ein Wasserstoffatom.

Dabei befinden sich die Wasserstoffatome nicht mittig auf den Verbindungslinien, da das Potential des Sauerstoffatoms eine Doppelmuldenform zeigt. Das eine Minimum sitzt näher am Gitterpunkt, wo das Sauerstoffatom sitzt, das zweite weiter entfernt auf demselben Bond. Jedes Wasserstoffatom ordnet sich an der Stelle eines der Minima an. Dabei gehorcht die Verteilung, der von Slater [Slater 1941] geforderten,

**Theorem 4.30** *Eis-Regel* :

*Bei jedem Sauerstoffatom sind zwei Wasserstoffatome in den nahen Minima lokalisiert, zwei in den weiter entfernten. Auf jedem Bond befindet sich dabei ein Wasserstoffatom.*

Betrachtet man nun die Zustandssumme wie in Gleichung (4.1), so muss

$$\mathbf{Z} = \sum_{Konf.} e^{-\beta E(X)} \quad (4.31)$$

berechnet werden, wobei sich die Summe über alle Konfigurationen  $X$  zu erstrecken hat. Wählt man den Energie Nullpunkt zu  $E = 0$ , so zählt man mit der Summe nur die Anzahl der möglichen Konfigurationen, die der Eis-Regel (4.30) nicht widersprechen, da für alle Konfigurationen dann  $E(X) = E = 0$  gilt. Damit berechnet sich die *Restentropie* zu

$$\mathbf{S} = k_B \ln \mathbf{Z} = k_B \ln (\#Konf.). \quad (4.32)$$

Natürlich ordnen sich die Moleküle in der Natur beim Gefrieren zu einem dreidimensionalen Gebilde an. Es ist allerdings nur eine exakte Lösung des dreidimensionalen Modells

---

Siedepunkt von  $19,5^\circ\text{C}$  ( $HCl$  siedet zum Beispiel schon bei  $-85,05^\circ\text{C}$ ).



bekannt, die nur spezielle Strukturen des gefrorenen Eises beschreibt [Nagel 1969a]. Aus diesem Grund schaut man oft auf zweidimensionale Modelle, die der Eis-Regel folgen. Die Restentropie ist nicht sehr empfindlich gegenüber der zu Grunde liegenden Gitterstruktur, sodass auch zweidimensionale Eis-Modelle einen guten Wert für die Restentropie liefern. So ergibt sich für dreidimensional angeordnete Modelle der Wert  $3.4J/Kmol$  [Haida u. a. ]. Für das quadratische, zweidimensionale Eis-Modell fand Lieb 1967 die Lösung und konnte den Wert zu  $3.5J/Kmol$  angeben [Lieb 1967c]. Weitere Lösungen für Verallgemeinerungen wurden von ihm [Lieb 1967a, Lieb 1967b] und von Sutherland [Sutherland 1967] noch im selben Jahr vorgelegt.

Zur Beschreibung des quadratischen Eis-Modells kann man auf eine Vertex-Darstellung zurückgreifen. Hierbei liegen die Sauerstoffatome auf den Gitterpunkten eines Schachbrettes. Auf den Verbindungslinien/Bonds befinden sich die Wasserstoffatome. Da die Wasserstoffatome sich nicht mittig auf diesen Bonds anordnen, wird deren Lage mittels Pfeilen dargestellt. Ein Pfeil zum Sauerstoffatom hin bedeutet, dass sich der Wasserstoff näher an diesem befindet, als wenn der Pfeil in die entgegengesetzte Richtung, vom Sauerstoffatom weg zeigt. Die Eis-Regel 4.30 bedeutet in diesem Bild, dass an jedem Vertex genau zwei Pfeile hineinlaufen und zwei heraus. Sechs verschiedene Vertices lassen sich auf diese Art und Weise konstruieren, wie in Abb. 4.3 dargestellt. Bei dem Eis-Modell sind dabei alle

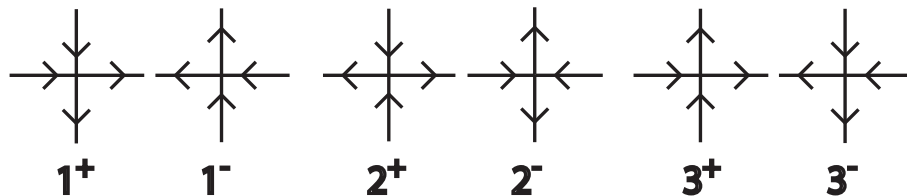


Abbildung 4.3.: Die Vertices des Sechs-Vertex-Modells mit den Energien  $1^\pm, 2^\pm, 3^\pm$ . Für das Eis-Modell sind alle Energien  $i^\pm, i = 1, 2, 3$  identisch Null, für das *KPD*-Modell muss  $\{3^\pm = 0 \text{ und } i^\pm > 0, \text{ sonst}\}$  gelten, für das *F*-Modell  $\{2^\pm = 0 \text{ und } i^\pm > 0, \text{ sonst}\}$

Energien  $i^\pm, i = 1, 2, 3$ <sup>5</sup> identisch Null, sodass keine Konfiguration bevorzugt auftritt. Durch die Wahl anderer Energien lassen sich Modelle finden, die zum Beispiel zur Beschreibung von Kaliumdihydrogenphosphat  $KH_2PO_4$  dienen, oder die Anti-Ferroelektrika zur Lösung haben.

Zur Beschreibung von Kaliumdihydrogenphosphat (*KPD*) müssen die Gewichte zu  $3^\pm = 0$  und  $1^\pm, 2^\pm > 0$  gewählt werden. Der Grundzustand hier zeigt *ferroelektrische Ordnung*:

<sup>5</sup>Die Bezeichnungen  $i^\pm$  sollen synonym für die Vertices als auch für deren Energien benutzt werden. Sollte die Möglichkeit der Verwechslung auftreten, wird genauer spezifiziert, ob es sich um die Vertices selber handeln soll, oder um deren Energien.

entweder zeigen alle Pfeile nach rechts oder nach oben, oder es zeigen alle nach links oder nach unten [Lieb 1967b].

Bei dem von Rys vorgeschlagenen  $F$ -Modell [Rys 1963] mit anti-ferroelektrischer Ordnung [Lieb 1967a], müssen die Energien zu  $2^\pm = 0$  und  $1^\pm, 3^\pm > 0$  gewählt werden. Der Grundzustand besteht dann nur aus den zwei Vertices  $2^\pm$ . Die Pfeile auf jeder Waagerechten, so wie auf jeder Senkrechten sind alternierend angeordnet. Dabei befinden sich die Vertices der Typs  $2^+$  auf einem Untergitter<sup>6</sup> und die des Typs  $2^-$  auf dem anderen. Einen zweiten Grundzustand erhält man, wenn man die Rollen der Untergitter gerade austauscht. Die alternierende Abfolge der Pfeile entspricht dabei einer anti-ferroelektrischen Ordnung [Nagel 1969b].

Man kann die Vertices auch ohne jede Einschränkung an die Energiewerte betrachten; man spricht dann allgemein vom *Sechs-Vertex-Modell*. Wie ich in dem nächsten Abschnitt zeigen werde, kann ein Zusammenhang zwischen dem Sechs-Vertex-Modell und dem ein-dimensionalen  $XXZ$ -Modell hergestellt werden. An dieser Stelle diskutiere ich dann auch das allgemeine Phasendiagramm dieser Modelle.

Egal ob Eis-Modell,  $KPD$ -Modell,  $F$ -Modell oder das allgemeine Sechs-Vertex-Modell, ein lokales Update, also die Veränderung nur eines Pfeils an einem der Vertices als Monte-Carlo-Schritt, ist bei allen Modellen unzulässig. Betrachtet man einen der sechs Vertices und klappt nur einen Pfeil um, so wird der Vertex, der zuvor quell- und senkenfrei war, zu einer Quelle oder einer Senke. Ein solcher Vertex ist nicht erlaubt und muss daher ausgeschlossen werden. Ein Loop-Algorithmus kann hier der Ausweg sein. Die Loop-Algorithmen, die ich unten beschreiben werde, können ebenso gut für viele quantenmechanische Modelle angewendet werden. Als ein Beispiel sei zunächst auf das  $XXZ$ -Modell eingegangen. Das  $XXZ$ -Modell lässt sich auf das Sechs-Vertex-Modell abbilden. Die beschriebenen Loop-Algorithmen können so in Form eines klassischen oder in Form eines quantenmechanischen Modells verstanden werden.

### Das $XXZ$ -Modell und das Sechs-Vertex-Modell

Den Zusammenhang zwischen dem  $XXZ$ -Modell und dem Sechs-Vertex-Modell erkennt man mittels einer Abbildung des  $XXZ$ -Modells auf das Sechs-Vertex-Modell. Hierbei spielt für das  $XXZ$ -Modell die *Trotter-Suzuki Zerlegung* [Trotter 1959, Suzuki 1976b] und die *Weltlinien-Darstellung in endlicher Trotter-Zeit* [Scaletter 1999] eine entscheidende Rolle. Die vorgestellte Abbildung der beiden Modelle aufeinander verdeutlicht den Zusammenhang der Vertex-Modelle zu quantenmechanischen Modellen. Die Abbildung veranschaulicht, dass ein  $D$ -dimensionales quantenmechanisches Modell auf ein  $D + 1$ -dimensionales klassisches

<sup>6</sup>Die Untergitter sollen so bestimmt sein, dass jeder Gitterplatz des einen Untergitters nur Nachbarn aus dem anderen Untergitter hat und umgekehrt.

Modell abgebildet werden kann.

In dem letzten Unterabschnitt dieses Kapitels werde ich die Implementierung eines erweiterten Loop-Algorithmus vorstellen, der die Abbildung aus Kapitel 3.4.1 eines  $D$ -dimensionalen, quantenmechanischen Modells auf ein  $D$ -dimensionales, klassisches Modell beschreibt.

Zur kurzen Veranschaulichung der Trotter-Suzuki Zerlegung soll das XXZ-Modell auf einer eindimensionalen Kette mit  $N$  Gitterpunkten betrachtet werden [Scaletter 1999], das durch folgenden Hamiltonian beschrieben werden kann:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \sum_{\langle i,i+1 \rangle} \mathbf{H}_{i,i+1} = \sum_i (J_x (\mathbf{S}_i^x \mathbf{S}_{i+1}^x + \mathbf{S}_i^y \mathbf{S}_{i+1}^y) + J_z \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_{i+1}^z) - h \sum_i \mathbf{S}_i^z \quad (4.33) \\ &= \sum_i \left( \frac{J_x}{2} (\mathbf{S}_i^+ \mathbf{S}_{i+1}^- + \mathbf{S}_i^- \mathbf{S}_{i+1}^+) + J_z \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_{i+1}^z \right) - h \sum_i \mathbf{S}_i^z, \end{aligned}$$

wobei mit  $\mathbf{S}_i^z, \mathbf{S}_i^+, \dots$  die üblichen Spin- $\frac{1}{2}$  Operatoren bezeichnet werden sollen und  $h$  für ein äußeres Magnetfeld steht. Es werden periodische Randbedingungen betrachtet.

Der XXZ-Hamiltonian aus Gleichung (4.33) lässt sich in einen geraden und einen ungeraden Anteil aufteilen,

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \mathbf{H}_{gerade} + \mathbf{H}_{ungerade} \quad (4.34) \\ \mathbf{H}_{gerade} &= \sum_{j=gerade} \mathbf{H}_{j,j+1}, \\ \mathbf{H}_{ungerade} & \end{aligned}$$

und es kann die Zustandssumme in folgender Form umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}^{XXZ} &= \text{Spur} (e^{-\beta \mathbf{H}}) = \lim_{L_t \rightarrow \infty} \text{Spur} \left( \left( e^{-\frac{\beta}{L_t} \mathbf{H}} \right)^{L_t} \right) \quad (4.35) \\ &= \lim_{L_t \rightarrow \infty} \text{Spur} \left( \left( e^{-\frac{\beta}{L_t} \mathbf{H}_{gerade}} e^{-\frac{\beta}{L_t} \mathbf{H}_{ungerade}} \right)^{L_t} \right). \end{aligned}$$

Diese Aufteilung ist als Trotter-Suzuki Zerlegung [Trotter 1959, Suzuki 1976b] bekannt. Natürlich besteht exakte Gleichheit erst nach Ausführen des Limes. Führt man hingegen den Limes in (4.35) nicht aus, so kann dennoch die Formel für hinreichend große  $L_t$  als Näherung wertvoll sein.

Es soll also zunächst die Formel (4.35) ohne Ausführen des Limes betrachtet werden und diese Zustandssumme  $\mathbf{Z}'$  mit einem Strich gekennzeichnet werden. Zu der Weltlinien-Darstellung [Scaletter 1999] gelangt man durch das Einfügen vollständiger  $\mathbf{S}^z$ -Eigenbasen

$$\left\{ |\mathbf{s}_i^z\rangle \langle \mathbf{s}_i^z| := \left| s_i^{z,1} s_i^{z,2} \dots s_i^{z,N} \right\rangle \left\langle s_i^{z,1} s_i^{z,2} \dots s_i^{z,N} \right| \right\}, \quad \forall i \in \{1, \dots, 2L_t\}, \quad (4.36)$$

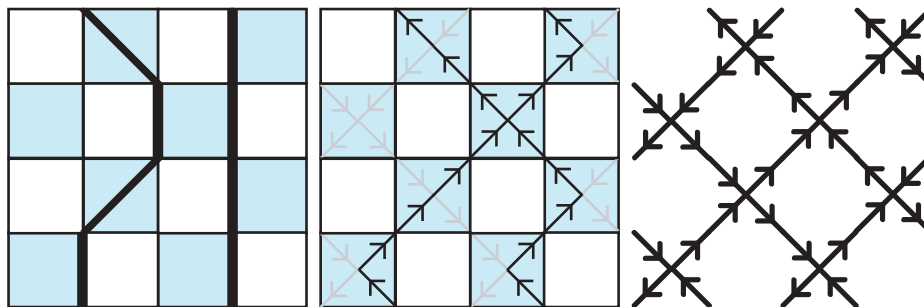


Abbildung 4.4.: Beispiel einer Weltlinien-Konfiguration auf einem Schachbrett-Gitter. (a) Weltlinien Bild, (b) Kostruktion der Vertex-Darstellung aus der *gleichen* Konfiguration, (c) Vertex Bild

und dem zyklischen Vertauschen unter der Spur für die letzten eingefügten Basis-Vektoren:

$$\mathbf{z}' = \sum_{s_1^z, \dots, s_{2L_t}^z} \langle \mathbf{s}_{2L_t}^z | e^{-\frac{\beta}{L_t} H_{gerade}} | \mathbf{s}_1^z \rangle \langle \mathbf{s}_1^z | e^{-\frac{\beta}{L_t} H_{ungerade}} | \mathbf{s}_2^z \rangle \dots \langle \mathbf{s}_{2L_t-1}^z | e^{-\frac{\beta}{L_t} H_{ungerade}} | \mathbf{s}_{2L_t}^z \rangle. \quad (4.37)$$

Hier tritt nun neben der „räumlichen“ Kettenlänge  $N$  eine weitere Dimension auf, die als *imaginäre Zeit* (Trotter-Richtung) bezeichnet werden kann und den Index  $i = 1, \dots, 2L_t$  trägt.

Durch die Aufteilung in *gerade* und *ungerade* Teilhamiltonian lässt sich die Summe (4.37) auf ein klassisches Problem in (1+1)-Dimensionen zurückführen, in dem jeweils ein 4-Tupel von Spins auf den Ecken der hellblauen Plaketten aus Abb. 4.4 über einen lokalen Hamiltonian  $\mathbf{H}_{i,i+1}$  wechselwirkt und das Gewicht

$$W_p(S_p) = \left\langle s_i^{z,j} s_i^{z,j+1} \left| e^{-\frac{\beta}{L_t} H_{jj+1}} \right| s_{i+1}^{z,j} s_{i+1}^{z,j+1} \right\rangle, \quad (4.38)$$

mit  $p = ((j, i), (j + 1, i), (j, i + 1), (j + 1, i + 1))$ , zur Zustandssumme beiträgt.

Die Zustandssumme lässt sich nun wie folgt schreiben:

$$\mathbf{z}' = \sum_{\{s_i^{z,j}\}} \prod_p W_p(\{S_p\}), \quad (4.39)$$

wobei sich die Summe über alle „Konfigurationen“  $\{s_i^{z,j}\}$  zu erstrecken hat. Konkret ergeben sich bei dem hier beschriebenen XXZ-Modell die Gewichte (zur Abkürzung sei

$\mathfrak{H} := \frac{\beta}{L_t} \mathbf{H}_{j,j+1}$  gesetzt):

$$W(1^+) = a_+ = \langle \uparrow\uparrow | e^{-\mathfrak{H}} | \uparrow\uparrow \rangle = e^{-\frac{\beta}{4L_t} J_z + \frac{\beta}{2L_t} h} \quad (4.40)$$

$$W(1^-) = a_- = \langle \downarrow\downarrow | e^{-\mathfrak{H}} | \downarrow\downarrow \rangle = e^{-\frac{\beta}{4L_t} J_z - \frac{\beta}{2L_t} h} \quad (4.41)$$

$$W(2^\pm) = c = \langle \downarrow\uparrow | e^{-\mathfrak{H}} | \downarrow\uparrow \rangle = \langle \uparrow\downarrow | e^{-\mathfrak{H}} | \uparrow\downarrow \rangle = e^{+\frac{\beta}{4L_t} J_z} \cosh\left(\frac{\beta}{2L_t} |J_x|\right) \quad (4.42)$$

$$W(3^\pm) = b = \langle \downarrow\uparrow | e^{-\mathfrak{H}} | \uparrow\downarrow \rangle = \langle \uparrow\downarrow | e^{-\mathfrak{H}} | \downarrow\uparrow \rangle = e^{+\frac{\beta}{4L_t} J_z} \sinh\left(\frac{\beta}{2L_t} |J_x|\right) \quad (4.43)$$

Dies sind die sechs nicht verschwindenden Beiträge. Sie erhalten alle den Spin-Eigenwert  $\mathbf{S}_i^{z,j} + \mathbf{S}_i^{z,j+1}$  (dies ist notwendig, da der Gesamthamiltonian mit dem Gesamtspin in z-Richtung kommutiert;  $[\mathbf{H}_{j,j+1}, \mathbf{S}_{tot}^z] = 0$ ). Die anderen zwei möglichen Matrixelemente haben den Wert Null. Dies ist auch der Grund dafür, dass es in eindeutiger Weise möglich ist, die up-Spins auf der unteren Kante der Plakette mit den up-Spins der oberen Plakette zu verbinden. Sitzt auf der unteren Kante genau ein up-Spin, so sitzt auf der oberen auch genau einer; diese werden miteinander verbunden. Sitzen zwei up-Spins auf der unteren Kante, so auch auf der oberen und man verbindet linken, unteren up-Spin mit linken, oberen up-Spin und entsprechend analog auf der rechten Seite. Existiert kein up-Spin auf der unteren Kante, so auch nicht auf der oberen. Durch diese Vorschrift entstehen die Weltlinien in Abbildung 4.4(a). Es sei noch angemerkt, dass die Spurbildung in Gleichung (4.37) die Weltlinien in imaginärer Zeit-Richtung schließt.

Anstelle von Spins lassen sich auch für Modelle mit Fermionen oder auch hardcore Bosonen Formulierungen in Weltlinien-Darstellung finden, indem man auf gegebene Weise Gitterplätze, auf denen Teilchen zu finden sind, miteinander verbindet. Nächste-Nachbarn-Sprungprozesse führen dann wieder zu der obigen Modellklasse.

Die Konfigurationen der Weltlinien-Darstellung lassen sich auch auf eine weitere Weise interpretieren, indem man diese auf *Vertex-Modelle* abbildet [Baxter 1982]. Dies geschieht mit Hilfe einer „eins-zu-eins“ Zuordnung jeder Weltlinien-Konfiguration zu einer Vertex-Konfiguration wie in Abb. 4.5 dargestellt. Jeder up-Spin soll mit einem Pfeil zum Mittelpunkt der angrenzenden farbigen Plakette und in positive Trotter-Richtung zeigen; jeder down-Spin soll ebenso mit einem Pfeil zum Mittelpunkt der angrenzenden farbigen Plakette zeigen, aber in negativer imaginärer Zeit-Richtung. Mit Hilfe dieser Zuordnung gelangt man zu der Darstellung in Abb. 4.4 (b) und (c). Die Erhaltung von  $\mathbf{S}_{tot}^z$  in der Weltlinien-Formulierung des Modells bedeutet in der Vertex-Formulierung, dass zu jedem Vertex (der Mittelpunkt der farbigen Plaketten) immer genau zwei Pfeile zeigen (und zwei davon weg). In der Interpretation eines Vektorfeldes für die Pfeile würde das die *Divergenz-Freiheit* des Pfeil-Feldes bedeuten.

Mit Hilfe dieses Übergangs wird das XXZ-Modell auf ein Sechs-Vertex-Modell abgebildet. Es sei allerdings herausgestellt, dass auf Grund des um  $45^\circ$  gedrehten Gitters im

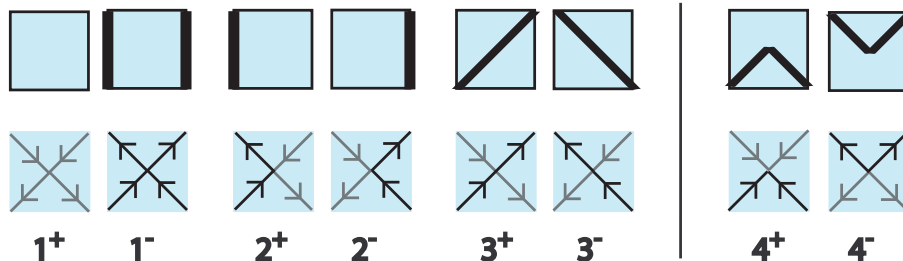


Abbildung 4.5.: Zuordnung je einer der Weltlinien Konfigurationen zu der entsprechenden Vertex-Konfiguration

Vergleich zum „üblichen“ Sechs-Vertex-Modell abweichende Randbedingungen zum periodischen Schluss herangezogen werden müssen.

Für den Spezialfall verschwindenden Magnetfeldes  $h = 0$  wurde das Modell in (1+1) Dimensionen von Baxter [Baxter 1982] gelöst. Das Phasendiagramm in Abhängigkeit der Vertex-Gewichte  $a := a^+ = a^-$ ,  $b$ ,  $c$  ist in Abbildung 4.6 dargestellt.

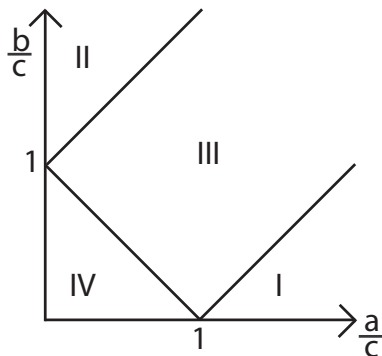


Abbildung 4.6.: Phasendiagramm des Sechs-Vertex-Modells. Die Phase I ist ferro-elektrisch und zeigt entlang der Linie  $a = b + c$  einen Phasenübergang erster Ordnung [Lieb 1967a]. Die angrenzende Phase III ist masselos mit divergierender Korrelationslänge. Entlang der Linie  $a + b = c$  befindet sich ein kontinuierlicher Phasenübergang *unendlicher Ordnung* [Kosterlitz und Thouless 1973]. Dieses Phasendiagramm kann mit den Identifikationen 4.40 in das Phasendiagramm des XXZ-Modells für  $a^2 + b^2 = c^2$  übersetzt werden.

### Der Loop-Algorithmus für das $XXZ$ -Modell und das Sechs-Vertex-Modell

Für beide Modelle lässt sich eine Implementierung mittels des *Loop-Algorithmus* für Monte-Carlo-Simulationen angeben. Wie am Anfang dieses Abschnitts (Abschnitt 4.4.1) bereits erwähnt, ist es oft üblich, ausgehend von einer Konfiguration  $X$  eine lokale Abänderung und damit eine neue Konfiguration  $Y$  vorzuschlagen. Es ist nicht bei allen Modellen möglich oder effizient, lokale Deformationen durchzuführen. In der Weltlinien-Darstellung würde eine lokale Deformation ein nicht zulässiges Aufschneiden einer Weltlinie bedeuten. Im Gegensatz zu lokalen Deformationen der Weltlinien sind die Updates, die beim Loop-Algorithmus vorgenommen werden, stark nicht lokal. Als erstes sollen zwei Beobachtungen beschrieben werden, die uns dann zu dem Loop-Algorithmus führen:

- Der hier als Beispiel verwendete  $XXZ$ -Hamiltonian wechselwirkt nur lokal auf einzelnen (farbigen) Plaketten. Dies ermöglicht es, die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts lokal auf diesen Plaketten nachzuweisen.
- Alle erlaubten Konfigurationen des äquivalenten Sechs-Vertex-Modells sind divergenzfrei. Daher lassen sich alle erlaubten Konfiguration ineinander überführen, indem man die Orientierung aller Pfeile entlang eines *geschlossenen Pfades* umkehrt, wobei alle Pfeile entlang dieses geschlossenen Pfades in ein und dieselbe Richtung zeigen müssen.

Im Folgenden soll beschrieben werden, wie solche geschlossenen Pfade oder auch *Loops* (auf dem Computer) erzeugt werden können. Wichtig ist herauszustellen, dass diese Loops nicht mit den Weltlinien selber zu verwechseln sind. Sie beschreiben vielmehr die Stellen, an denen eine Veränderung der Weltlinien vorgeschlagen wird.

Die Loops selber entstehen dabei schrittweise lokal. Im Besonderen sind die Pfade nicht global vorbestimmt, sondern werden stochastisch auf den einzelnen Plaketten bestimmt. Zur Veranschaulichung soll ein Beispiel-Loop wie in Abb. 4.7 betrachtet werden. Ausgehend von einer zufällig bestimmten Start-Plakette oder einem Start-Vertex (der in Abb.4.7(a) mit (S) bezeichnet ist) wird nun ein Loop generiert. Es soll der Loop immer in Pfeilrichtung weitergeführt werden, sodass in dem Fall des Sechs-Vertex-Modells zwei Möglichkeiten bestehen, wovon eine ausgewählt wird. In dem vorliegenden Beispiel wäre die folgende Plakette die, die sich diagonal, an der rechten oberen Ecke der Start-Plakette anschließt, oder die sich der rechten unteren Ecke anschließende. Es sei die an der rechten unteren Ecke anschließende ausgewählt. Auch hier gibt es nun wieder zwei Möglichkeiten, die Plakette über einen Bond zu verlassen, der einen Pfeil nach „außen“ gerichtet trägt (man beachte, dass man auf die Plakette über einen für diese Plakette nach „innen“ gerichteten Pfeil gekommen ist). Dies geht nun so fort, bis der Pfad auf eine Plakette trifft, die bereits bei einem vorherigen Schritt besucht wurde. Dabei handelt es sich natürlich nur selten um die Plakette, an der der Pfad seinen Anfang genommen hat; in diesem Fall gibt es natürlich nur eine Möglichkeit den Loop fortzusetzen, ohne dass sich Teile des Loops überlagern, nämlich über den verbleibenden aufwärts gerichteten Pfeil. Nach einer gewissen Anzahl

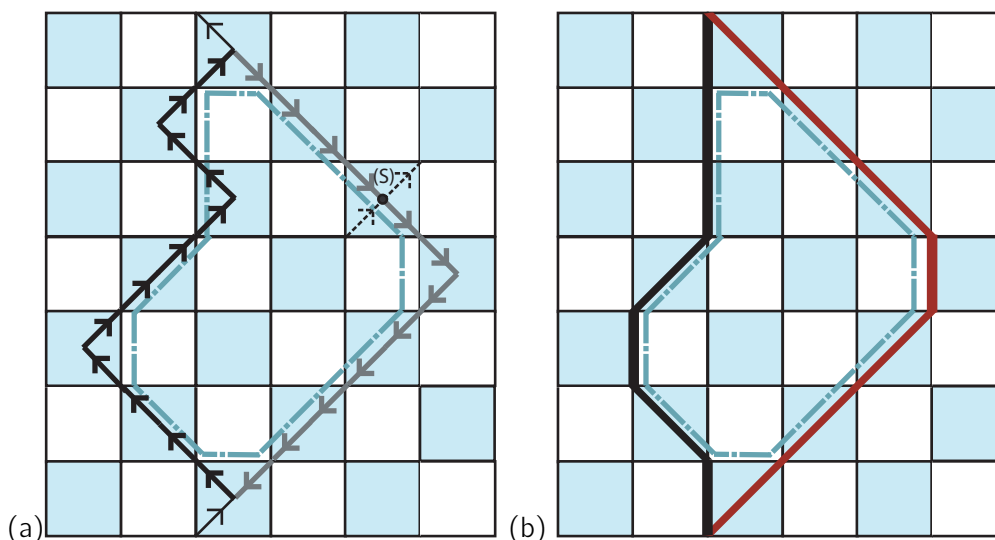


Abbildung 4.7.: Konstruktion eines Loops im Vertex-Bild und zum Vergleich im Weltlinienbild. Der Loop startet an dem Vertex, der mit (S) gekennzeichnet ist und läuft in Pfeilrichtung bis sich der Loop wieder schließt.

von Durchdringungen wird der Pfad aber sicherlich (auf einem endlichen Gitter) zum Anfangspunkt zurückkehren und dort geschlossen werden. Diese Art und Weise Loops zu bilden soll *Long-loop-Algorithmus* genannt werden. Es sei hier nochmal darauf hingewiesen, dass das Gitter im Fall des *XXZ-Modells* sowohl in Raum-Richtung als auch in imaginärer Zeit-Richtung periodisch geschlossen ist. Im Bild der Vertex-Modelle ist das Gitter in beide Raum-Richtungen geschlossen. In dem hier verwendeten Beispiel von Abbildung 4.7 schließt der Pfad (zufällig) an der Plakette, die den Anfang darstellt.

Eine zweite Möglichkeit soll als *Short-loop-Algorithmus* bezeichnet werden. Der Name wird unmittelbar klar, wenn man diesen im Vergleich zum *Long-loop-Algorithmus* sieht. Zunächst soll der Loop auf dieselbe Art-und-Weise wie der *Long-loop-Algorithmus* gebildet werden. Trifft nun aber die Fortführung des Loops auf eine Plakette, die bereits besucht war, so wird nicht der verbleibende Weg zur Weiterführung des Loops verwendet, sondern der Weg endet hier. Um einen einfach geschlossenen Loop zu erhalten, wird der Teil des Weges, der vom Startpunkt bis zum (ersten) Kreuzungspunkt liegt, abgeschnitten und man erhält einen geschlossenen Loop. Der entstehende Loop ist demnach deutlich kürzer, als der im vorherigen Algorithmus produzierte. In Abb. 4.8 ist ein Loop dargestellt, wie er im *Long-loop-Algorithmus* entstehen könnte. Im *Short-loop-Algorithmus* könnte vom Startpunkt *S* an der Weg I+II entstehen. Der Teil I des Weges würde dann abgeschnitten werden und man erhält den geschlossenen Loop II. Teil III würde nicht mehr erzeugt werden.

Als Vorschlag einer neuen Konfiguration werden nun alle Pfeile entlang des Loops umgeklappt, die anderen werden beibehalten. Nun wird das Gewicht der neuen Konfiguration



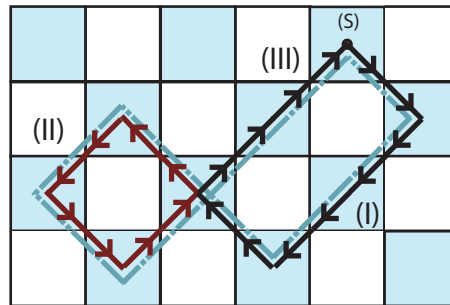


Abbildung 4.8.: Beispiel eines geschlossenen Loops. Im Long-loop-Algorithmus bestünde der geschlossene Loop aus den Teilstücken I-III. Im Short-loop-Algorithmus würde hingegen nur der Teil II betrachtet werden.

mit dem der alten verglichen. Wie in dem Abschnitt 4.2.2 beschrieben, wird dann die neue Konfiguration mit einer Akzeptanzwahrscheinlichkeit (4.19) angenommen.

Mittels der Loop-Algorithmen werden nicht-lokale Updates durchgeführt. Dies erkennt man am einfachsten, wenn man einen Loop betrachtet, der einmal um das (periodisch geschlossene) System herumläuft. Wird hier die neue vorgeschlagene Konfiguration angenommen, so erkennt man wie in Abb. 4.9, dass sich die Windungszahl der Weltlinien ändert. Dies muss ein Algorithmus leisten, da für die Ergodizität alle Sektoren unterschiedlicher Windungszahlen zu erreichen sein müssen.

Wiederholt man nun hintereinander die Bildung eines Loops, wie im Long-loop- oder auch Short-loop-Algorithmus beschrieben, und nimmt die neue Konfiguration mit der Akzeptanzwahrscheinlichkeit 4.19 an, so wird damit eine Markov-Kette definiert 4.2.1.

### Ergodizität des Loop-Algorithmus

Es stellt sich nun die Frage nach der Ergodizität des hier vorgeschlagenen Loop-Algorithmus. Zur Illustration sind in Abbildung 4.10 zwei beliebige Konfigurationen des Sechs-Vertex-Modells veranschaulicht. Die eine Konfiguration geht aus der anderen durch das Umkehren von Pfeilen entlang einer endlichen Anzahl von geschlossenen Loops hervor. Dabei geht jede Konfiguration aus dem Umklappen einer *geraden Anzahl von Pfeilen* auseinander hervor. Zeichnet man eine Linie entlang den Bonds, auf denen die Pfeile geändert wurden, so ist sichergestellt, dass bei jedem Vertex eine gerade Anzahl von Linien endet. Die entstehenden Linien bedecken eine Teilmenge der Vertices auf dem Gitter. Die Eis-Regel garantiert nun, dass man den Linien immer entlang der Pfeilrichtung (entweder vor dem Umklappen oder nach dem Umklappen) folgen kann, bis sich die Linien wieder schließen. Damit kann jede Konfiguration aus einer endlichen Anzahl geschlossener Loops aus jeder anderen her-

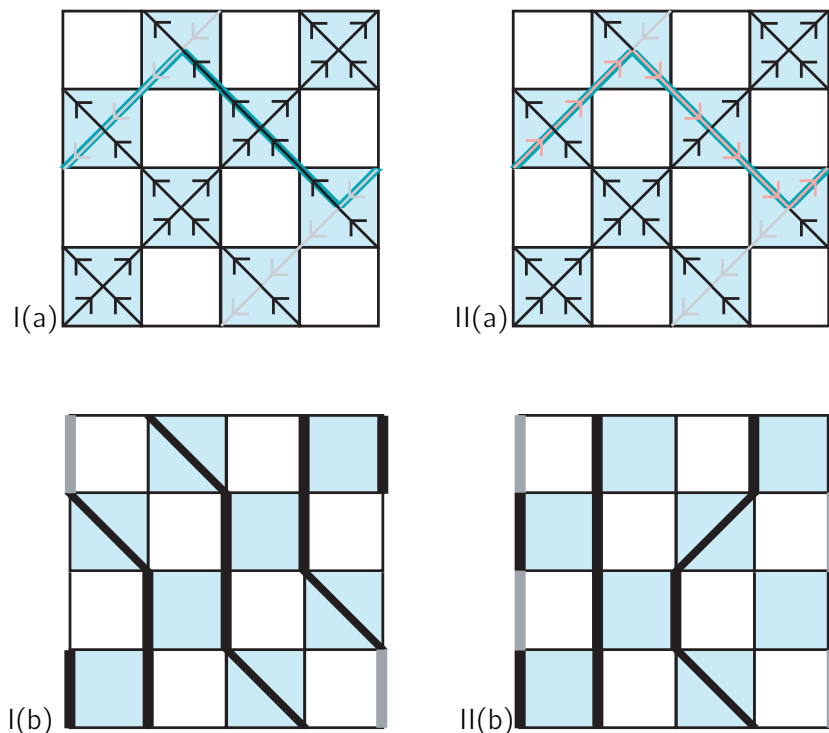


Abbildung 4.9.: Beispiel eines geschlossenen Loops, der sich in Raum-Richtung einmal um das Gitter windet. Die neue vorgeschlagene Konfiguration (b) unterscheidet sich in den Windungszahlen von der in (a). Dieser Unterschied wird im Weltlinienbild gut sichtbar.

vorgehen. Gerade dies spiegelt aber die Dynamik der Monte-Carlo-Simulation wider. Die Ergodizität ist somit gesichert.

### Detailliertes Gleichgewicht des Loop-Algorithmus

Auch die Erfüllung der Bedingung des detaillierten Gleichgewichts ist leicht zu sehen. Bei dem Eis-Modell haben alle Vertices die gleiche Energie  $E_0$ , sodass die Übergangsrate von einer Konfiguration  $X$  zu einer anderen  $Y$  einfach gegeben ist durch (vgl. Gleichung (4.15)):

$$\frac{W(X \rightarrow Y)}{W(Y \rightarrow X)} = e^{-\beta(E_0 - E_0)} = 1. \quad (4.44)$$

Betrachtet man zum Beispiel den Long-loop-Algorithmus, so wird ein Vertex  $S_0$  anfänglich mit einer Wahrscheinlichkeit  $1/N$  ausgewählt, wenn  $N$  die Anzahl aller Gitterplätze ist. Nach  $m$  Schritten endet der Loop wieder an diesem Gitterplatz  $S_m = S_0$ . In diesem Loop seien  $n$  Vertices bereits einmal besucht worden. Bei jedem Vertex, der nur einmal oder

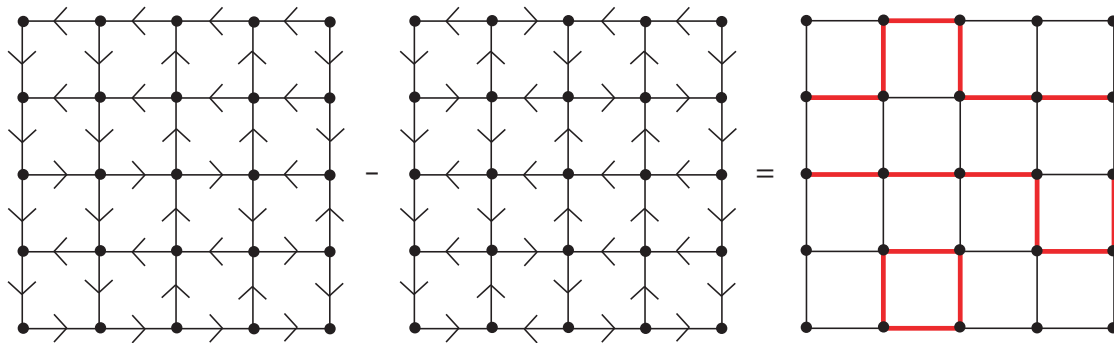


Abbildung 4.10.: Zwei beliebige Konfigurationen gehen auseinander durch das Umklappen endlich vieler Loops hervor. Dies stellt die Ergodizität des Algorithmus sicher.

zum ersten Mal besucht wird, stehen zwei Bonds zur Verfügung um den Weg fortzusetzen. Die Wahrscheinlichkeit, einen davon zu wählen, beträgt  $\frac{1}{2}$ . Wird ein Vertex zum zweiten Mal passiert, so steht nach obiger Beschreibung nur noch ein Bond zur Fortsetzung des Weges zur Verfügung und die Wahrscheinlichkeit dafür ist gerade 1. Damit besteht für den gesamten Weg eine Wahrscheinlichkeit  $p = \frac{1}{N} \left(\frac{1}{2}\right)^{(m-n)}$ . Für den umgekehrten Weg, nachdem alle Pfeile umgeklappt worden sind, gelten obige Überlegungen analog. Der Weg wird dieses Mal nur in entgegengesetzte Richtung durchlaufen. Vertices, die nur einmal besucht werden, haben wieder die Wahl zwischen zwei Bonds für die Fortsetzung des Weges. Vertices, die zweimal besucht werden, haben beim ersten Besuch dieselbe Möglichkeit, zwischen zwei Bonds zu wählen und beim zweiten Besuch wieder nur eine Möglichkeit. Die Gesamtwahrscheinlichkeit für den umgekehrten Weg beträgt also wieder  $p = \frac{1}{N} \left(\frac{1}{2}\right)^{(m-n)}$ . Es stimmen also die Wahrscheinlichkeiten, von der Konfiguration  $X$  nach der Konfiguration  $Y$  zu gelangen, mit der, der umgekehrten Richtung überein. Das detaillierte Gleichgewicht ist gegeben.

### Der Loop-Algorithmus für das korrespondierende klassische Vertex-Modell

Für die in dieser Arbeit untersuchten Quanten-Spin-Modelle ist es nicht möglich, in geschlossener Form die Abhängigkeiten der Observablen von den einfließenden Parametern anzugeben. Daher muss auf numerische Daten zurückgegriffen werden, die aus der Simulation des zu dem quantenmechanischen System gehörenden korrespondierenden klassischen Vertex-Modells gewonnen wurden.

Hierzu wurde das korrespondierende klassische Vertex-Modell über Monte-Carlo-Simulationen untersucht. Zur Illustration der Implementierung des verwendeten Loop-Algorithmus soll hier das korrespondierende klassische Modell des in Abschnitt 5.3.2 untersuchten schwachferromagnetischen, quantenmechanischen Modells näher betrachtet werden. In dem Abschnitt 5.3.2 wird genauer auf die Konstruktion des Grundzustandes und auf die Bestim-

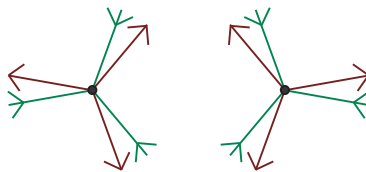


Abbildung 4.11.: Zwei mögliche Vertices im korrespondierenden klassischen Vertex-Modell, je auf Untergitter (A) und auf Untergitter (B).

mung der Ein-Spin-Zustände aus den Vertices eingegangen.

Die in diesem Modell zu betrachtenden Vertices bilden dabei ein Hexagonalgitter nach, das auf jeder der drei Kanten zwei Bonds trägt. Dabei korrespondieren die in Abb. 4.11 rot hervorgehobenen Bonds zu den *Ket*-Zuständen des quantenmechanischen Modells und die grünen zu den *Bra*-Zuständen. Im Gegensatz zu den korrespondierenden Vertex-Modellen aus Kapitel 3 soll hier darauf verzichtet werden, die Doppelindices (oder Doppelpfeile) durch einfache Indices zu ersetzen. Des Weiteren sollen die (grünen) Pfeile der Bra-Zustände derart uminterpretiert werden, dass hereinlaufende Pfeile positiv statt negativ und herauslaufende negativ statt positiv gezählt werden.

Es soll der Fall des schwachen Ferromagneten betrachtet werden, für den dann folgende Regel gilt:

$$\mathbf{m}_{ket} = \frac{1}{2} (\#(\text{roter, herauslaufender Pfeile}) - \#(\text{roter, hereinlaufender Pfeile}) + 1) \quad (4.45)$$

$$\mathbf{m}_{bra} = \frac{1}{2} (\#(\text{grüner, hereinlaufender Pfeile}) - \#(\text{grüner, herauslaufender Pfeile}) + 1). \quad (4.46)$$

Vergleicht man die Konstruktion des schwachen Ferromagneten in Kapitel 5.3.2, so entspricht die zusätzlich auftretende +1 in (4.45) den *freien Bonds*.

Der Vorteil dieser Bestimmungsvorschrift ist nun der folgende: Nur Vertices mit genau drei hereinlaufenden und genau drei herauslaufenden Pfeilen haben nicht-verschwindendes Gewicht. Genau dies ist für die Implementierung des Loop-Algorithmus entscheidend.

In der Grafik Abb.4.12 ist ein Ausschnitt des korrespondierenden klassischen Modells des schwachen Ferromagneten perspektivisch dargestellt. Man erkennt ein zweilagiges Vertex-Modell, das an den Gitterplätzen zusammenfällt. Für dieses Vertex-Modell möchte ich im Folgenden die Anwendung eines Loop-Algorithmus erklären: Zunächst soll die im Kasten (I.) dargestellte Konfiguration an Pfeilen vorliegen. Es soll der untere linke Gitterpunkt als Startpunkt zufällig ausgewählt worden sein. Von hier aus startet der Loop und führt über den unteren grünen Pfeil zu dem nächsten Vertex. In Pfeilrichtung führt der Pfad weiter über den oberen roten Bond zum dritten Vertex und so fort. Der Loop soll dann vom linken, oberen Vertex kommend, über den grünen Bond geschlossen werden. Natürlich sei hier

wieder bemerkt, dass im Allgemeinen der Loop nicht an dem Start-Vertex zum ersten Mal auf einen bereits besuchten Vertex stößt. Die Möglichkeiten eines Long-loop-Algorithmus oder eines Short-loop-Algorithmus sind aber analog zu dem zuvor beschriebenen Loop-Algorithmus. Es soll hier nur auf die Unterschiede eingegangen werden.

Betrachtet man die sechs Vertices, so entsprechen diese anfangs der Reihenfolge (und dem

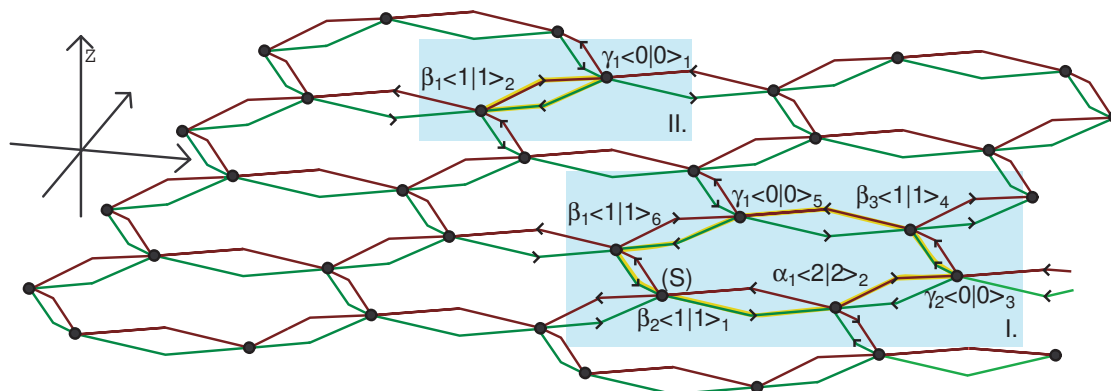


Abbildung 4.12.: Simulation des korrespondierenden Vertex-Modells

Gewicht)  $\langle loop I. \rangle = \beta \langle 1|1 \rangle_1 \cdot \alpha \langle 2|2 \rangle_2 \cdot \gamma \langle 0|0 \rangle_3 \cdot \beta \langle 1|1 \rangle_4 \cdot \gamma \langle 0|0 \rangle_5 \cdot \beta \langle 1|1 \rangle_6 = \alpha \cdot \beta^3 \cdot \gamma^2$ . Um eine neue Konfiguration vorzuschlagen, werden nun alle Pfeile auf dem Loop umgeklappt, was zu der Konfiguration (und dem Gewicht)  $\langle loop I. \rangle' = \beta \langle 1|1 \rangle_1 \cdot \beta \langle 1|1 \rangle_2 \cdot \beta \langle 1|1 \rangle_3 \cdot \gamma \langle 0|0 \rangle_4 \cdot \beta \langle 1|1 \rangle_5 \cdot \beta \langle 1|1 \rangle_6 = \beta^5 \cdot \gamma$  führt. Wie im Loop-Algorithmus zuvor müssen nun die Gewichte  $\langle loop I. \rangle = \alpha \cdot \beta^3 \cdot \gamma^2$  und  $\langle loop I. \rangle' = \beta^5 \cdot \gamma$  miteinander verglichen werden, um zu entscheiden, ob die neue Konfiguration angenommen wird oder nicht.

Betrachtet man also den Ausdruck der Akzeptanzwahrscheinlichkeit aus (4.19), so tritt ein weiterer Unterschied zu dem Metropolis-Algorithmus des Sechsz-Vertex-Modells zu Tage. Den Vertices im korrespondierenden klassischen Vertex-Modell werden keine Energien zugeschrieben, sondern Gewichte, sodass man die Akzeptanzwahrscheinlichkeit hier schreiben muss als:

$$A(Y, X) = \min \left( 1, \frac{\langle loop I. \rangle'}{\langle loop I. \rangle} \right), \quad (4.47)$$

wobei verwendet wurde, dass sich die Beiträge des übrigen Gitters (damit sind die Vertices gemeint, die nicht an dem Loop beteiligt sind) in dem Bruch wegkürzen.

Ein weiterer Unterschied zum herkömmlichen Loop-Algorithmus ist im zweiten Kasten (II.) aus Abb.4.12 ersichtlich. War es bei dem Sechsz-Vertex-Modell nicht möglich, so kleine Loops zu erzeugen, dass nur zwei Vertices an diesem beteiligt sind, so ist dies hier auf Grund der zwei Bonds pro Kante durchaus möglich. Tatsächlich erhält man auch hier als Vorschlag eine andere Konfiguration als die ursprüngliche. Es wird  $\langle loop II. \rangle = \gamma \langle 0|0 \rangle_1 \cdot \beta \langle 1|1 \rangle_2$  zu  $\langle loop II. \rangle' = \beta \langle 1|1 \rangle_1 \cdot \gamma \langle 0|0 \rangle_2$ , die hier aber das gleiche Gewicht  $\langle loop II. \rangle = \beta \cdot \gamma$  tragen.

Die Ergodizität des Algorithmus sowie das detaillierte Gleichgewicht lassen sich direkt aus dem des „gewöhnlichen“ Loop-Algorithmus ablesen. Ein entscheidender Unterschied soll aber noch erläutert werden. Das Sechs-Vertex-Modell unterliegt der Beschränkung, dass immer zwei hereinlaufende Pfeile und zwei herauslaufende Pfeile pro Vertex vorhanden sein müssen. Das korrespondierende klassische Vertex-Modell unterliegt einer ähnlichen Einschränkung. Auf den Ket-Vertices müssen ebenso viele Pfeile hereinlaufen, wie auf den Bra-Vertices herauslaufen müssen. Damit diese Vorschrift nicht verletzt wird, ist hier der Loop-Algorithmus notwendig.

Bei dieser Implementierung eines Loop-Algorithmus für das korrespondierende klassische Vertex-Modell, wird der Unterschied zur Abbildung eines quantenmechanischen Modells auf ein klassisches mittels Trotter-Suzuki-Zerlegung deutlich.

Bei der Trotter-Suzuki-Zerlegung wird der quantenmechanische Hamilton-Operator für das *gesamte* System auf ein klassisches Modell in einer Dimension höher abgebildet. Bei endlicher imaginärer Zeit wird damit das ursprüngliche System mit einem klassischen Modell *genähert*. Hingegen wird bei der hier benutzten Abbildung auf das korrespondierende klassische Vertex-Modell nur der Grundzustand auf ein klassisches Modell abgebildet. Diese Abbildung ist exakt. Es wird dabei der Grundzustand eines *D-dimensionalen, quantenmechanischen Systems mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen* auf ein *D-dimensionales, klassisches mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen* abgebildet. Auch nicht-triviale Grundzustände können durch die Simulation exakter, korrespondierender klassischer Modelle untersucht werden. Dabei werden Norm und Korrelationsfunktionen des quantenmechanischen Grundzustandes durch Zustandssumme und (thermische) Erwartungswerte des klassischen Modells ausgedrückt.

# 5. Vertex-Zustands-Modelle auf unterschiedlichen Gittern

## 5.1. Spin-2 auf dem Quadratgitter

Nach den einleitenden Kapiteln über die Methoden, die in dieser Arbeit ihre Anwendung finden, möchte ich in diesem Kapitel ein erstes Modell vorstellen. Dabei möchte ich auf das von H. Niggemann, A. Klümper und J. Zittartz beschriebene und untersuchte Vertex-Zustands-Modell auf dem Quadratgitter mit Spins der Größe  $S = 2$  [Niggemann u. a. 2000] zurückgreifen. Auf der einen Seite ermöglicht mir dieses Modell die Implementierung meiner Monte-Carlo-Simulationen zu verifizieren und die Anwendung der unterschiedlichen beschriebenen Monte-Carlo-Methoden beispielhaft vorzuführen. Auf der anderen Seite konnte ich weitere Ergebnisse für dieses Modell erzielen, die ich hier vorstellen möchte.

Die Größe des Spins  $S = 2$  entspricht gerade der halben Koordinationszahl des Quadratgitters  $z = 4$  und erfüllt so die in Abschnitt 3.3 geforderte Mindestgröße des zu betrachtenden Spins. In diesem Sinne kann das Modell als generisch bezeichnet werden und ist vergleichbar mit der Spin-1-Kette, für die in einer Dimension auch eine Realisation als Matrix-Produkt-Grundzustand für den Optimum-Grundzustand vorliegt (siehe Beispiel 3.67). Mit einer Koordinationszahl  $z = 2$  gilt auch hier die Regel  $z = 2S$ .

Im nächsten Abschnitt wird für Spin-3 Teilchen ein Vertex-Zustands-Modell auf einem kubischen Gitter konstruiert und untersucht werden. Das Zweifache der Größe des Spins stimmt auch hier mit der Koordinationszahl  $z = 6$  überein. Es ist auch möglich, zum Beispiel in zwei Dimensionen, ein Gitter mit der Koordinationszahl  $z = 6$  anzunehmen, und auf diesem ein Spin-3 Modell zu untersuchen. Es wird daher in einem späteren Abschnitt 5.2.3 ein Vertex-Zustands-Modell für Spin-3 auf einem Dreiecksgitter vorgestellt.

Die Größe des Spins in Bezug auf die Koordinationszahl stellt eine Mindestanforderung dar ( $2S \geq z$ ). In Abschnitt 5.2.2 wird ein Spin-3 Vertex-Zustands-Modell auf dem Hexagonalgitter vorgestellt, und in den Abschnitten 5.3.1, 5.3.2 werden auf der gleichen Topologie Spin-2 Modelle betrachtet.

Zunächst möchte ich aber, wie oben erwähnt, auf das Spin-2 Modell auf dem Quadratgitter eingehen. Hierbei sind die Bezeichnungen in Übereinstimmung mit [Niggemann u. a. 2000] gewählt worden<sup>1</sup>. Das Aussummieren zweier Vertices führt auf die 16 lokalen Zwei-Spin-

---

<sup>1</sup>Zur Übersicht: Ein-Spin-Zustände mit der Magnetisierung  $m = \pm 2$  sind proportional zu  $b$  und die zur

Zustände:

$$\begin{array}{ll}
 ab(|1, 2\rangle + \sigma|2, 1\rangle) & ab(|\bar{1}, \bar{2}\rangle + \sigma|\bar{2}, \bar{1}\rangle) \\
 a^2|1, 1\rangle + b|0, 2\rangle & a^2|\bar{1}, \bar{1}\rangle + b|0, \bar{2}\rangle \\
 a^2|1, 1\rangle + b|2, 1\rangle & a^2|\bar{1}, \bar{1}\rangle + b|\bar{2}, \bar{1}\rangle \\
 a(|0, 1\rangle + \sigma|1, 0\rangle) & a(|0, \bar{1}\rangle + \sigma|\bar{1}, 0\rangle) \\
 a(|0, 1\rangle + \sigma b|\bar{1}, 2\rangle) & a(|0, \bar{1}\rangle + \sigma b|\bar{1}, \bar{2}\rangle) \\
 a(|1, 0\rangle + \sigma b|\bar{2}, \bar{1}\rangle) & a(|\bar{1}, 0\rangle + \sigma b|\bar{2}, \bar{1}\rangle) \\
 |0, 0\rangle + \sigma a^2|1, \bar{1}\rangle & |0, 0\rangle + \sigma a^2|\bar{1}, \bar{1}\rangle \\
 a^2|1, \bar{1}\rangle + \sigma b^2|\bar{2}, \bar{2}\rangle & a^2|\bar{1}, \bar{1}\rangle + \sigma b^2|\bar{2}, \bar{2}\rangle.
 \end{array} \tag{5.1}$$

Wie an dem Beispiel 3.15 vorgeführt wurde, müssen auch hier die Parameter, die in dem lokalen Hamilton-Operator einfließen, eingeschränkt werden, damit diese Zustände lokale Grundzustände sind. Geht man von den lokalen Hamilton-Operator 5.39 aus wie er in dem Kapitel 5.3.1 eingeführt werden<sup>2</sup>, so müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:

$$\begin{aligned}
 \lambda_3^\sigma = \lambda_{21}^+ = \lambda_2^- = \lambda_{11}^+ = \lambda_{11}^- = \lambda_{12}^\sigma = \lambda_{01}^+ = \lambda_{01}^- = \lambda_{01}^- = 0 & \tag{5.2} \\
 a_1 = \frac{2a^2}{b}, a_2 = a_3 = \frac{1}{b} & \\
 \lambda_4, \lambda_3^{-\sigma}, \lambda_{22}^+, \lambda_{12}^{-\sigma}, \lambda_{03}^+ > 0. &
 \end{aligned}$$

Damit besitzt das Spin-2 Vertex-Zustands-Modell 7 kontinuierliche Parameter (5  $\lambda$ -Parameter und zwei Superpositionsparameter  $a$  und  $b$ ), wobei eine frei wählbare Skala eingeschlossen ist. Die Anzahl der nicht-trivialen Parameter beträgt somit 6. Zusätzlich tritt noch ein diskreter Parameter  $\sigma = \pm 1$  auf. Da der globale Grundzustand aus den 16 lokalen Grundzuständen aufgebaut wird, wird dieser von den kontinuierlichen Parametern  $a$  und  $b$  und dem diskreten  $\sigma$  gesteuert.

Die vorliegende Ordnung ist antiferromagnetisch in dem Sinne, als dass die longitudinalen Nächste-Nachbarn-Korrelationen negatives Vorzeichen haben, und sowohl der Erwartungswert der Magnetisierung pro Spin  $\langle \mathbf{S}_i^z \rangle = 0, \forall i$ , als auch der für die globale Magnetisierung  $\langle \mathbf{S}_{tot.}^z \rangle = 0$  auf jedem endlichen Gitter verschwinden.

Im thermodynamischen Limes kann in Abhängigkeit der Parameter  $a$  und  $b$  ein Quantenphasenübergang beobachtet werden. In der ungeordneten Phase ist der Grundzustand eindeutig und hat die volle Translationsinvarianz des zu Grunde liegenden Gitters. In der geordneten

---

Magnetisierung  $\mathbf{m} = \pm 1$  sind proportional zu  $a$ . Ein-Spin-Zustände verschwindender Magnetisierung ( $\mathbf{m} = \pm 0$ ) sind proportional zu 1.

<sup>2</sup>Da ich hier auf bereits veröffentlichte Ergebnisse von [Niggemann u. a. 2000] eingehe, möchte ich mich an dieser Stelle kurzfassen. Später wird genauer erläutert, wie man den allgemeinen lokalen Hamilton-Operator für die Spin-2 Modelle aufstellt.



Phase ist der Grundzustand zweifach entartet und besitzt eine endliche Untergittermagnetisierung. Als Ordnungsparameter eignet sich daher folgender Erwartungswert:

$$\langle O \rangle = \left| \left\langle \frac{1}{N} \sum_{\vec{J}} S^z e^{i\vec{J}\cdot\vec{K}} \right\rangle \right|. \quad (5.3)$$

Der Ordnungsparameter ist in der ungeordneten Phase Null und in der geordneten endlich. Hierbei ist  $\vec{K}$  der, die Ordnung charakterisierende, Wellenvektor. In dem hier vorliegenden Fall ist  $\vec{K} = (\pi, \pi)$ , und  $\vec{J} = (i, j)$  benennt den Gitterplatz.

In der oben erwähnten Veröffentlichung [Niggemann u. a. 2000] wird der Phasenübergang entlang einer Geraden im Parameterraum, der durch  $a$  und  $b$  aufgespannt wird, beschrieben. Die Gerade ist gegeben durch  $b_c^2 = (3.0 \pm 0.1)a_c^2 + (3.7 \pm 0.3)$  und wurde mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen ermittelt. Dieses und andere Ergebnisse aus dem erwähnten Artikel habe ich zur Überprüfung meiner Monte-Carlo-Simulationen verwendet und im Rahmen der gegebenen Genauigkeiten verifizieren können.

Zur exakten Bestimmung der Phasengrenze eignet sich neben der Messung des Ordnungsparameters selber auch eine weitere Größe gut. Das Diagramm 5.1 zeigt Messwerte in der Umgebung des kritischen Punktes für die Größe  $\left| \langle S_0^z S_1^z \rangle - \langle S_0^z S_{L/2}^z \rangle \right|$ . Der erste Anteil entspricht dem Erwartungswert der longitudinalen Nächste-Nachbarn-Korrelation und der zweite Anteil dem der longitudinalen Korrelation im Abstand einer halben Gittergröße  $L/2$ . Die longitudinale Korrelation sollte auf einem periodisch geschlossenen Gitter für Abstände  $L/2$  betragslich den geringsten Wert annehmen, da hier die maximale Entfernung zwischen zwei Gitterplätzen erreicht wird. Um den Verlauf der gezeigten Kurve zu verstehen, muss man sich den Verlauf der longitudinalen Korrelationsfunktion in der geordneten, in der ungeordneten Phase und in der Nähe des kritischen Punktes ansehen. Da die Korrelationsfunktionen antiferromagnetisches Verhalten widerspiegeln, also im Abstand  $r$  alternierend sind, betrachte ich dazu den Betrag der Korrelationsfunktion.

In der ungeordneten Phase liegt ein nicht entarteter Grundzustand vor, der von den angeregten Zuständen durch eine Lücke getrennt ist. Folglich zeigt die Korrelationsfunktion ein exponentielles Abklingen als Funktion des Abstandes  $r$  mit endlicher Korrelationslänge  $\xi_\ell$ . Dieses Verhalten wird für mittelgroße und große Abstände erwartet, was ich mit den Monte-Carlo-Simulationen gut bestätigen konnte, wie Abb. 5.2 zeigt. In der Nähe des kritischen Punktes divergiert die Korrelationslänge, die Anregungslücke schließt sich auf Grund sich absenkender Energiebänder. Man erwartet ein algebraisches Verhalten für das Abklingen der Korrelationsfunktionen. Die Monte-Carlo-Simulation für die Korrelationsfunktion am kritischen Punkt  $b_c^2 = 6.4$  und  $a_c^2 = 1$  bestätigt diese Erwartung, wie in Abb. 5.3 (a) mit der Fitkurve  $\langle S_0^z S_r^z \rangle = c_\ell \left( \frac{1}{\sqrt{r}} + \frac{1}{\sqrt{120-r}} \right)$ , für eine Gittergröße von  $120 \times 120$  Gitterplätzen, zu sehen ist. Damit ist der kritische Exponent  $\eta = 1/2$ , in Übereinstimmung mit den Berechnungen von H. Niggemann *et al.*

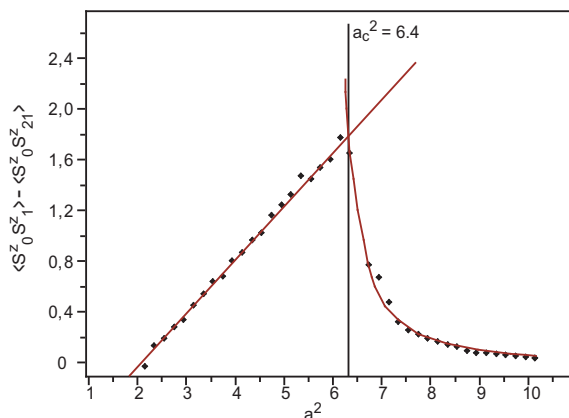


Abbildung 5.1.: Bestimmung des kritischen Punktes zu  $b_c^2 = 6.4 \pm 0.1$  anhand des Erwartungswertes  $\left| \langle S_0^z S_1^z \rangle - \langle S_0^z S_{L/2}^z \rangle \right|$  bei einer Gittergröße von  $42 \times 42$  Gitterplätzen mit  $a^2 = 1$ .

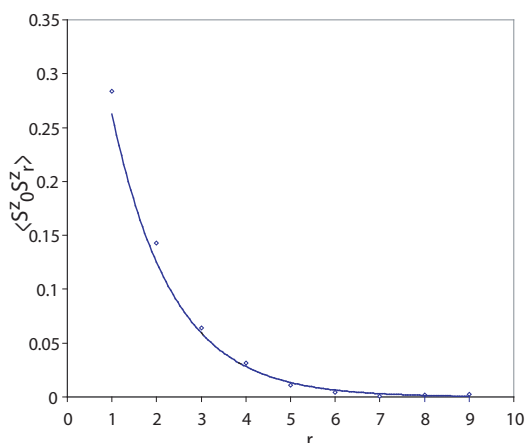
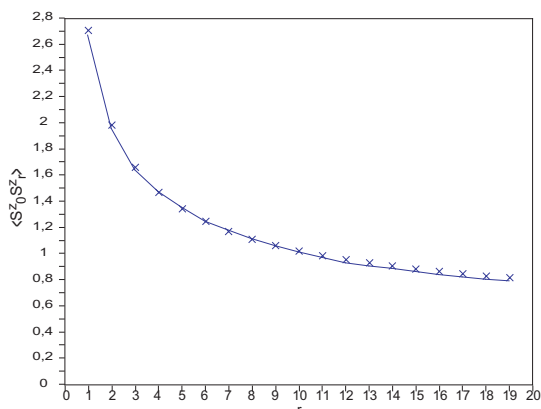
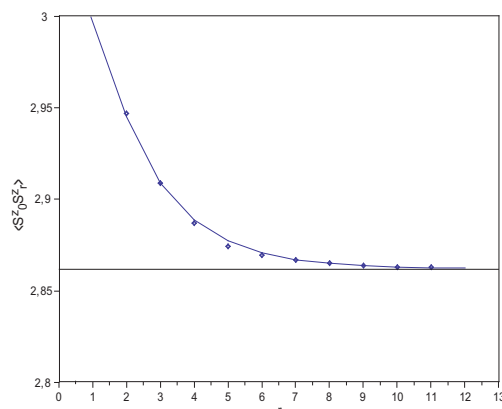


Abbildung 5.2.: In der ungeordneten Phase klingt die longitudinale Korrelationsfunktion exponentiell auf Null ab. Die Abb. zeigt die Messwerte für  $a^2 = 1$ ,  $b^2 = 4$  und die Fitkurve  $|\langle S_0^z S_r^z \rangle| \approx 0.55e^{-r/1.4}$ , mit einer Korrelationslänge  $\xi_\ell \approx 1.4$ .

In der geordneten Phase ist der Erwartungswert der Untergittermagnetisierung endlich. Für die longitudinale Korrelationsfunktion erwartet man ein exponentielles Abklingen auf einen endlichen Wert:  $\langle S_0^z S_r^z \rangle = \langle S_0^z \rangle \langle S_r^z \rangle + (-1)^r a e^{-r/\xi'_\ell}$ . Auch dieses Verhalten konnte ich in den Simulationen bestätigen (siehe Abb. 5.3 (b)).



(a) Am kritischen Punkt,  $a_c^2 = 1, b_c^2 = 6.4$  zeigt die longitudinale Korrelationsfunktion kritisches Verhalten. Fitkurve:  $\langle S_0^z S_r^z \rangle = c_\ell \left( \frac{1}{\sqrt{r}} + \frac{1}{\sqrt{120-r}} \right)$ , mit  $c_\ell = 2.46$



(b) In der geordneten Phase,  $a^2 = 1, b^2 = 7.4$  fällt die longitudinale Korrelation exponentiell auf einen endlichen Wert ab  $\langle S_0^z S_r^z \rangle = A_\ell e^{-r/\xi_\ell} + \langle S_0^z \rangle \langle S_r^z \rangle$ , mit  $A_\ell = 0.0143, \xi_\ell = 2.03, \langle S_0^z \rangle \langle S_r^z \rangle = 2.86$ .

Abbildung 5.3.: Die longitudinale Korrelationsfunktion aufgetragen gegen den Abstand  $r$ . Gittergröße:  $120 \times 120$

Aus diesen qualitativ sehr unterschiedlichen Verläufen der Korrelationsfunktionen lässt sich gut verstehen, wie sich der Erwartungswert  $|\langle S_0^z S_1^z \rangle| - |\langle S_0^z S_{L/2}^z \rangle|$  zur genauen Bestimmung des kritischen Punktes eignet, wie ich im Folgenden darstellen möchte. Die Abbildung 5.1 zeigt den Verlauf des Erwartungswertes in Abhängigkeit des Parameters  $b^2$ , der das Modell von der ungeordneten in die geordnete Phase treibt. In dem sich nahezu linear darstellenden Bereich kommt der entscheidende Beitrag von der Nächste-Nachbarn-Korrelation, die stetig ansteigt, da Spins mit der  $S^z$ -Komponente  $S^z = 2$  zunehmend wichtig werden. Auf Grund des schnellen exponentiellen Abklingens der Korrelation als Funktion des Abstands  $r$  liefert hingegen der zweite Anteil wenig Beitrag. Anders sieht dies am kritischen Punkt aus, wo sich das Verhalten dramatisch ändert. In der geordneten Phase ist die Nächste-Nachbarn-Korrelation zwar weiterhin groß, aber da die longitudinale Korrelationsfunktion nur noch auf einen endlichen Wert exponentiell abklingt, wird der zweite Anteil zunehmend wichtig. Die Differenz sinkt damit auf Null ab, je größer  $b^2$  wird.

Die Änderung dieses qualitativen Verhaltens wird durch einen scharfen Knick markiert, der den kritischen Punkt darstellt. Diese Methode ermöglicht eine genauere Bestimmung des kritischen Punktes, als die Messung des Ordnungsparameters alleine. Die genaue Bestimmung des kritischen Punktes ist aber hier notwendig, da ich den kritischen Exponenten, mit dem der Ordnungsparameter in der Nähe des kritischen Punktes anwächst, bestimmen wollte.

Der Verlauf der Kurve ist auch Ausdruck der Divergenz der Korrelationslänge am Phasenübergangspunkt und der Endlichkeit der Korrelationslänge innerhalb der Phasen. Weiter unten wird auch noch eine Finite-size-Analyse durchgeführt werden, die auch die Bestim-

mung des kritischen Punktes sowie des kritischen Exponenten ermöglicht.

Es ist zu erwarten, dass der Ordnungsparameter mit dem, für ein zweidimensionales Ising-Modell typischen, kritischen Exponenten  $\beta_{Ising} = 1/8$  anwächst. Der Phasenübergang führt den Grundzustand von einer Eindeutigkeit hin zu einer zweifachen Entartung. Es wird dabei die diskrete Translationsinvarianz des zu Grunde liegenden Gitters gebrochen. Diese besteht in der geordneten Phase nur noch für eine vergrößerte Einheitszelle von zwei Gitterpunkten.

In der Abb. 5.4 sind die Simulationsergebnisse für den Ordnungsparameter über den Abstand zum kritischen Punkt im doppellogarithmischen Plot aufgetragen. Der Verlauf zeigt eine Gerade, die das zu erwartende kritische Verhalten widerspiegelt. Ihre Steigung konnte ich mit  $\beta = 0.127 \pm 0.006$  bestimmen, was den kritischen Exponenten  $\beta_{Ising} = 1/8$  für eine Monte-Carlo-Simulation gut bestätigt.

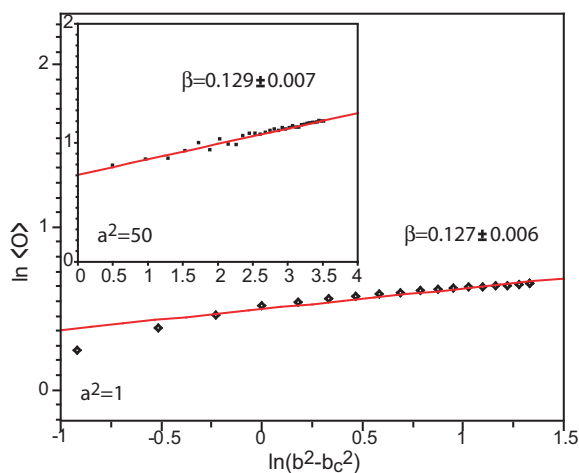


Abbildung 5.4.: Bestimmung des kritischen Exponenten bei  $a^2 = 1$  zu  $\beta = 0.127 \pm 0.006$  im doppellogarithmischen Plot. Fitgerade:  $\ln(\langle O \rangle) = (0,49 \pm 0.01) + (0,127 \pm 0.006) \ln(b^2 - b_c^2)$ . Auch für  $a^2 = 50$  kann der kritische Exponent  $\beta = 1/8$  bestätigt werden. Fitgerade:  $\ln(\langle O \rangle) = (0,71 \pm 0.03) + (0,129 \pm 0.007) \ln(b^2 - b_c^2)$ .

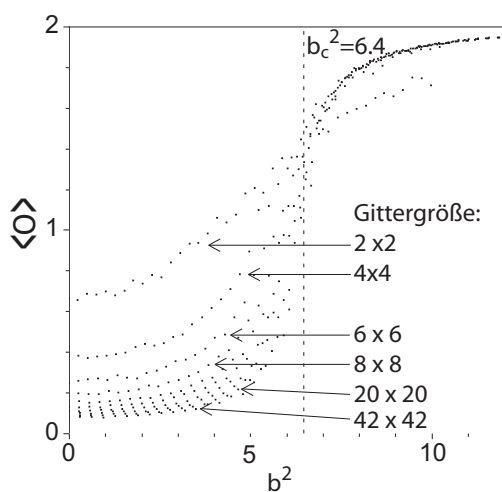
Auch für andere Parameterbereiche, etwa  $a^2 = 2, 10, 50$  konnte der kritische Exponent von  $\beta = 1/8$  gut bestätigt werden. Über mehrere Dekaden lässt sich also ein Ising-artiger Übergang vermuten.

Die hier betrachteten Ergebnisse wurden mittels Monte-Carlo-Simulationen größtenteils auf Gittern der Abmessung  $42 \times 42$  Gitterplätzen erzielt. Wie in Kapitel 4.3.1 beschrieben, ist eigentlich eine Betrachtung mittels des Finite-size-scaling notwendig, um den Effekt endlicher Gittergrößen auszuschließen. In Abbildung 5.5 (a) sind Messreihen des Ordnungsparamete-

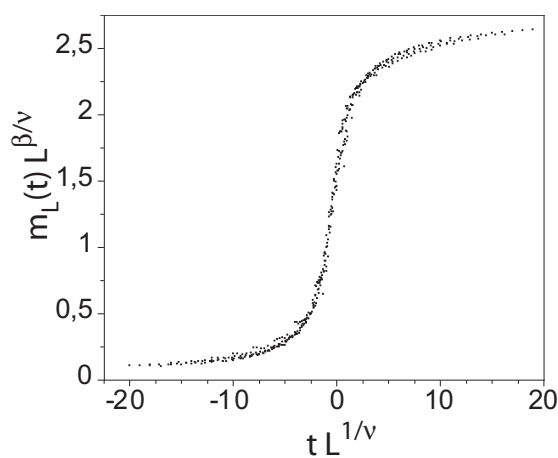
ters in Abhängigkeit des Parameters  $b^2$  für unterschiedliche Gittergrößen zu sehen. Man erkennt eine deutliche Abhängigkeit von der Systemgröße für „kleine“ Systeme ( $L \lesssim 14$ ) im ungeordneten Bereich (links der gestrichelten Linie). Für Systemgrößen größer  $20 \times 20$  sind die Abhängigkeiten gering, wie der Vergleich mit einer Systemgröße  $42 \times 42$  zeigt. Dies gilt umso mehr für den Bereich der geordneten Phase (rechts der gestrichelten Linie). Dieser Bereich dient zur Bestimmung des kritischen Exponenten im logarithmischen Plot und es ist nicht verwunderlich, dass damit der kritische Exponent ähnlich gut bestimmt werden kann, wie mit einer Finite-size-Analyse selber.

In Abbildung 5.5 (b) ist eine solche Analyse zu sehen, hier fallen die Skalenfunktionen für die unterschiedlichen Gittergrößen aufeinander, wenn man  $\beta \approx 0.127$ ,  $\nu \approx 1$  und  $b_c^2 \approx 6.4$  wählt. Die oben getroffenen Aussagen lassen sich mit diesem Ergebnis gut bestätigen. Man erhält neben dem kritischen Exponenten  $\beta \approx \frac{1}{8}$  auch den kritischen Exponenten  $\nu \approx 1$  der Universalitätsklasse eines 2D-Ising-Übergangs.

Die Ergebnisse zeigen aber auch, dass die hier betrachteten Vertex-Zustands-Modelle relativ unempfindlich gegenüber der Endlichkeit der Systeme sind. Für Gitter größer  $40 \times 40$  sind die erzielten Ergebnisse daher ausreichend genau (im Vergleich zum sonstigen numerischen Rauschen). Für die folgenden Modelle referiere ich daher immer die Ergebnisse endlicher Gitter. Aber auch hier habe ich mich an ausgewählten Punkten davon überzeugt, dass keine starken Finite-size-Effekte vorliegen.



(a) Der Ordnungsparameter in Abhängigkeit des Parameters  $b^2$  bei  $a^2 = 1$  für unterschiedliche Gittergrößen.



(b) Trägt man die Skalenfunktion  $\tilde{m}(t)$  gegen  $tL^{1/\nu}$  auf, so fallen alle Kurven für  $\beta \approx 0.127$  und  $\nu \approx 1$  zusammen.

Abbildung 5.5.: Die Skalenanalyse zeigt, dass die hier betrachteten Vertex-Zustands-Modelle bei kleinen Gittergrößen von der Systemgröße abhängen. Für eine Größe ab ca.  $20 \times 20$  ist die Abhängigkeit gering.

In dem nächsten Kapitel 5.2.1 werde ich ein Spin-3 Modell auf einem kubischen Gitter vorstellen, das bei geeigneter Wahl der Parameter einen Phasenübergang erster Ordnung zeigt. Um diesen sicher zu identifizieren, habe ich die in Kapitel 4.3.2 beschriebene Methode der Hysterese-Messung angewendet. Damit ein Vergleich mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung zur Unterscheidung vorliegt, habe ich für den hier beobachteten Phasenübergang eine Hysterese-messung durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.6 dargestellt.

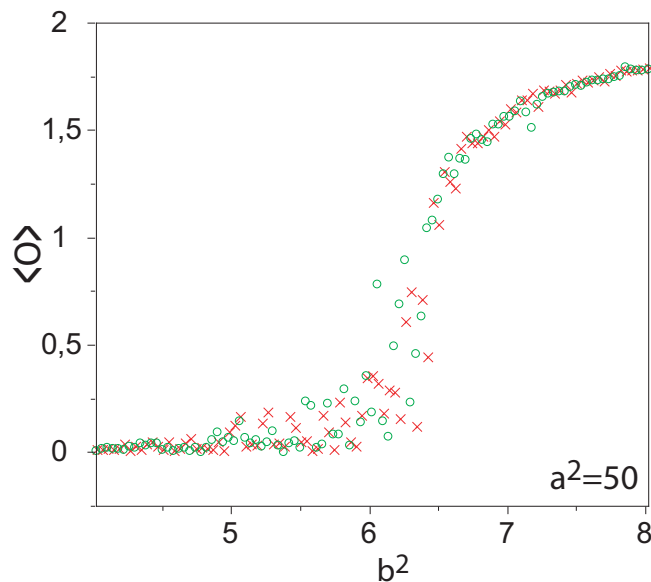


Abbildung 5.6.: Bei einem Phasenübergang zeigt eine Hysterese-messung keine typische Hystereseschleife, wie es im Fall eines Phasenübergangs erster Ordnung der Fall ist.

Wie zu erwarten war, zeigen beide Läufe (der, von kleinen Werten  $b^2$  kommend (rote Kreuze) und der, von großen Werten  $b^2$  kommend (grüne Kreise)) keine signifikante Abweichung voneinander. Eine Hystereseschleife tritt nicht auf.

### 5.1.1. 8-Vertex-Modell als Näherung

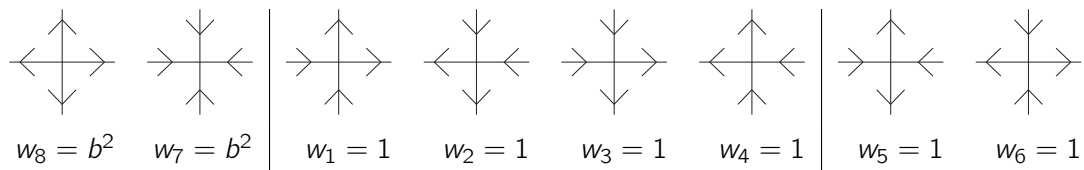
Das korrespondierende klassische Vertex-Modell lässt sich als ein doppeltes oder zweilagiges 16-Vertex-Modell begreifen, wie es im Kapitel 4.4.1 verständlich wurde. Dort wurde festgestellt, dass die Vertices verschwindendes Gewicht haben sollen, deren Anzahl hereinlaufender Pfeile auf den Bra-Bonds sich von der Anzahl herauslaufender auf den Ket-Bonds unterscheidet (Betrachtet *nach* der Uminterpretation der Pfeilrichtungen auf den Bra-Bonds (siehe Gl. (4.45))). Neben dieser Feststellung zeigen die Simulationen zusätzlich, dass die Wahrscheinlichkeit, unterschiedlich ausgerichtete Pfeile auf den zwei Bonds einer Richtung zu haben, deutlich größer ist, als die paralleler Pfeile (Wieder betrachtet *nach* der Umin-

terpretation der Pfeile.). Dabei ist das Größenverhältnis der Wahrscheinlichkeiten abhängig von den Parametern  $a$  und  $b$ . Im Bereich des Phasenübergangs gibt die folgende Tabelle 5.1 einen Anhaltspunkt für die Größenordnungen.

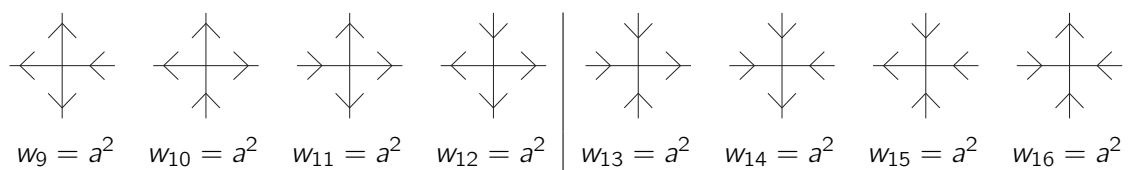
$a_c^2$	$b_c^2$	$p_{\uparrow\uparrow} \vee p_{\downarrow\downarrow}$
1	6.7	0.7 %
2	9.7	1.0 %
3	12.7	1.1 %
4	15.7	1.1 %
5	18.7	1.2 %
6	21.7	1.2 %
7	24.7	1.3 %

Tabelle 5.1.: Die Wahrscheinlichkeit von parallel gestellten Pfeilen bei unterschiedlichen kritischen Parametern  $a_c$  und  $b_c$ . Gittergröße:  $42 \times 42$

Die Tabelle zeigt, dass entlang der kritischen Linie die Wahrscheinlichkeit parallele Pfeile auf den Bra- und den Ket-Bonds zu finden in der Größenordnung von ca. 1% liegt. Damit lässt sich das korrespondierende klassische Vertex-Modell gut durch das allgemeine 16-Vertex-Modell annähern. Man erhält folgende Gewichte für die Vertices:




Bei diesen ersten acht Vertices habe ich die übliche Standardreihenfolge angewendet, wie sie bereits in [Baxter 1982] in Abb. 10.1 verwendet wird. Neben diesen acht Vertices sind weitere acht möglich:



Da alle Vertices unter Spin-Flip, d.h. unter Umkehr aller Pfeile, invariant sind – also das gleiche Gewicht erhalten – wird das Modell als feldfrei bezeichnet. Es ist also möglich, das Modell auf ein Acht-Vertex-Modell abzubilden.

Dies gelingt mit Hilfe einer Transformation, die auf die Bonds angewendet wird. Bezeichnet man die Pfeile, die nach links gerichtet sind oder nach unten zeigen mit 1 und die, die nach

rechts oder nach oben zeigen mit 2, so lassen sich die Vertices transformieren. Wird dabei

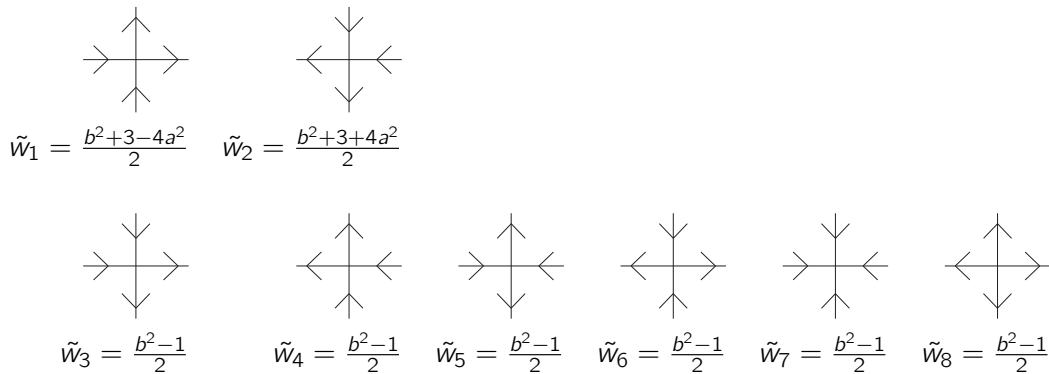
einem Vertex  ein Gewicht  $w(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$  zugeschrieben, so transformiert die Matrix

$$v := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

die Gewichte zu:

$$w'(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) = \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4} w(\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4) v_{\mu_1 \nu_1} v_{\mu_2 \nu_2} v_{\mu_3 \nu_3} v_{\mu_4 \nu_4} \quad (5.5)$$

Dabei ist die Matrix so gewählt, dass sie mit ihrer Transponierten  $v^T$  übereinstimmt, was die Rechnung erheblich vereinfacht. Acht der transformierten Vertices sind Null, und man erhält ein Acht-Vertex-Modell mit folgenden Gewichten:



$$\tilde{w}_1 = \frac{b^2+3-4a^2}{2} \quad \tilde{w}_2 = \frac{b^2+3+4a^2}{2}$$

$$\tilde{w}_3 = \frac{b^2-1}{2} \quad \tilde{w}_4 = \frac{b^2-1}{2} \quad \tilde{w}_5 = \frac{b^2-1}{2} \quad \tilde{w}_6 = \frac{b^2-1}{2} \quad \tilde{w}_7 = \frac{b^2-1}{2} \quad \tilde{w}_8 = \frac{b^2-1}{2}$$

Dieses Acht-Vertex-Modell ist nicht feldfrei. Damit ist keine exakte Lösung in diesem Fall bekannt.

Auch wenn diese Näherung des korrespondierenden klassischen Vertex-Modells nicht exakt ist, lassen sich die Grenzfälle dennoch gut untersuchen. Stimmen die Gewichte der ursprünglichen Vertices alle in etwa überein, also  $b^2 = a^2 = 1$ , so erhält nur das Gewicht des Acht-Vertex-Modells  $\tilde{w}_2 = 4$  einen endlichen Betrag, die anderen sind identisch Null. Damit bestimmt der Vertex zum Gewicht  $\tilde{w}_2$  diesen Punkt. Dies zeigt uns, dass in diesem Bereich ein einfacher Grundzustand vorliegt. In dem ursprünglichen, korrespondierenden klassischen Vertex-Modell markiert dieser Punkt das Hochtemperaturverhalten  $T \rightarrow \infty$ , wenn man die ursprünglichen Faktoren als Boltzmannsgewichte interpretiert. In dem hier betrachteten Acht-Vertex-Modell markiert die Wahl der Parameter den Tieftemperatur-Limes  $T = 0$ . Für Werte  $b^2 \rightarrow \infty$  sind alle Vertices des Acht-Vertex-Modells gleichberechtigt. In der Hochtemperaturphase des Acht-Vertex-Modells liegt eine zweifache Entartung vor. Dies entspricht im ursprünglichen Modell gerade der Entartung der beiden Néel-Zustände, die



hier realisiert werden.

Diese Überlegungen stimmen mit den Ergebnisse der Simulation überein.

### Zusammenfassung der Ergebnisse

Einige, der in Kapitel 4 beschriebenen Methoden der Monte-Carlo-Messungen habe ich hier, auch stellvertretend für die anderen Modelle, vorgeführt. Ich konnte so die Eigenschaften, die in [Niggemann u. a. 2000] vorgestellt wurden, auf der einen Seite bestätigen und weitere Einsichten in das Verhalten erlangen. Auf der anderen Seite konnte ich mich so von der richtigen Implementierung der Monte-Carlo-Methoden überzeugen, die ich auf weitere Modelle angewendet habe. Dabei werde ich im Folgenden nur an den relevanten Stellen explizit auf die verwendete Methode erneut eingehen, ansonsten möchte ich mich oftmals nur auf die Ergebnisse selbst konzentrieren.

Zusätzlich zu den Ergebnissen aus [Niggemann u. a. 2000] konnte ich hier die kritischen Exponenten  $\beta = \frac{1}{8}$  und  $\nu = 1$  eindeutig bestimmen und den kritischen Exponenten  $\eta = \frac{1}{2}$  bestätigen. Die Gerade  $b_c^2 = (3.0 \pm 0.1)a_c^2 + (3.7 \pm 0.3)$  konnte ich als Phasengrenze eines Phasenübergangs zweiter Ordnung bestätigen. Bei der Bestimmung der Zwei-Punkt-Korrelationsfunktionen am kritischen Punkt erhielt ich den kritischen Exponenten  $\eta = \frac{1}{2}$ . Der Exponent  $\eta = \frac{1}{2}$  lässt sich durch folgendes Argument gut verstehen. Das Acht-Vertex-Modell, das hier als Näherung diente, kann auf ein äquivalentes Ising Modell abgebildet werden [Wu 1971, Kadanoff und Ceva 1971]. Hierdurch wird klar, dass ein Zusammenhang zwischen den Bondvariablen (den Pfeilen) der Vertices des Acht-Vertex-Modells besteht und den Ising-Spin-Variablen. Der Zusammenhang kann so ausgedrückt werden:

$$\mu_i = \sigma_{i'} \sigma_{i'+1}, \quad (5.6)$$

wenn mit  $i'$  und  $i' + 1$  die Gitterplätze des Ising-Gitters bezeichnet werden, die die Bondvariable am Gitterplatz  $i$  des Vertex-Modells einschließen. Zwei-Punkt-Korrelationsfunktionen können so in der Sprache des Ising-Modells ausgedrückt werden. Dies führt zu folgender Beziehung:

$$\langle \mu_0 \mu_r \rangle = \langle \sigma_0 \sigma_1 \sigma_{r'} \sigma_{r'+1} \rangle. \quad (5.7)$$

Für den führenden Beitrag zu dieser 4-Spin-Korrelationsfunktion gilt:

$$\langle \sigma_0 \sigma_1 \sigma_{r'} \sigma_{r'+1} \rangle \simeq \langle \sigma_0 \sigma_{r'} \rangle^2. \quad (5.8)$$

Zerfällt die Korrelation  $\langle \sigma_0 \sigma_{r'} \rangle \propto (r')^{-\tilde{\eta}}$  am kritischen Punkt mit einem Exponenten  $\tilde{\eta}$ , so folgt für das Acht-Vertex-Modell der Zerfall mit einem Exponenten  $\eta = 2\tilde{\eta}$ . In dem hier vorliegenden Fall gilt daher  $\eta = 2\tilde{\eta} = 2\frac{1}{4} = \frac{1}{2}$ , mit  $\tilde{\eta} = \eta_{Ising} = \frac{1}{4}$ . Das Ergebnis stimmt mit den beobachteten kritischen Exponenten überein.



## 5.2. Spin-3 Modelle

### 5.2.1. Spin-3 auf dem kubischen Gitter

Im vorherigen Kapitel 5.1 wurde das Spin-2 Modell als generisch für ein Vertex-Zustands-Modell auf dem zweidimensionalen Gitter verstanden. In diesem Sinne kann das hier betrachtete Spin-3 Vertex-Zustands-Modell auf dem kubischen Gitter als generisch für das dreidimensionale System angesehen werden.

Zunächst wird die Konstruktion des Grundzustandes angegeben, danach werde ich die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen des korrespondierenden klassischen Vertex-Modells für unterschiedliche Parameter darstellen und interpretieren.

#### Konstruktion des Grundzustandes

Wie im Anhang A.1 angegeben, lassen sich gemäß den Symmetrien 2-4 (siehe Unterkapitel 2.2) für zwei Spin-3 die 49 Zwei-Spin-Zustände entsprechend den Quantenzahlen  $\mathbf{p}$  für die Parität (Eigenwert des Paritätsoperators  $\mathbf{P}_{ij}$ ) und  $\mathbf{m}$  für die Magnetisierung (Eigenwert des Operators  $\mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z$ ) sortieren. Der lokale Hamilton-Operator lässt sich dann in der Form

$$\begin{aligned}
 \mathbf{h}_{ij} = & \lambda_6 (|v_6\rangle\langle v_6| + |v_{-6}\rangle\langle v_{-6}|) \\
 & + \lambda_5^+ (|v_5^+\rangle\langle v_5^+| + |v_{-5}^+\rangle\langle v_{-5}^+|) + \lambda_5^- (|v_5^-\rangle\langle v_5^-| + |v_{-5}^-\rangle\langle v_{-5}^-|) \\
 & + \lambda_{4,1}^+ (|v_{4,1}^+\rangle\langle v_{4,1}^+| + |v_{-4,1}^+\rangle\langle v_{-4,1}^+|) + \lambda_4^- (|v_4^-\rangle\langle v_4^-| + |v_{-4}^-\rangle\langle v_{-4}^-|) \\
 & + \lambda_{4,2}^+ (|v_{4,2}^+\rangle\langle v_{4,2}^+| + |v_{-4,2}^+\rangle\langle v_{-4,2}^+|) \\
 & + \lambda_{3,1}^+ (|v_{3,1}^+\rangle\langle v_{3,1}^+| + |v_{-3,1}^+\rangle\langle v_{-3,1}^+|) + \lambda_{3,1}^- (|v_{3,1}^-\rangle\langle v_{3,1}^-| + |v_{-3,1}^-\rangle\langle v_{-3,1}^-|) \\
 & + \lambda_{3,2}^+ (|v_{3,2}^+\rangle\langle v_{3,2}^+| + |v_{-3,2}^+\rangle\langle v_{-3,2}^+|) + \lambda_{3,2}^- (|v_{3,2}^-\rangle\langle v_{3,2}^-| + |v_{-3,2}^-\rangle\langle v_{-3,2}^-|) \\
 & + \lambda_{2,1}^+ (|v_{2,1}^+\rangle\langle v_{2,1}^+| + |v_{-2,1}^+\rangle\langle v_{-2,1}^+|) + \lambda_{2,1}^- (|v_{2,1}^-\rangle\langle v_{2,1}^-| + |v_{-2,1}^-\rangle\langle v_{-2,1}^-|) \\
 & + \lambda_{2,2}^+ (|v_{2,2}^+\rangle\langle v_{2,2}^+| + |v_{-2,2}^+\rangle\langle v_{-2,2}^+|) + \lambda_{2,2}^- (|v_{2,2}^-\rangle\langle v_{2,2}^-| + |v_{-2,2}^-\rangle\langle v_{-2,2}^-|) \\
 & + \lambda_{2,3}^+ (|v_{2,3}^+\rangle\langle v_{2,3}^+| + |v_{-2,3}^+\rangle\langle v_{-2,3}^+|) \\
 & + \lambda_{1,1}^+ (|v_{1,1}^+\rangle\langle v_{1,1}^+| + |v_{-1,1}^+\rangle\langle v_{-1,1}^+|) + \lambda_{1,1}^- (|v_{1,1}^-\rangle\langle v_{1,1}^-| + |v_{-1,1}^-\rangle\langle v_{-1,1}^-|) \\
 & + \lambda_{1,2}^+ (|v_{1,2}^+\rangle\langle v_{1,2}^+| + |v_{-1,2}^+\rangle\langle v_{-1,2}^+|) + \lambda_{1,2}^- (|v_{1,2}^-\rangle\langle v_{1,2}^-| + |v_{-1,2}^-\rangle\langle v_{-1,2}^-|) \\
 & + \lambda_{1,3}^+ (|v_{1,3}^+\rangle\langle v_{1,3}^+| + |v_{-1,3}^+\rangle\langle v_{-1,3}^+|) + \lambda_{1,3}^- (|v_{1,3}^-\rangle\langle v_{1,3}^-| + |v_{-1,3}^-\rangle\langle v_{-1,3}^-|) \\
 & + \lambda_{0,1}^+ (|v_{0,1}^+\rangle\langle v_{0,1}^+|) + \lambda_{0,1}^- (|v_{0,1}^-\rangle\langle v_{0,1}^-|) \\
 & + \lambda_{0,2}^+ (|v_{0,2}^+\rangle\langle v_{0,2}^+|) + \lambda_{0,2}^- (|v_{0,2}^-\rangle\langle v_{0,2}^-|) \\
 & + \lambda_{0,3}^+ (|v_{0,3}^+\rangle\langle v_{0,3}^+|) + \lambda_{0,3}^- (|v_{0,3}^-\rangle\langle v_{0,3}^-|) \\
 & + \lambda_{0,4}^+ (|v_{0,4}^+\rangle\langle v_{0,4}^+|),
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

mit den, im Anhang angegebenen lokalen Zwei-Spin-Zuständen  $|v_{i,\alpha}^\pm\rangle$ , schreiben. Diese enthalten in Summe 22 Superpositionsparameter  $a_{1,\dots,22}$ , die die Orientierung der entspre-

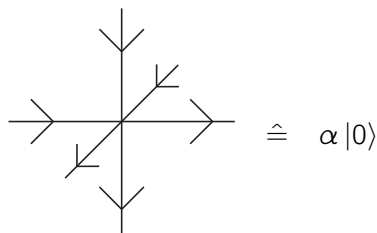


Abbildung 5.7.: Es wird ein typischer Vertex eines Spin-3 auf dem kubischen Gitter dargestellt. Der  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustand ergibt sich aus der Gesamtheit der hereinlaufenden und herauslaufenden Pfeile (siehe unten). Der Vorfaktor  $\alpha$  muss extra bestimmt werden.

chenden Zustände im jeweiligen Unterraum bestimmen. Die lokalen Hamilton-Operatoren  $\mathbf{h}_{ij}$  werden damit durch 28  $\lambda$ -Parameter und 22 Superpositionsparameter eindeutig bestimmt. In diesen 50 kontinuierlichen Parametern ist noch ein trivialer Parameter für den Energie-Nullpunkt und ein Parameter für die Skala enthalten.

Betrachtet man Spin-3 Objekte, angeordnet auf den Knotenpunkten eines kubischen Gitters in drei Dimensionen, so lässt sich ein Optimum-Grundzustand eines Vertex-Zustands-Modells mit 64 unterschiedlichen Vertices konstruieren. Ein typischer Vertex ist in Abbildung 5.7 dargestellt.

Um nicht alle 64 Vertices explizit darstellen zu müssen, soll folgende Identifikation gelten:

$$\hat{=} \omega(\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6) \hat{=} \alpha_{\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6} |\mathbf{m}(\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6)\rangle$$

Hierbei bezeichnen die  $\mu_i$  die entsprechenden Bondvariablen. Die Bondvariablen  $\mu_1$  und  $\mu_2$  sowie  $\mu_3$  und  $\mu_4$  sowie  $\mu_5$  und  $\mu_6$  sind so angelegt, dass sie jeweils auf einer gleichen Richtung liegen. Diese Anordnung führt zu einer etwas übersichtlicheren Benennung der Vorfaktoren  $\alpha$  im Folgenden. Um den  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustand  $|\mathbf{m}\rangle$  zu bestimmen, zählt man die Pfeile, die zum Vertexknoten hinzeigen, mit minus Eins und die, die nach außen zeigen, mit plus Eins. Somit gilt hier die bekannte Vorschrift [Niggemann u. a. 1997], die in Kapitel 3

bereits eingeführt wurde<sup>3</sup>:

$$|\mathbf{m}(\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6)\rangle = \left| \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \mu_i \right\rangle. \quad (5.10)$$

Wie bereits erwähnt ergeben sich die Vorfaktoren  $\alpha_{\vec{\mu}}$  aus den geforderten Symmetrien und man kann die Tabelle 5.2 für die Vertices angeben. Hierbei sind die auftretenden Parameter  $A, B, C, D$  reell und der Parameter  $\sigma$  ist diskret und kann die Werte  $\sigma = \pm 1$  annehmen.

Durch das Aussummieren des inneren Bonds zweier Vertices können nun die lokalen Grundzustände bestimmt werden. Es ergeben sich nach dem Aussummieren der inneren Bonds damit 36 Zwei-Spin-Zustände, die nach geeigneter Wahl der anfänglich 50 Parameter zu lokalen Grundzuständen werden:

$A^2  3, \bar{3}\rangle + \sigma B^2  2, \bar{2}\rangle$	$AB  3, \bar{2}\rangle + \sigma BC  2, \bar{1}\rangle$	$AB  2, \bar{3}\rangle + \sigma BC  1, \bar{2}\rangle$
$A^2  \bar{3}, 3\rangle + \sigma B^2  \bar{2}, 2\rangle$	$AB  \bar{2}, 3\rangle + \sigma BC  \bar{1}, 2\rangle$	$AB  \bar{3}, 2\rangle + \sigma BC  \bar{2}, 1\rangle$
$\sigma B^2  2, \bar{2}\rangle + C^2  1, \bar{1}\rangle$	$\sigma BC  2, \bar{1}\rangle + CD  1, 0\rangle$	$\sigma BC  1, \bar{2}\rangle + CD  0, \bar{1}\rangle$
$\sigma B^2  \bar{2}, 2\rangle + C^2  \bar{1}, 1\rangle$	$\sigma BC  \bar{1}, 2\rangle + CD  0, 1\rangle$	$\sigma BC  \bar{2}, 1\rangle + CD  \bar{1}, 0\rangle$
$C^2  1, \bar{1}\rangle + \sigma D^2  0, 0\rangle$	$CD  1, 0\rangle_\sigma$	$CD  0, \bar{1}\rangle_\sigma$
$C^2  \bar{1}, 1\rangle + \sigma D^2  0, 0\rangle$		
	$AC  3, \bar{1}\rangle + \sigma BD  2, 0\rangle$	$AC  \bar{3}, 1\rangle + \sigma BD  \bar{2}, 0\rangle$
	$AC  \bar{1}, 3\rangle + \sigma BD  0, 2\rangle$	$AC  1, \bar{3}\rangle + \sigma BD  0, \bar{2}\rangle$
	$\sigma BD  2, 0\rangle + C^2  1, 1\rangle$	$\sigma BD  \bar{2}, 0\rangle + C^2  \bar{1}, \bar{1}\rangle$
	$\sigma BD  0, 2\rangle + C^2  1, 1\rangle$	$\sigma BD  0, \bar{2}\rangle + C^2  \bar{1}, \bar{1}\rangle$
	$\sigma AD  3, 0\rangle + BC  2, 1\rangle$	$\sigma AD  \bar{3}, 0\rangle + BC  \bar{2}, \bar{1}\rangle$
	$\sigma AD  0, 3\rangle + BC  1, 2\rangle$	$\sigma AD  0, \bar{3}\rangle + BC  \bar{1}, \bar{2}\rangle$
	$BC  2, 1\rangle_\sigma$	$BC  \bar{2}, \bar{1}\rangle_\sigma$
	$B^2  2, 2\rangle + \sigma AC  3, 1\rangle$	$B^2  \bar{2}, \bar{2}\rangle + \sigma AC  \bar{3}, \bar{1}\rangle$
	$B^2  2, 2\rangle + \sigma AC  1, 3\rangle$	$B^2  \bar{2}, \bar{2}\rangle + \sigma AC  \bar{1}, \bar{3}\rangle$
	$AB  3, 2\rangle_\sigma$	$AB  \bar{3}, \bar{2}\rangle_\sigma$

Tabelle 5.3.: Lokale Zwei-Spin-Zustände für das kubische Gitter

<sup>3</sup>An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass dies nicht die einzige Möglichkeit ist, den Vertices aufgrund ihrer Bondvariablen  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustände zuzuweisen. In einem der späteren Kapitel (Kapitel 5.3) wird eine modifizierte Vorschrift gelten. An geeigneter Stelle gehe ich darauf genauer ein.

Hierzu müssen 21  $\lambda$ -Parameter zu Null gewählt werden,

$$\begin{aligned} \lambda_5^\sigma &= \lambda_{4,1}^+ = \lambda_{4,2}^+ = \lambda_{3,1}^\sigma = \lambda_{3,2}^\sigma = \lambda_{3,2}^{-\sigma} = \lambda_{2,2}^+ = \lambda_{2,3}^+ = \lambda_{2,1}^- = \lambda_{2,2}^- = \lambda_{1,1}^{-\sigma} \\ &= \lambda_{1,2}^+ = \lambda_{1,3}^+ = \lambda_{1,2}^- = \lambda_{1,3}^- = \lambda_{0,2}^+ = \lambda_{0,3}^+ = \lambda_{0,4}^+ = \lambda_{0,1}^- = \lambda_{0,2}^- = \lambda_{0,3}^- = 0, \end{aligned} \quad (5.11)$$

und folgende Gleichungen müssen für die Superpositionsparameter erfüllt sein:

$$\begin{aligned} a_{2+\frac{1+\sigma}{2}} &= -\frac{\sigma AD}{CB} & a_4 &= -\sigma \frac{AC}{BD} & a_5 &= \frac{A}{C} & a_{8-\frac{3(\sigma-1)}{2}} &= -\sigma \frac{A}{C} \\ a_{9-\frac{3(\sigma-1)}{2}} &= \frac{BA}{CD} & a_{14} &= -\sigma \frac{A^2}{B^2} & a_{15} &= \frac{A^2}{C^2} & a_{16} &= -\sigma \frac{A^2}{D^2} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Durch diese Wahl werden die lokalen Zustände Eigenzustände zum Eigenwert Null.

Dabei soll keiner der kontinuierlichen Parameter  $A, B, C, D$  gleich Null sein. Bei der Wahl eines Parameters zu Null wird dem entsprechenden Vertex ein verschwindendes Gewicht zugeordnet. Dies führt zu einer geringeren Anzahl lokaler Grundzustände, sodass sich in der Regel keine interessanten Vertex-Produkt-Grundzustände finden lassen. Daher soll eine solche Wahl der Parameter ausgeschlossen sein.

Die sieben, nicht zu Null gesetzten,  $\lambda$ -Parameter müssen positiv sein,

$$\lambda_6, \lambda_5^{-\sigma}, \lambda_4^-, \lambda_{3,1}^{-\sigma}, \lambda_{2,1}^+, \lambda_{1,1}^{-\sigma}, \lambda_{0,1}^+ > 0, \quad (5.13)$$

damit gewährleistet ist, dass Null der niedrigste Eigenwert ist, und damit die lokalen Zustände Grundzustände sind.

Damit schränkt sich die Anzahl der freien Parameter deutlich ein. *Hierbei sowie im Folgenden soll überdies ohne Beschränkung der Allgemeinheit der Parameter  $D = 1$  gesetzt werden.* Dies erhöht die Übersichtlichkeit.

Es verbleiben also sieben Spektralparameter  $\lambda$  und drei kontinuierliche Parameter  $A/D, B/D, C/D$  sowie ein diskreter Parameter  $\sigma = \pm 1$ . Der Energie-Nullpunkt ist durch die Wahl der Superpositionsparameter auf Null gewählt. Die Skala ist noch in den Parametern enthalten.

Aus den lokalen Grundzuständen erhält man den globalen Grundzustand durch Aussummieren aller innerer Bondvariablen auf dem gesamten Gitter. Die Grundzustands-Eigenschaft folgt aus der Theorie der Optimum-Grundzustände, wie sie in Kapitel 2 dargestellt wurde. Die periodischen Randbedingungen werden hier auf natürliche Weise durch folgende Identifikation erreicht. Es bestehe das Gitter aus den Linearabmessungen  $L_x, L_y, L_z$ . Der periodische Schluss sei durch die Identifikationen  $L_x + 1 \equiv 1, \quad L_y + 1 \equiv 1, \quad L_z + 1 \equiv 1$  gegeben.

Analog zu den Überlegungen im Anhang C lässt sich bei dem periodisch geschlossenen Gitter auch hier die Eindeutigkeit des Grundzustandes auf einem endlichen Gitter beweisen.

### Eigenschaften des Grundzustandes

Der Grundzustand ist invariant unter lokalem und globalem Spin-Flip  $\mathbf{S}^z \rightarrow -\mathbf{S}^z$ . Damit verschwindet die globale Magnetisierung  $\langle \mathbf{S}_{tot}^z \rangle = 0$  sowie die Magnetisierung einzelner Spins. Wie die Simulationsergebnisse später zeigen werden, sind die Nächste-Nachbarn-Korrelationsfunktionen negativ. Dieses Ergebnis wird auch durch die folgende Überlegung gestützt. In diesem Sinne ist der globale Grundzustand antiferromagnetisch.

Der Grundzustand selber wird von drei kontinuierlichen Parametern  $A/D$ ,  $B/D$ ,  $C/D$  und dem diskreten Parameter  $\sigma$  gesteuert. Man sieht leicht, dass für  $A \rightarrow \infty$  der globale Zustand auf jedem Gitterplatz von den Ein-Spin-Zuständen  $|3\rangle$  und  $|\bar{3}\rangle$  dominiert wird, entsprechend den beiden Vertices mit allen Pfeilen hereinlaufend oder allen Pfeilen herauslaufend. Der globale Grundzustand ist damit eine Überlagerung der zwei Néel-Zustände  $|\text{Néel}_{\mathfrak{A}}\rangle$  und  $|\text{Néel}_{\mathfrak{B}}\rangle$ , die entweder die  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustände  $|3\rangle$  auf dem Untergitter  $\mathfrak{A}$  und  $|\bar{3}\rangle$  auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$  angeordnet haben, oder die genau umgekehrte Besetzung vorweisen. Der globale Grundzustand lässt sich in diesem Fall schreiben als:

$$|\Psi_0\rangle = |\text{Néel}_{\mathfrak{A}}\rangle + |\text{Néel}_{\mathfrak{B}}\rangle. \quad (5.14)$$

Diese Näherung im Grenzfall  $A \rightarrow \infty$  gilt für alle endlichen Gitter. Die einzelnen Néel-Zustände  $|\text{Néel}_{\mathfrak{A}}\rangle$ ,  $|\text{Néel}_{\mathfrak{B}}\rangle$  sind hier, jeder für sich genommen, kein Grundzustand zum globalen Hamilton-Operator, sondern nur die symmetrische Überlagerung. In Kapitel 5.3.1 sind hingegen in dem entsprechenden Grenzfall  $A^2 \rightarrow \infty$  auch die einzelnen Néel-Zustände Grundzustände.

In dem Parameterraum enthalten ist der isotrope Punkt, der durch die Parameter  $A = 2\sqrt{5}$ ,  $B = \sqrt{\frac{10}{3}}$ ,  $C = \frac{2}{\sqrt{3}}$ ,  $D = 1$ ,  $\sigma = -1$  und  $\lambda_i = \vartheta, \forall i$  festgelegt wird. An diesem Punkt weist der Hamilton-Operator volle  $SO(3)$ -Symmetrie auf. Dies gilt sowohl für die globalen als auch für die lokalen Wechselwirkungen. An diesem Punkt stimmt der globale Grundzustand mit dem Grundzustand des *valence bond solid* (VBS) überein, wie es in [Affleck u. a. 1987, Affleck u. a. 1988] von Affleck, Kennedy, Lieb and Tasaki vorgestellt wurde.

Der  $SO(3)$ -symmetrische Hamilton-Operator lässt sich hier als eine Projektion der lokalen Zustände auf den Unterraum mit Gesamtspin  $S = 6$  schreiben. In der Spindarstellung erhält dieser folgende Form:

$$\mathbf{h}_{ij}^{(6)} = \alpha \vec{\mathbf{S}}_i \cdot \vec{\mathbf{S}}_j + \beta (\vec{\mathbf{S}}_i \cdot \vec{\mathbf{S}}_j)^2 + \gamma (\vec{\mathbf{S}}_i \cdot \vec{\mathbf{S}}_j)^3 + \delta (\vec{\mathbf{S}}_i \cdot \vec{\mathbf{S}}_j)^4 + \eta (\vec{\mathbf{S}}_i \cdot \vec{\mathbf{S}}_j)^5 + \iota (\vec{\mathbf{S}}_i \cdot \vec{\mathbf{S}}_j)^6 + \kappa, \quad (5.15)$$

wobei sich die Vorfaktoren zu:

$$\alpha = -\frac{7}{1980}, \quad \beta = \frac{1}{10395}, \quad \gamma = \frac{821}{2494800}, \quad (5.16)$$

$$\delta = \frac{487}{7484400}, \quad \eta = \frac{37}{7484400}, \quad \iota = \frac{1}{7484400}, \quad \kappa = -\frac{1}{175} \quad (5.17)$$

ergeben. Der globale Hamilton-Operator lässt sich so angeben als

$$\mathbf{H} = \vartheta \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{h}_{ij}^{(6)}, \quad (5.18)$$

wobei  $\vartheta \in \mathbb{R}^+$  die Energieskala festlegt und positiv sein muss. Wählt man die  $\lambda$ -Parameter nicht alle identisch, so stimmt nach wie vor der Grundzustand mit dem des VBS-Modells überein, aber das Anregungsspektrum ist ein anderes.

### Monte-Carlo-Simulation und Ergebnisse

Zur Berechnung von Erwartungswerten im allgemeinen Fall (also entfernt vom isotropen Punkt) muss auf das in Abschnitt 3.4.1 eingeführte korrespondierende klassische Vertexmodell zurückgegriffen werden, das auf den Bonds zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten je zwei Bondvariable trägt. Von den 4096 möglichen Vertices des korrespondierenden klassischen Modells pro Gitterplatz tragen nur 924 Vertices ein nicht-verschwindendes Gewicht. Diese entsprechen gerade den Vertices, aus denen die Anzahl der hereinlaufenden Bondvariablen auf den „Kets“ gerade der Anzahl der hereinlaufenden Bondvariablen auf den „Bras“ entspricht. Diesen Sachverhalt kann man auch so ausdrücken: Das innere Produkt zweier Ein-Spin-Zustände zu unterschiedlichen Eigenwerten ist Null.

Dass bei dieser großen Anzahl von Vertices keine analytische Lösung des Modells bekannt ist, verwundert nicht. Aus diesem Grunde ist es auch hier notwendig gewesen, auf numerische Simulationen zurückzugreifen. Die von mir angewendete Methode unterliegt dem bekannten Problem von Monte-Carlo-Simulationen, für negative Vorzeichen nicht anwendbar zu sein (Wahrscheinlichkeiten können kein negatives Gewicht haben). Das „Vorzeichen-Problem“ („minus-sign problem“, [Hirsch 1985]) bedeutete in diesem Fall, dass ich mich auf den Parameterraum mit  $\sigma = +1$  für die Messungen beschränken musste.

In den hier simulierten korrespondierenden klassischen Vertex-Modellen spiegelt ein negatives Vorzeichen kein Artefakt der Abbildung des quantenmechanischen Modells auf das klassische Modell wider, vielmehr treten negative Vorzeichen in einem Bereich des physikalischen Parameterraumes auf. Insbesondere liegen keine Ergebnisse für den VBS-Punkt vor, der im Parameterraum mit  $\sigma = -1$  zu finden ist.

Die Art der Monte-Carlo-Simulation, die ich verwendet habe, wurde bereits im Kapitel 4 genauer erläutert.



Als erste wichtige Größe möchte ich die Ergebnisse der Simulation des Ordnungsparameters  $\langle \mathbf{O} \rangle$  für einen weiten Parameterbereich vorstellen. Als geeigneter Ordnungsparameter  $\langle \mathbf{O} \rangle$  dient wieder die bereits im Abschnitt 5.1 Gleichung (5.3) eingeführte Größe, die im Wesentlichen die Untergittermagnetisierung misst. Der Wellenvektor muss hier zu  $\vec{K} = (\pi, \pi, \pi)$  gewählt werden. Wieder bezeichnet  $\vec{J}$  die Gitterplätze, dieses Mal auf dem dreidimensionalen Gitter. In der ungeordneten Phase ist der Ordnungsparameter Null, in der geordneten Phase ist er endlich und liegt zwischen null und drei. Nähert sich der Ordnungsparameter dem Wert 3, so liegt ein fast vollständig polarisierter Antiferromagnet mit Néel-Ordnung vor, bei dem auf dem einen Untergitter alle Spins den  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwert  $+3$ , auf dem anderen den Eigenwert  $-3$  aufweisen. Die Simulationen wurden bei einer Gittergröße von  $16 \times 16 \times 16$  Gitterplätzen durchgeführt. Jeder der 4096 Spins wurde durchschnittlich  $10^7$  Monte-Carlo-Schritten unterzogen. In Abb. 5.8 ist der Ordnungsparameter für festgehaltenes  $C^2/D^2 = 1$  dargestellt in den Bereichen  $0 \leq B^2/D^2 \leq 8$  und  $0 \leq A^2/D^2 \leq 35$ . Ohne Beschränkung sei  $D^2 = 1$ . Für andere Werte  $C^2 \neq 1$  ergab sich qualitativ kein anderes Verhalten.

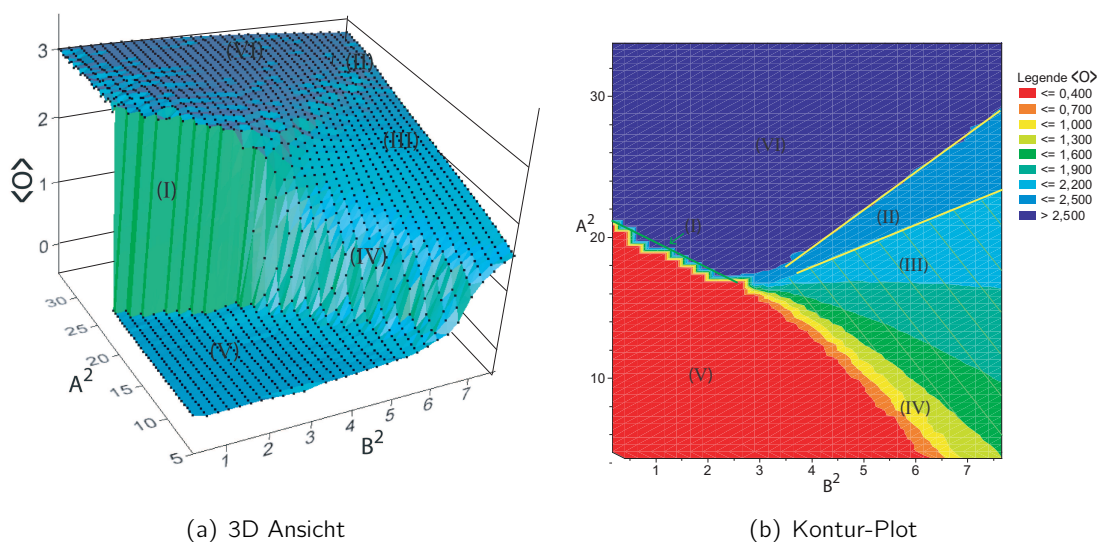


Abbildung 5.8.: Hier wird der Ordnungsparameter in weiten Bereichen des Parameterraumes bei festgehaltenem Parameter  $C^2 = 1$  und  $D^2 = 1$  in Abhängigkeit von den Parametern  $A^2$  und  $B^2$  dargestellt. Abb. (a) zeigt eine 3D Darstellung des Ordnungsparameters. Die schwarzen Punkte sind die Messwerte der Simulation. Abb. (b) zeigt zum besseren Verständnis einen Kontur-Plot im selben Parameterbereich.

Wie bereits oben erwähnt, wird diese Néel-Ordnung im Limes großer Parameter  $A$  erreicht. Es liegt also nahe festzustellen, dass der Phasenübergang von der ungeordneten Phase hin zur geordneten durch diesen Parameter getrieben wird. Dieses Verhalten lässt sich durch

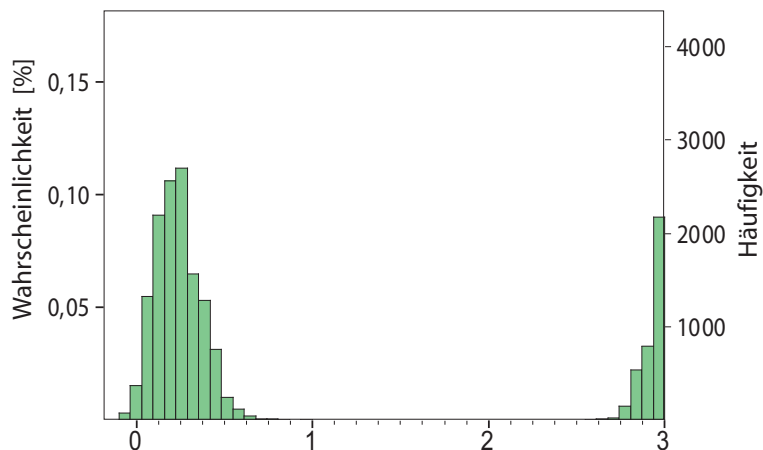


Abbildung 5.9.: Wahrscheinlichkeit der Boltzmann-Gewichte am kritischen Punkt. Man erkennt gut das Auftreten zweier Peaks. Insgesamt wurde jeweils nach 100000 Monte-Carlo-Schritten gemessen. Der Grafik liegen 25000 Messpunkte zu Grunde.

die Simulationen gut bestätigen.

Die Abbildung 5.8 zeigt Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen. Es wurden über 4000 Parametersätze simuliert, um ein dichtes Punkteraster zu erhalten, das in der Abbildung durch eine kontinuierliche Fläche angenähert wurde.

Die in der Abbildung eingezeichneten römischen Ziffern bezeichnen Bereiche mit unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften, auf die weiter unten eingegangen wird. Diese Bereiche sind sowohl in dreidimensionaler Darstellung gekennzeichnet, als auch in dem Konturplot. Dabei gehen die Bereiche  $(V) \rightarrow (IV) \rightarrow (III) \rightarrow (II) \rightarrow (VI)$  kontinuierlich ineinander über. Lediglich der Übergang von  $(V) \rightarrow (VI)$  wird durch eine Diskontinuität entlang der Linie  $(I)$  gekennzeichnet. Die Maximalwerte des Konturplots werden durch die Extremwerte der Untergittermagnetisierung, die zwischen  $0 \leq \langle \mathbf{O} \rangle \leq 3$  liegen, beschränkt.

Wie in Abbildung 5.8 dargestellt ist, erkennt man entlang dem mit  $(I)$  markierten Bereich eine nahezu lineare Abhängigkeit der Parameter  $A^2$  und  $B^2$  entlang des Phasenübergangs. Die Phasenübergangslinie lässt sich in diesem Bereich durch eine Gerade beschreiben  $A^2 = (-1.8 \pm 0.2)B^2 + (21.2 \pm 0.2)$  mit einem Gültigkeitsbereich von  $0 \leq B^2 \lesssim 2.8$ .

In dem durch  $(I)$  gekennzeichneten Bereich zeigt sich ein Phasenübergang erster Ordnung. Die Ordnung des Phasenübergangs habe ich an diversen Punkten entlang dieser Linie genauer untersucht. Hierzu bestimmt man die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Boltzmann-Gewichte am kritischen Punkt (siehe Abschnitt 4.3.2 und Abb. 5.9). Dieses Verfahren wurde von Challa *et al.* vorgeschlagen [Challa u. a. 1986]. Für Phasenübergänge erster Ordnung

sollte für jede koexistierende Phase ein gaußglockenartiger Peak um einen Wahrscheinlichkeitswert herum auftreten. In der Abbildung 5.9 kann man gut die zwei auftretenden Peaks in der Wahrscheinlichkeitsverteilung am kritischen Punkt  $A^2 = 17$ ,  $B^2 = 2$ ,  $C^2 = 1$  und  $D^2 = 1$  sehen. Über einen großen Zeitraum der Monte-Carlo-Zeit beobachtet, schwingen das System oder Teile davon zwischen der einen Phase, die für kleinere Werte von  $A^2 < A_c^2$  stabilisiert wird, und der symmetrieegebrochenen Phase, die für größere Werte  $A^2 > A_c^2$  vorliegt, hin und her. Dieses typische Verhalten spiegelt die Koexistenz von zwei Phasen wider. Der hier verwendete Loop-Algorithmus bedingt, dass immer nur einige Pfeile auf den Bonds pro Monte-Carlo-Schritt geändert werden. Dies führt dazu, dass es sehr großer Monte-Carlo-Zeiten bedarf, bis das System aus der einen Phase in die andere, koexistierende Phase gelangt.

Eine weitere Methode, um einen Phasenübergang erster Ordnung nachzuweisen, ist eine Hysterese-Messung, wie sie in Abschnitt 4.3.2 dargestellt wurde. Die Abbildung 5.10 zeigt deutlich das Auftreten einer Hysterese-Schleife. Dabei verbindet die rote Kurve Messpunkte, die beim Verringern des Parameters  $A^2$  aufgenommen wurden, und die grüne Kurve zeigt Messpunkte, die beim Aufdrehen des Parameters  $A^2$  aufgenommen wurden.

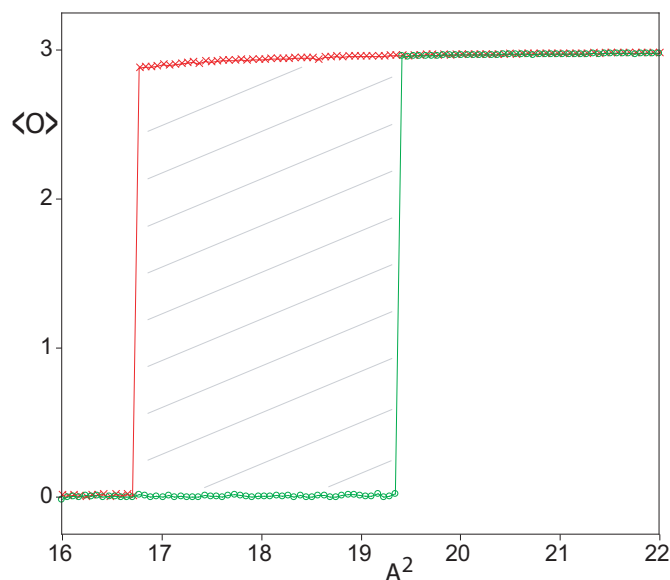


Abbildung 5.10.: In dem Hysterese-Lauf der Monte-Carlo-Simulation erkennt man deutlich die auftretende Hysterese-Schleife (gestreifter Bereich), die einen Phasenübergang erster Ordnung kennzeichnet. Die Messung wurde für  $B^2 = 2$ ,  $C^2 = 1$ ,  $D^2 = 1$  durchgeführt.

Eine solche Analyse ist notwendig, da sich ein Phasenübergang erster Ordnung zwar durch eine Diskontinuität zum Beispiel in der Magnetisierung manifestiert, aber diese auf Grund

numerischer Ungenauigkeiten bei einer Monte-Carlo-Simulation nur unzureichend nachvollzogen werden kann.

Hier ist die Analyse der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Boltzmanngewichte ein geeignetes Mittel. Die Theorie des Finite-size-scaling, die für Phasenübergänge zweiter Ordnung eine gute Vorhersage des Verhaltens unendlich großer Systeme aus den Betrachtungen endlich großer Systeme liefert, greift hier nicht. Wie in dem Kapitel 4.3.1 hergeleitet wurde, ist eine der entscheidenden Annahmen die Divergenz der Korrelationslänge an kritischen Punkten eines Phasenübergangs zweiter Ordnung. Bei dem Phasenübergang erster Ordnung bleibt die Korrelationslänge hingegen endlich.

Für größere Werte von  $B^2 > 2.5$  kann man eine drastische Veränderung des Verhaltens in Abhängigkeit von den Parametern verfolgen. Der Ordnungsparameter steigt nicht wie bei einem Phasenübergang erster Ordnung sprunghaft von Null auf einen endlichen Wert, es zeigt sich vielmehr ein kontinuierliches Anwachsen des Ordnungsparameters, der einen Phasenübergang zweiter Ordnung vermuten lässt. In Abbildung 5.11 ist der Ordnungsparameter in Abhängigkeit von dem Parameter  $B^2$  für verschiedene Werte von (festgehaltenem)  $A^2$  aufgetragen. Man erkennt für  $A^2 = 20$  noch den Phasenübergang erster Ordnung. Der Ordnungsparameter verringert sich in der symmetriegebrochenen Phase auf Grund der steigenden Konkurrenz der  $S^z = \pm 3$ -Eigenzustände zu den  $S^z = \pm 2$ -Eigenzuständen für größer werdende  $B^2$ .

Für geringere Werte von  $A^2$ , also etwa  $A^2 = 17$  oder  $A^2 = 7.5$ , wie in der Abbildung dargestellt, ist der Phasenübergang kontinuierlich. In Abbildung 5.11 (b) ist der Versuch dargestellt, den kritischen Exponenten  $\beta$  zu bestimmen. Hierzu ist der Ordnungsparameter in der geordneten Phase doppeltlogarithmisch gegen den Abstand  $t = \frac{B^2 - B_c^2}{B_c^2}$  zum kritischen Punkt  $B_c^2$  aufgetragen. Man erkennt keinen einheitlichen kritischen Exponenten für unterschiedliche Werte von  $A^2$ , sodass man nicht von einem universellen Verhalten ausgehen kann. Ein solches Verhalten kennt man bereits von dem Acht-Vertex-Modell [Baxter 1982].

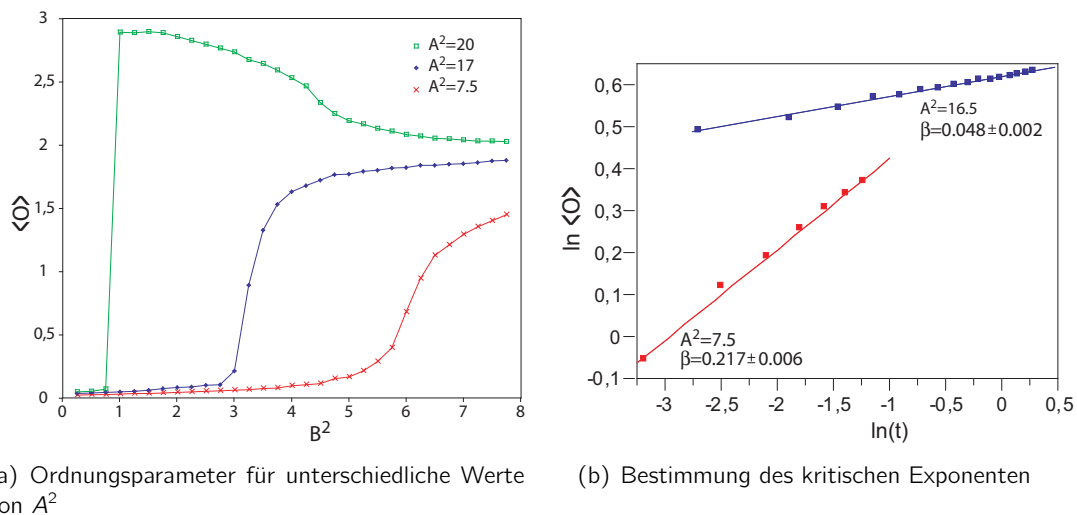


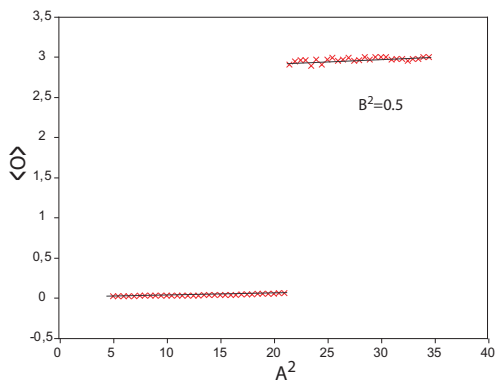
Abbildung 5.11.: Dargestellt ist der kritische Exponent in Richtung von  $B^2$ . Es liegt kein universelles Verhalten vor.

Diese Nicht-Universalität erkennt man noch besser, wenn man den Parameter  $B^2$  festhält, und die Veränderung des Ordnungsparameters in Abhängigkeit von  $A^2$  betrachtet. Hier ist für jeden Wert von  $B^2$  zu erwarten, dass der Ordnungsparameter eine monoton steigende Funktion von  $A^2$  ist. Für unterschiedliche Werte von  $B^2$  ist der Ordnungsparameter als Funktion von  $A^2$  in den Abbildungen 5.12 (a-f) dargestellt. Über weite Bereiche im Parameterraum von  $B^2$  findet sich diese Monotonie wieder.

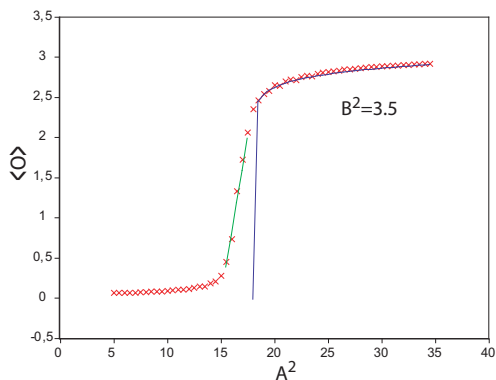
Für  $B^2 = 0.5$  ist der Phasenübergang erster Ordnung, in Übereinstimmung mit der oben gezeigten Abbildung 5.11 (a). Es zeigt sich auch, wie bereits erwähnt, dass für größer werdende Werte von  $A^2$  der Ordnungsparameter monoton anwächst.

In den nächsten Abbildungen 5.12 (b-f) wird ein nicht einheitlicher kritischer Exponent auch für den Übergang bei festgehaltenem Parameter  $B^2$  und variierendem Parameter  $A^2$  bestätigt. Tatsächlich lässt sich sogar festhalten, dass für größere Parameter  $B^2$  nur in sehr geringem Abstand vom kritischen Punkt ein Anwachsen des Ordnungsparameters mit einem kritischen Exponenten zu erkennen ist. Das Anwachsen des Ordnungsparameters geht dann in einen linearen Bereich über. In den Abbildungen sind diese mit grünen Geraden gekennzeichnet, und in Abbildung 5.8 ist dieser Bereich mit (III) gekennzeichnet. Man erkennt mit zunehmenden Werten  $B^2$  eine zunehmende Ausprägung dieser linear von  $A^2$  abhängenden Anteile.

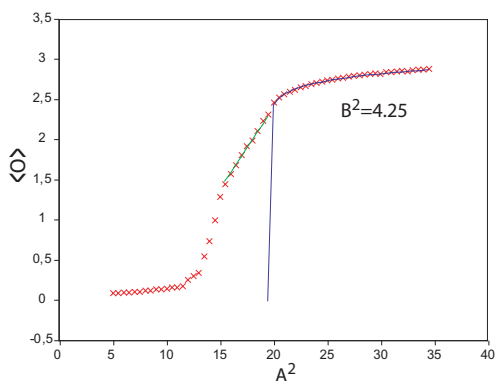
Für noch größere Werte von  $A^2$  sieht man, wie der lineare Anstieg wieder in einen gekrümmten Anstieg übergeht (vgl. auch wieder Abb. 5.8, Bereich (II)). Dabei wird die Krümmung für größere  $A^2$  schwächer, bis eine Sättigung eintritt (der Ordnungsparameter



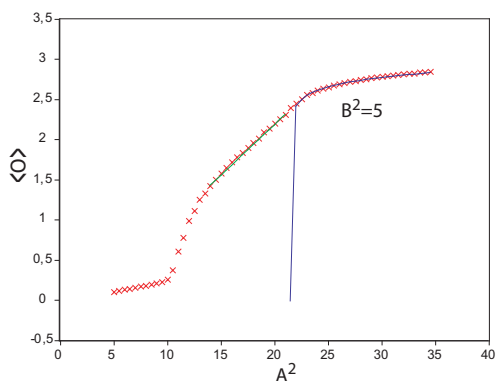
(a) Der Ordnungsparameter zeigt einen Phasenübergang erster Ordnung für  $B^2 = 0.5$  bei  $A^2 = 21$ .



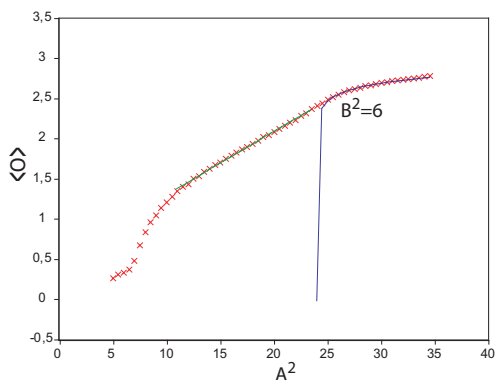
(b) Für  $B^2 = 3.5$  liegt kein Phasenübergang erster Ordnung vor.



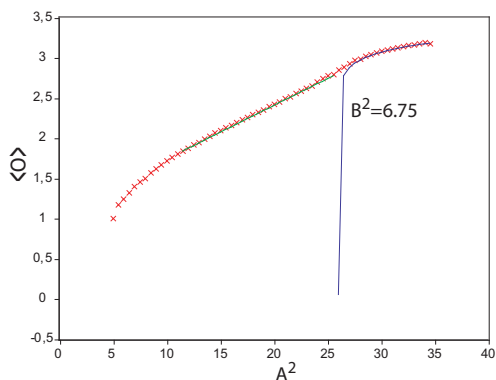
(c) Ordnungsparameter in Abhängigkeit von  $A^2$  bei  $B^2 = 4.25$ .



(d) Ordnungsparameter in Abhängigkeit von  $A^2$  bei  $B^2 = 5$ .



(e) Ordnungsparameter in Abhängigkeit von  $A^2$  bei  $B^2 = 6$ .



(f) Ordnungsparameter in Abhängigkeit von  $A^2$  bei  $B^2 = 6.75$ .

Abbildung 5.12.: Der Phasenübergang wird getrieben durch den Parameter  $A^2$ , dargestellt für unterschiedliche Werte von  $B^2$ . Für kleine Werte von  $B^2$  ist der Phasenübergang erster Ordnung. Für große  $B^2$  sieht man einen kontinuierlichen Phasenübergang. Dieser zeigt kein universelles Verhalten.

ter ist nach oben beschränkt). Um eine Erklärung für die auftretenden Verläufe zu geben, möchte ich zunächst einmal annehmen, es würden nur Daten für den letzten, gekrümmten Bereich vorliegen. Naiverweise würde man versuchen, in diesem Bereich einen „kritischen Exponenten“<sup>4</sup> anzufitten, wie es mit den blauen Kurven von der Form  $\propto t^\beta$ , mit  $t = \frac{A-A_c}{A_c}$  in Abbildung 5.12 angedeutet wird. Es besteht hierbei eine größere Unsicherheit, als wenn Daten bis zum „kritischen Punkt“ vorliegen würden. Vor allem die Bestimmung des „kritischen Punktes“ ist hier schwierig. Abgesehen von diesen Schwierigkeiten zeigt die Abbildung 5.13 die entsprechenden Fitgeraden im doppeltlogarithmischen Plot. Den „kritischen Exponenten“ konnte ich in diesem Bereich für alle untersuchten Parameterwerte auf ungefähr  $\beta = 0.050 \pm 0.005$  (als Fehler habe ich die Standardabweichung verwendet) bestimmen.

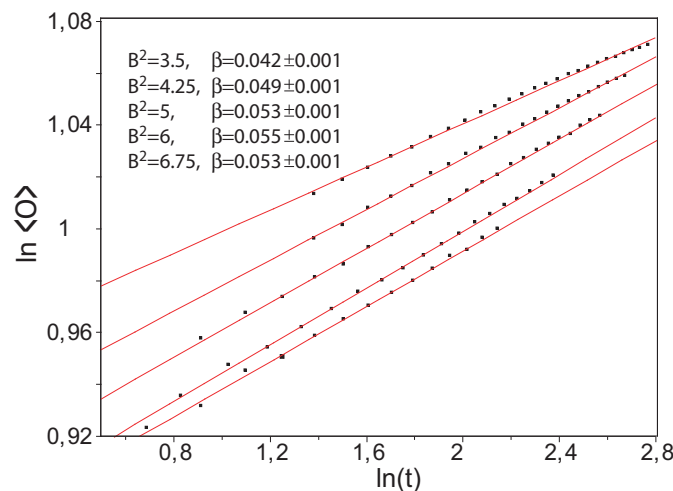


Abbildung 5.13.: Doppeltlogarithmischer Plot zur Bestimmung des kritischen Exponenten für unterschiedliche Werte von  $B^2$ .

In dem vorherigen Kapitel 5.1 „Spin-2 auf dem Quadratgitter“ wurde ein linearer Zusammenhang der Parameter für den Phasenübergang beschrieben. Auch die hier bestimmten „kritischen Punkte“ zeigen einen linearen Zusammenhang der Parameter untereinander auf. Die Gerade lässt sich angeben mit  $A^2 = (2.49 \pm 0.04)B^2 + (8.9 \pm 0.2)$ .

Der Gültigkeitsbereich der angegebenen Geraden ist nach unten durch  $B^2 \approx 2.5$  beschränkt. In diesem Bereich schneidet sich die Gerade, die den Phasenübergang erster Ordnung beschreibt ( $A^2 = (-1.8 \pm 0.2)B^2 + (21.1 \pm 0.2)$ ), mit der zuletzt angegebenen Geraden  $A^2 = (2.49 \pm 0.04)B^2 + (8.9 \pm 0.2)$ . Überdies enden an diesem Schnittpunkt, der mit ungefähr  $A^2 \approx 16$  und  $B^2 \approx 2.8$  angegeben werden kann, die Bereiche (III) und (IV), die hier spitz einmünden.

Betrachtet man die Simulationsergebnisse für Werte  $B^2 > 6$ , so stellt man fest, dass für alle

<sup>4</sup>Die Anführungszeichen sollen kennzeichnen, dass die Wortwahl nur in Hinblick auf diese naive Vorgehensweise zu gebrauchen ist.

Werte  $A^2$  der Ordnungsparameter endlich ist. In diesem Bereich liegt offensichtlich bereits eine symmetriegebrochene Phase vor. Im Grundzustand kann für kleine  $A^2$  der Zustand, der auf einem Untergitter Ein-Spin-Zustände  $|3\rangle$  trägt und auf dem anderen Untergitter Ein-Spin-Zustände  $|\bar{3}\rangle$ , nur geringes Gewicht haben (In der Simulation gehen diese Ein-Spin-Zustände im Wesentlichen mit dem Gewicht  $A^2$  ein.) Andere Zustände müssen hier also den Grundzustand dominieren. Diese Überlegung, die in diesem Extremfall ( $A^2$  sehr klein) sicherlich richtig ist, soll im Folgenden systematisch untersucht werden. Das Auftreten des Bereichs, in dem der Ordnungsparameter linear anwächst, ist ungewöhnlich und dem Bereich, in dem sich ein „kritischer Exponent“ ermitteln lässt, geht nicht direkt die ungeordnete Phase voraus. Es sind also zwei Möglichkeiten vorstellbar. Denkbar ist einerseits, dass sich in diesem Bereich langlebige metastabile Zustände ausbilden. Andererseits könnten die Monte-Carlo-Simulationen für diese Werte der Parameter unzuverlässige Ergebnisse liefern. Zu diesen Möglichkeiten möchte ich im Folgenden Überlegungen anstellen.

In den hier angewendeten Monte-Carlo-Simulationen wird jedem Gitterplatz ein Vertex zugeschrieben, der mit dem Gewicht  $\alpha_{\mu_1}\alpha_{\mu_2}\langle\mathbf{m}|\mathbf{m}\rangle = \alpha_{\mu_1}\alpha_{\mu_2}$  in die Simulation einfließt (vgl. Abschnitt 4.4.1). In dem hier betrachteten Fall sind dies die Gewichte  $A^2\langle 3|3\rangle = A^2$ ,  $B^2\langle 1|1\rangle = B^2$  und so weiter. Nach jedem Monte-Carlo-Schritt ist also jedem Gitterplatz ein solcher Vertex mit entsprechendem Gewicht zugeordnet. Es lässt sich nun die Häufigkeit, zum Beispiel der unterschiedlichen Ein-Spin-Zustände auf dem Gitter, ermitteln. Im Laufe der Simulation erhält man so eine Wahrscheinlichkeit für jeden Ein-Spin-Zustand, zum Beispiel auf einem der Untergitter vorzuliegen. So sollte etwa für  $A^2 \rightarrow \infty$  die Wahrscheinlichkeit  $p_3$ , einen Ein-Spin-Zustand  $|3\rangle$  auf dem Untergitter mit positiver Magnetisierung vorzufinden, gegen Eins konvergieren. Auf dem anderen Untergitter sollte mit einer Wahrscheinlichkeit Eins der Zustand  $|\bar{3}\rangle$  gefunden werden. Dies entspricht gerade dem zu erwartenden Néel-Zustand in diesem Limes.

Es kann nun lehrreich sein, zu überprüfen mit welcher Wahrscheinlichkeit die Ein-Spin-Zustände auf den Untergittern auftreten. Die Abbildung 5.14 zeigt die unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten für die sieben Ein-Spin-Zustände der hier untersuchten Spin-3 Teilchen für die Werte  $B^2 = 5$  und  $C^2 = 1$ . Hierbei kann in der ungeordneten Phase eines der bipartiten Untergitter ausgewählt werden. In der symmetriegebrochenen Phase wird stets das Untergitter mit positiver Magnetisierung ausgewählt.

Die Abbildung zeigt deutlich, dass bis zu einem Wert  $A^2 \approx 9.8$  die Wahrscheinlichkeiten  $p_{\mathbf{m}}$ , einen Zustand mit  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwert  $\mathbf{m}$  zu finden, ebenso groß sind, wie die für entsprechende Zustände mit  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwert  $-\mathbf{m}$ . Das spiegelt die ungeordnete Phase wider (Bereich (V)), bei der sich auf jedem Untergitter die Magnetisierung zu Null mittelt. Für größer werdende  $A^2$  trennen sich die Wahrscheinlichkeiten, Zustände zu positiven  $\mathbf{m}$  zu finden, von denen zu negativen  $\mathbf{m}$  auf. In dem Bereich (IV) beobachtet man dabei etwas Überraschendes. Obgleich der Parameter  $A^2$  das Gewicht der Zustände mit  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwert  $\pm 3$  darstellt, steigt die Wahrscheinlichkeit,  $p_2$  Zustände mit  $\mathbf{m} = +2$  zu finden, stärker an als die Wahrscheinlichkeit  $p_3$ , Zustände mit  $\mathbf{m} = +3$  zu finden.



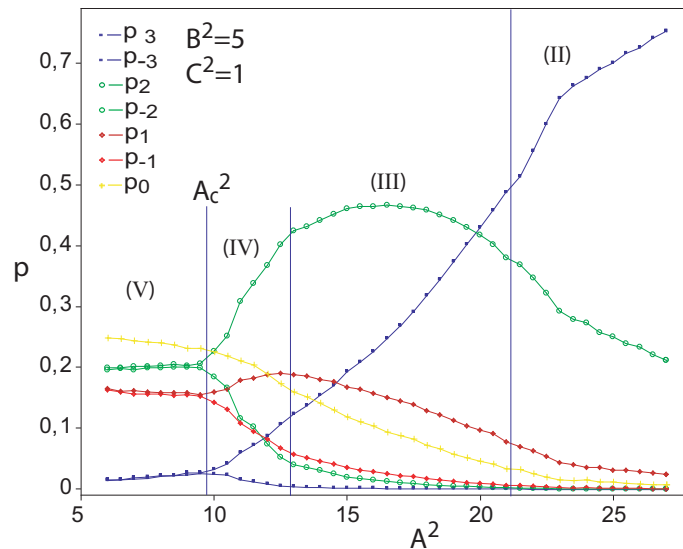


Abbildung 5.14.: Wahrscheinlichkeit des Auftretens der einzelnen  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustände auf einem Untergitter in Abhängigkeit von  $B^2$ . Es bezeichnet  $p_m$  die Wahrscheinlichkeit, einen Zustand der Magnetisierung  $m$  auf einem Untergitter zu finden. In der ungeordneten Phase ist die Wahl des Untergitters beliebig, in der geordneten Phase wird stets das Untergitter mit positiver Magnetisierung gewählt.

In dem Bereich (III) tritt ein Maximum der Wahrscheinlichkeit  $p_2$  auf, während die Wahrscheinlichkeit  $p_3$  weiter anwächst. Dies kann den Bereich des linearen Anwachsens des Ordnungsparameters in dem Bereich (III) (siehe auch Abbildung 5.8 und Abbildungen 5.12 (b-f) grüne Gerade) erklären. Die Wahrscheinlichkeit, Zustände  $\propto |2\rangle$  zu finden, bleibt nahezu konstant, während die Wahrscheinlichkeit, Zustände  $\propto |3\rangle$  zu finden, in diesem Bereich linear anwächst. Die anderen Wahrscheinlichkeiten spielen nur eine untergeordnete Rolle. Verfolgt man den Verlauf für größer werdende  $A^2$  weiter, so kommt man in die Phase (II). In diesem Bereich fällt die Wahrscheinlichkeit  $p_2$  deutlich ab und die Wahrscheinlichkeit  $p_3$  steigt weiter an. In diesem Bereich ist keine lineare Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeit  $p_3$  vom Parameter  $A^2$  gegeben; vielmehr verläuft der Anstieg zunächst steiler, bis er sich zunehmend verlangsamt. Dies entspricht gerade dem zuvor mit einem kritischen Exponenten gefitteten Verlauf des Ordnungsparameters im Bereich (II).

Hier wurden die Wahrscheinlichkeiten auf dem Untergitter mit positiver Magnetisierung betrachtet. Auf dem Untergitter mit negativer Magnetisierung tauschen die Wahrscheinlichkeiten  $p_m$  ihre Rolle mit den Wahrscheinlichkeiten  $p_{-m}$  zeigen ansonsten aber das gleiche Verhalten.

Diese Analyse lässt also den Schluss zu, dass das Auftreten der geordneten Phase zunächst von den Ein-Spin-Zuständen  $|2\rangle$  und  $|\bar{2}\rangle$  getrieben wird. Dieses Ergebnis ist zunächst

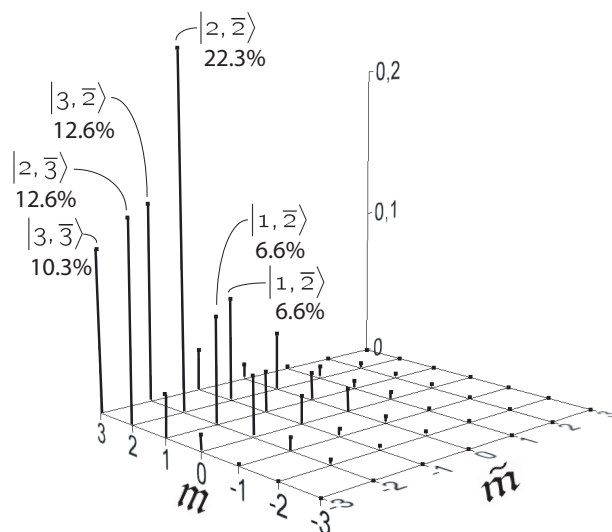


Abbildung 5.15.: Bedingte Wahrscheinlichkeit in der Monte-Carlo-Simulation, auf dem einen Untergitter  $\mathfrak{A}$  die Zustände  $|S_{\mathfrak{A}}^z\rangle$  zu finden, während auf einem benachbartem Gitterplatz aus dem Untergitter  $\mathfrak{B}$  die Zustände  $|S_{\mathfrak{B}}^z\rangle$  zu finden sind.

überraschend, da ja der Parameter  $A^2$  geändert wird und nicht etwa das den Zuständen entsprechende Gewicht  $B^2$ . Interessant ist die Frage, ob dieses Ergebnis bedeutet, dass lokale Zwei-Spin-Zustände der Art  $|2, \bar{2}\rangle$  überwiegen. Hierzu habe ich zu denselben Parameterwerten  $B^2 = 5$  und  $C^2 = 1$  und unterschiedlichen Werten  $A^2$  die bedingten Wahrscheinlichkeiten untersucht, auf einem Gitterplatz den Zustand  $|\tilde{m}\rangle$  zu finden, unter der Voraussetzung, dass auf einem benachbarten Gitterplatz der Zustand  $|m\rangle$  vorliegt. Es werden so die lokalen Zwei-Spin-Zustände  $|m, \tilde{m}\rangle$  betrachtet.

In Abbildung 5.15 sind die bedingten Wahrscheinlichkeiten für die Werte  $A^2 = 17$ ,  $B^2 = 5$  und  $C^2 = 1$  dargestellt. In der Abbildung sind die einzelnen Wahrscheinlichkeiten in der Form  $|m, \tilde{m}\rangle$  mit einer Prozentangabe gekennzeichnet. Dabei bezieht sich  $m$  auf den  $S^z$ -Eigenwert des Ein-Spin-Zustandes, der sich auf dem Untergitter mit positiver Magnetisierung befindet. Der zweite Zustand, der mit  $\tilde{m}$  referenziert wird, befindet sich auf einem angrenzenden Gitterplatz im zweiten Untergitter. Entsprechend bezeichnen die Achsen die Magnetisierung  $m$  und  $\tilde{m}$ . Der hier betrachtete Punkt im Parameterraum befindet sich in dem Bereich (III), in dem die Ein-Spin-Zustände  $|2\rangle$  auf dem Untergitter mit positiver Magnetisierung dominieren.

Man erkennt gut, dass die lokalen Zwei-Spin-Zustände  $|2, \bar{2}\rangle$  mit der höchsten Wahrscheinlichkeit auftreten und die Zustände  $|3, \bar{2}\rangle$ ,  $|2, \bar{3}\rangle$  und  $|3, \bar{3}\rangle$  mit deutlich geringerer Wahr-

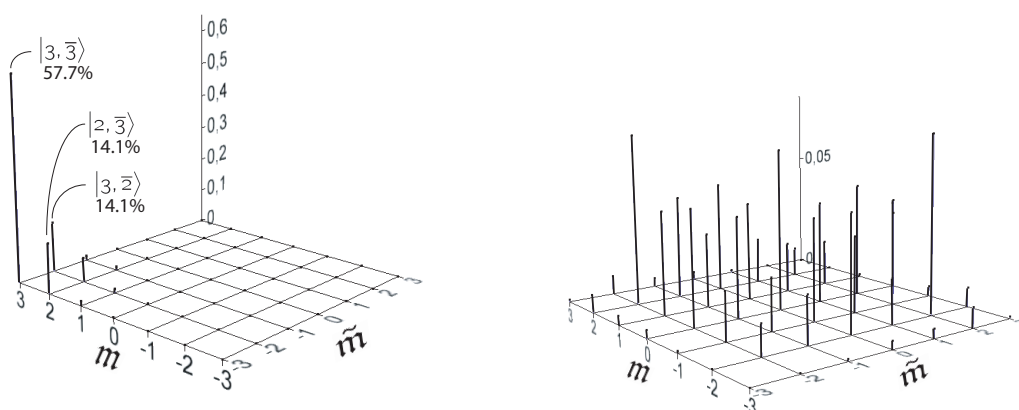
scheinlichkeit auftreten, wohingegen die anderen möglichen Zustände keine Rolle zu spielen scheinen.

Dieses Ergebnis scheint zunächst nicht zu überraschen, aber in Hinblick auf den globalen Grundzustand, muss man sich Folgendes klar machen. In dem Limes  $A^2 \rightarrow \infty$  dominieren die lokalen Zwei-Spin-Zustände  $|\bar{3}, 3\rangle$  und  $|3, \bar{3}\rangle$  die lokalen Grundzustände, da diese mit dem Faktor  $A^2$  auftreten und in der Simulation sogar mit  $A^4$  eingehen. Die Konkurrenz zwischen diesen beiden Zuständen führt dann zu dem spontanen Symmetriebruch und zur zweifachen Entartung. Für  $A^2 \rightarrow \infty$  liegt dann einer der beiden Néel-Zustände  $|3, \bar{3}, \dots\rangle$  oder  $|\bar{3}, 3, \dots\rangle$  vor. Man beachte, dass per Konstruktion nie zwei Ein-Spin-Zustände  $|3\rangle$  oder zwei Ein-Spin-Zustände  $|\bar{3}\rangle$  benachbart auftreten können.

In dem Fall  $B^2 \rightarrow \infty$  hingegen dominieren vier Zwei-Spin-Zustände die lokalen Grundzustände ( $|2, 2\rangle$ ,  $|\bar{2}, \bar{2}\rangle$ ,  $|\bar{2}, 2\rangle$ ,  $|2, \bar{2}\rangle$ ), die alle mit dem Faktor  $B^4$  in der Simulation gewichtet werden. Im Gegensatz zu dem zuvor betrachteten Fall können aber alle beliebigen Abfolgen dieser Zwei-Spin-Zustände realisiert werden, mit der Einschränkung, dass in Summe ebenso viele Zustände  $|2\rangle$  wie Zustände  $|\bar{2}\rangle$  auftreten müssen. Insbesondere sollte die Konkurrenz der vielen Zustände untereinander nicht zu einer geordneten Phase führen.

Betrachtet man die bedingten Wahrscheinlichkeiten, wie sie oben erläutert wurden, für große Werte von  $A^2$  (hier bei  $A^2 = 26$ ), so erhält man eben das erwartete Ergebnis, wie die Abbildung 5.16 (a) zeigt. Die Wahrscheinlichkeit für Zustände  $|3, \bar{3}\rangle$  ist mit  $\approx 60\%$  dominierend. Hingegen treten die Zustände  $|\bar{3}, 3\rangle$  mit einer Wahrscheinlichkeit von  $\approx 0.2\%$  nahezu gar nicht auf. Dieses Ergebnis spiegelt die geordnete Phase wider und stimmt mit den zuvor angestellten Überlegungen überein. Auch die Messwerte in der ungeordneten Phase stehen in keinem Widerspruch zu den Erwartungen, wie ich sie dargestellt habe. Die Abbildung 5.16 (b) zeigt die Verteilung der Wahrscheinlichkeiten für die Parameter  $A^2 = 2$ ,  $B^2 = 5$ ,  $C^2 = 1$ . Man erkennt, dass eine Vielzahl von Zuständen mit ähnlichem Gewicht in den globalen Grundzustand einfließt. Die Spiegel-Symmetrie der Verteilung entlang der Diagonalen  $(3, -3)$ - $(-3, 3)$  weist auch hier auf die verschwindende Magnetisierung  $\langle \mathbf{S}_{total}^z \rangle = 0$  des globalen Zustands hin.

Die hier angestellten Untersuchungen deuten darauf hin, dass der als (III) gekennzeichnete Bereich in Abbildung 5.8 in dem Sinne als problematisch anzusehen ist, da kein Phasenübergang getrieben durch die Zustände  $|2\rangle$  und  $|\bar{2}\rangle$  zu erwarten ist, diese aber in den Messreihen den entscheidenden Anteil zum Ergebnis liefern. Hierfür können zwei mögliche Ursachen gefunden werden: Es ist bekannt, dass in der Nähe eines *Phasenübergangs erster Ordnung* extrem langlebige, metastabile Zustände auftreten können. Die Unterscheidung zwischen Gleichgewichtszuständen und den metastabilen Zuständen fällt mit Monte-Carlo-Simulationen schwer [Binder 1987]. Diese könnten in dem Bereich (III) gemessen worden sein. In diesem Sinne wäre eine Bestimmung einer Phasenübergangslinie, wie sie als Gerade zwischen den Bereichen (II) und (III) möglich war, als sinnvoll zu erachten. Auch steht der „kritische Exponent“ mit  $\beta \approx 0.05$  nicht im Widerspruch dazu, da Phasenübergänge, die schwach erster Ordnung sind, durchaus einen kleinen kritischen Exponenten  $\neq 0$  besitzen können, mit dem der Ordnungsparameter als Funktion des Abstands zum Punkt des



(a) Für große Werte  $A^2 = 26$  ist der Néel-Zustand am wahrscheinlichsten.

(b) In der ungeordneten Phase sind die Wahrscheinlichkeiten auf viele Zustände verteilt. Messung bei  $A^2 = 2$ .

Abbildung 5.16.: Wahrscheinlichkeit des Auftretens der einzelnen  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustände auf einem Untergitter in Abhängigkeit von  $B^2$ .

Phasenübergangs anwächst.

Eine zweite Interpretation des Bereichs (III) würde auf die Monte-Carlo-Simulationen selber abzielen. Obgleich ich die Simulationen auf unterschiedlichen Gittergrößen an ausgewählten Punkten wiederholt habe und auch auf sehr lange Zeitskalen übergegangen bin, zeigten sich keine Abweichungen von den dargestellten Ergebnissen. Auch Hysterese-Untersuchungen in beide Richtungen (in Richtung  $A^2$  und in Richtung  $B^2$ ) haben keine genaueren Ergebnisse gegeben. Dennoch können zum Beispiel Finite-size-Effekte, die in diesem Bereich unter Umständen sehr dominant sind, nicht ausgeschlossen werden. Geht man von diesem zweiten Szenario aus, so lässt sich wieder die Phasenübergangslinie zwischen den Bereichen (II) und (III) erklären. Geht man, der ersten Interpretation folgend, von metastabilen Zuständen aus, die den beobachteten Verlauf erklären, so bietet sich die Annahme eines Phasenübergangs erster Ordnung in der beschriebenen Form an. Der zweite Erklärungsversuch hingegen würde einen Phasenübergang zweiter Ordnung mit einem kritischen Exponenten  $\beta = 0.05$  nahe legen, bei dem insbesondere Finite-size-Effekte zu erwarten sind. Um die zweite Interpretation zu falsifizieren, muss auf andere Monte-Carlo-Algorithmen zurückgegriffen werden. Eine vielversprechende Verbesserung der angewandten Algorithmen wären Cluster-Algorithmen, wie sie Evertz *et al.* [Evertz u. a. 1993] vorgeschlagen. Eine Implementierung der hier untersuchten Modelle scheint aber nicht trivial zu sein.

### Korrelationsfunktionen

Wichtig zur Beschreibung eines Modells sind auch immer Korrelationsfunktionen. Mit der hier verwendeten Monte-Carlo-Simulation sind longitudinale Korrelationen als Funktion des Abstandes  $r$  zugänglich. In Abbildung 5.17 ist die longitudinale Korrelationsfunktion  $\langle \mathbf{S}_0^z \mathbf{S}_r^z \rangle$  für unterschiedliche Werte von  $A^2$  bei festen Werten von  $B^2 = 2$  und  $C^2 = D^2 = 1$  dargestellt. Bei den gezeigten Korrelationen handelt es sich um antiferromagnetische Korrelationen, die streng alternierend im Abstand  $r$  sind, also für ungerade  $r$  negativ, für gerade  $r$  positiv. In der Abbildung sind nur die Beträge dargestellt. Man erkennt ein exponentielles Abklingen der Korrelation auf Null, bzw. auf einen festen Wert für  $r \rightarrow \infty$ . Für die Korrelationsfunktion gilt die allgemeine Form  $\langle \mathbf{S}_0^z \mathbf{S}_r^z \rangle = \langle \mathbf{S}_0^z \rangle \langle \mathbf{S}_r^z \rangle + (-1)^r a e^{-r/\xi}$ , mit einem Fitparameter  $a$  und der Korrelationslänge  $\xi$ . Auf Tafel (II) der Abb. 5.17 sind die Korrelationsfunktionen logarithmisch dargestellt. Die Steigung der Geraden entspricht der inversen Korrelationslänge.

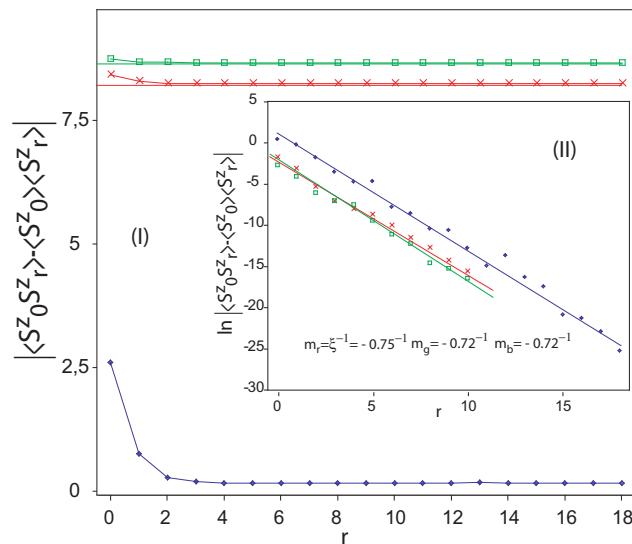


Abbildung 5.17.: In der geordneten und in der ungeordneten Phase lassen sich die Korrelationslängen bestimmen, mit denen die longitudinalen Korrelationsfunktionen exponentiell zerfallen. Von unten nach oben für die Werte  $A^2 = 10$ ,  $A^2 = 17.5$  und  $A^2 = 30$ .

Es fällt auf, dass die Korrelationslänge in der Nähe des Phasenübergangs erster Ordnung in derselben Größenordnung zu finden ist, wie für die Werte von  $A^2$  weg vom kritischen Punkt. Insbesondere divergiert die Korrelationslänge nicht, was typisch ist für Phasenübergänge erster Ordnung, bei denen keine kontinuierliche Symmetrie gebrochen wird [Privman und Fisher 1985, Fisher und Privman 1985]. In dem hier betrachteten System wird eine diskrete Translationsinvarianz (Translationsinvarianz auf dem zu Grunde liegenden Gitter) und keine kontinuierliche Symmetrie gebrochen. Die Korrelationslängen sind aber mit Werten

von  $\xi \approx 0.75$  alle sehr kurz – auch im Vergleich zu den betrachteten Gittergrößen, deren lineare Dimensionen ein Vielfaches dieser Länge darstellen.

Auch in dem Bereich für größere Werte  $B^2$  findet man exponentiell abklingende Korrelationsfunktionen, wie sie in Abb. 5.18 für Werte  $B^2 = 5$  und  $A^2 = 15$  bzw.  $B^2 = 7$  und  $A^2 = 17$  dargestellt sind. Zumindest für den letzteren Wert erhält man eine etwas größere Korrelationslänge von  $\xi \approx 1.1$ .

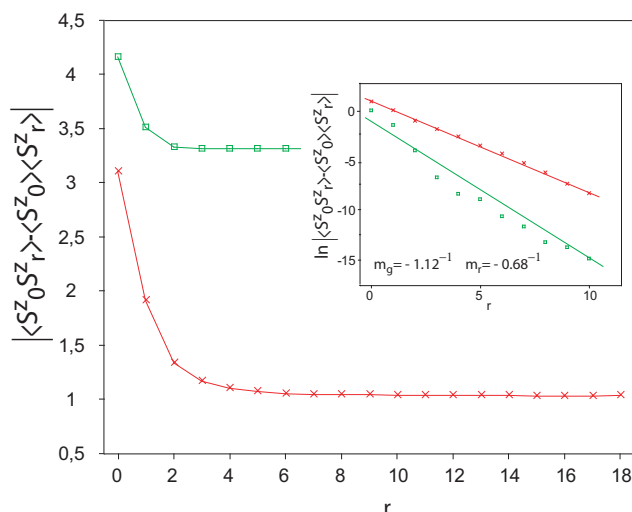


Abbildung 5.18.: Die longitudinale Korrelationsfunktion zeigt auch in dem Bereich (III) exponentielles Abklingen. Hier für die Werte  $A^2 = 15$ ,  $B^2 = 5$  (rot) und  $A^2 = 17$ ,  $B^2 = 7$  (grün).

An weiteren Punkten konnte ich die Korrelationslänge anhand exponentiell abfallender longitudinaler Korrelationsfunktionen bestimmen. An allen untersuchten Punkten bleibt die Korrelationslänge endlich. Insbesondere ist an der Übergangslinie der Bereiche (V) und (IV) *keine* Divergenz der Korrelationslänge zu erkennen. Dies ist ein weiteres Indiz dafür, dass die Übergangslinie der Bereiche (V) und (IV) nicht die kritische Linie eines Phasenübergangs zweiter Ordnung markiert.

Am Phasenübergang erster Ordnung sieht man häufig eine sprunghafte Änderung der Korrelationslänge. Für unterschiedliche Werte in der Nähe des Phasenübergangs erster Ordnung unterscheiden sich die bestimmten Korrelationslängen in diesem Modell aber nur gering. Es ist kein signifikanter Sprung festzustellen. Da sich die Korrelationslängen für große Bereiche von  $A^2$  und  $B^2 = 2$  nur geringfügig unterscheiden, ist am Phasenübergang selber auch nicht mit einem Sprung zu rechnen. Die gemessenen Korrelationslängen stehen also in keinem Widerspruch zur Theorie.

### Zusammenfassung der Ergebnisse

Im vorherigem Abschnitt wurde ein Optimum-Grundzustand auf einem kubischen Gitter in Form eines Vertex-Zustands-Modells konstruiert. In dem Modell liegen 36 lokale Grundzustände vor. Der globale Hamilton-Operator hat einen, auf jedem endlichen Gitter nicht entarteten, globalen Grundzustand. Der Hamilton-Operator besitzt 11 Parameter (10 kontinuierliche und ein diskreter Parameter; die Energieskala ist in den Parametern noch enthalten), wovon drei kontinuierliche Parameter und der diskrete Parameter in den Grundzustand einfließen.

Für die Parameterwahl  $A^2 = 2\sqrt{5}$ ,  $B^2 = \sqrt{\frac{10}{3}}$ ,  $C^2 = \frac{2}{\sqrt{3}}$ ,  $D^2 = 1$ ,  $\sigma = -1$  ist das Modell  $SO(3)$ -symmetrisch und stimmt mit dem VBS-Modell überein.

Im thermodynamischen Limes  $L^3 \rightarrow \infty$  zeigt das Modell einen Quantenphasenübergang von einem nicht entarteten zu einem zweifach entarteten Grundzustand.

Dabei scheint die Ordnung des Phasenübergangs abhängig von den gewählten Parametern zu sein. Für kleine Werte von  $B^2$  ist der Übergang von erster Ordnung. Hier sieht man eine Diskontinuität des Ordnungsparameters, der im Wesentlichen die Untergittermagnetisierung misst. Die Ordnung in diesem Bereich konnte ich mit Hilfe von Hysterese-Messungen und Messungen der Verteilung der Boltzmanngewichte eindeutig bestätigen. Bezüglich der Phasenübergangslinie konnte ich einen linearen Zusammenhang der Parameter  $A^2$  und  $B^2$  ermitteln. Die Gerade lässt sich angeben mit  $A^2 = (-1.8 \pm 0.2)B^2 + (21.1 \pm 0.2)$ , für  $B^2 < 2.8$ .

Für größere Werte  $B^2$  ändert sich das Verhalten von einer sprunghaften Veränderung des Ordnungsparameters in eine kontinuierliche Änderung. Für diesen Bereich lassen sich zwei Erklärungen finden. Einerseits könnten hier metastabile Zustände auftreten, die mit Hilfe der hier verwendeten Monte-Carlo-Simulation nicht genauer untersucht werden können. Metastabile Zustände treten häufig in Zusammenhang mit Phasenübergängen erster Ordnung auf. Es läge dann nahe, einen Phasenübergang zu vermuten, der schwach erster Ordnung ist. Für den Phasenübergang konnte ich die Gerade  $A^2 = (2.49 \pm 0.04)B^2 + (8.9 \pm 0.2)$  für  $B^2 > 2.8$  bestimmen. Der Ordnungsparameter wächst mit einem kritischen Exponenten  $\beta \approx 0.05$  in Abhängigkeit des Abstands  $t$  von der Phasengrenze an.

In der zweiten Interpretation führen Finite-size-Effekte und Effekte des Critical-slowing-down zum Zusammenbruch der angewandten Monte-Carlo-Simulationen. In diesem Fall spricht vieles für einen Phasenübergang zweiter Ordnung entlang derselben, zuvor angegebenen Geraden. Auch in diesem Fall liegt der kritische Exponent  $\beta \approx 0.05$  vor. Eine Verbesserung der angewandten Monte-Carlo-Simulationen mit Hilfe von Cluster-Algorithmen [Evertz u. a. 1993] scheint in diesem Fall sinnvoll, aber nicht trivial.

Die Gerade, die den Phasenübergang erster Ordnung für  $B^2 < 2.8$  beschreibt und die, die den Phasenübergang für  $B^2 > 2.8$  beschreibt, schneiden sich am Punkt  $A^2 \approx 16$  und  $B^2 \approx 2.8$ . In dem Fall, dass die Gerade  $A^2 = (2.49 \pm 0.04)B^2 + (8.9 \pm 0.2)$  einen Phasenübergang zweiter Ordnung beschreibt, entspricht dieser Punkt einem *trikritischen* Punkt [Aharony 1982].

Die hier auftretende Problematik, zwischen den beiden Alternativen zu entscheiden, ist längst bekannt. Bei Monte-Carlo-Simulationen von Systemen bei endlicher Gittergröße ist es schwer zu entscheiden, ob ein Phasenübergang schwach erster oder zweiter Ordnung ist [Binder 1987]. Im Zusammenhang mit dem beobachteten Phasenübergang erster Ordnung in dem angrenzenden Parameterbereich, scheint es jedoch wahrscheinlicher, dass es sich hier um einen Phasenübergang zweiter Ordnung handelt. Die Änderung eines Phasenübergangs in Abhängigkeit der Parameter von erster Ordnung hin zu schwach erster Ordnung ist ungewöhnlich und mir aus der Literatur nicht bekannt. Hingegen wird das Auftreten eines trikritischen Punktes, der den Übergang eines Phasenübergangs erster Ordnung hin zu einem Phasenübergang zweiter Ordnung markiert, oft beobachtet [Aharony 1982].

Für alle Parameterwerte des Modells konnten exponentiell abklingende longitudinale Korrelationsfunktionen gefunden werden. Die Korrelationslängen konnten für unterschiedliche Parameterwerte bestimmt werden.

Eine divergierende Korrelationslänge konnte nicht beobachtet werden. Dies steht aber nicht im Widerspruch zu einem Phasenübergang, der möglicherweise zweiter Ordnung ist, aber durch den Bereich (III) überdeckt wird.

Simulationen für andere Parameterbereiche mit  $C^2 \neq 1$  ergeben kein qualitativ anderes Verhalten. Die unterschiedlichen Phasenübergänge treten lediglich bei anderen Werten von  $A^2$  und  $B^2$  auf.

Insgesamt konnte bei diesem Modell eine große Vielzahl unterschiedlicher Phänomene gefunden werden. Es konnte gezeigt werden, dass Quantenphasenübergänge erster Ordnung und zweiter oder schwach erster Ordnung im selben Modell abhängig von der Wahl der Parameter auftreten.



### 5.2.2. Spin-3 auf dem Hexagonalgitter

In diesem Abschnitt soll wieder ein Spin-3 System betrachtet werden. Diesmal aber ein zweidimensionales, das auf einem Hexagonalgitter realisiert wird.

Ein Hexagonalgitter hat die Koordinationszahl  $z = 3$ . Damit entspricht sie exakt der Größe des Spins  $S = 3$ . Im Gegensatz zum vorherigen Modell ist damit der Spin deutlich größer, als er mindestens sein müsste.

Auch hier, wie auch für die nächsten Modelle, werde ich zunächst die Konstruktion des Grundzustandes angeben. Hierbei werde ich auf die Besonderheit der Konstruktion für diesen Fall eingehen (Die Besonderheiten zeichnen sich zum Beispiel durch zwei Bondvariablen zwischen je zwei Gitterplätzen, oder drei Zuständen pro Bond aus.) und dann die Simulationsergebnisse vorstellen und interpretieren.

#### Konstruktion des Grundzustandes

Es liegen dem allgemeinen Hamilton-Operator von diesem Modell die im Anhang A.1 angegebenen 49 lokalen Zwei-Spin-Zustände zu Grunde. Der Ausgangs-Hamiltonian hat damit die in Formel (5.9) angegebene Form. Auch dieses Modell soll den geforderten Symmetrien 2.2 genügen.

Da bei diesem System der Spin doppelt so groß ist, wie er nach der im Abschnitt 3 aufgestellten Bedingung sein müsste, gibt es eine ganze Reihe von Möglichkeiten Vertex-Zustands-Modelle zu konstruieren. Ich möchte mich hier auf eine Möglichkeit beschränken. Wenn man generell von einem Spin  $S$  ausgeht, mit dem man ein Vertex-Zustands-Modell konstruieren möchte, so stehen einem  $2S$  mögliche Bonds zur Verfügung, die zu einem nächsten Nachbarn zeigen können. Jeder dieser Bonds trägt dann eine Variable, die zwei Zustände annehmen kann. Diese Interpretation entspricht gerade der Idee der AKLT-Modelle [Affleck u. a. 1987], bei denen ein Spin der Größe  $S$  dadurch entsteht, dass man  $2S$  Spin- $\frac{1}{2}$  symmetrisiert. Jeder dieser  $2S$  Spin- $\frac{1}{2}$  kann mit einem Nachbarn wechselwirken<sup>5</sup> und entspricht insoweit  $2S$  Bonds. Allerdings wird bei der hier beschriebenen Modellklasse keine Antisymmetrisierung zweier benachbarter Spins durchgeführt, wie bei den AKLT-Modellen. Bei Vertex-Zustands-Modellen tritt hier das Aussummieren innerer Bonds an die Stelle. Die Abb. 5.19 visualisiert die Symmetrisierung von 6 Spin- $\frac{1}{2}$  zu einem Spin-3. Auf dem Hexagonalgitter muss man zwischen Vertices auf den unterschiedlichen Untergittern  $\mathfrak{A}$  und  $\mathfrak{B}$  unterscheiden, die sich auf natürliche Weise aus der Geometrie des Gitters ergeben (siehe Abbildung 5.20).

<sup>5</sup>Bei den AKLT-Modellen werden je zwei benachbarte Spin- $\frac{1}{2}$  untereinander antisymmetrisiert. Man erreicht so, dass der Gesamtspin von zwei Spins kleiner als der maximal mögliche bleibt. Ein Projektionsoperator auf dem maximalen Spin hat diese Konstruktion dann als Grundzustand.

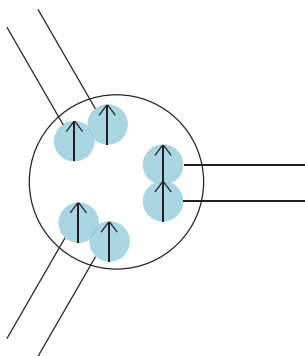


Abbildung 5.19.: Visualisierung von 6 Spin- $\frac{1}{2}$ , die symmetrisiert einen Spin-3 ergeben. Jeder der 6 Spin- $\frac{1}{2}$  kann mit einem Nachbarn in Wechselwirkung treten.

In dem hier betrachteten Modell sollen die  $2S$  möglichen Bonds nun gleichmäßig auf die drei nächsten Nachbarn eines Gitterplatzes verteilt werden. So bestehen zwischen je zwei benachbarten Gitterplätzen je zwei Bonds. Andere Anordnungen der Bonds oder „freie Bonds“ sollen nicht betrachtet werden. Es sei aber darauf hingewiesen, dass eine nicht gleichmäßige Verteilung der Bonds zu exponentiell entarteten Grundzuständen führt, wenn die in Kapitel 2.2 geforderten Symmetrien gelten sollen. Dies zeigte sich schon in [Niggemann und Zittartz 1996] für die eindimensionale Spin- $\frac{3}{2}$  Kette, für die ein Matrix-Produkt-Ansatz mit Matrizen der Größe  $3 \times 2$  auf einem Untergitter und Matrizen der Größe  $2 \times 3$  auf dem anderen konstruiert wurde. Auch hier wurde erkannt, dass der Grundzustand exponentiell mit der Kettenlänge entartete. In dieser Arbeit sollen nur niedrig entartete oder nicht entartete Grundzustände betrachtet werden. Grundzustände mit „freien Bonds“ werden für Spin-2 auf dem Hexagonalgitter in einem der nächsten Kapitel untersucht. Hier wird auch erklärt, was genau unter freien Bonds zu verstehen ist. Freie Bonds führen nicht zwangsläufig zu einer hohen Entartung.

Ein typischer Vertex für einen Spin-3 auf dem Hexagonalgitter ist in Abbildung 5.20 dargestellt. Mit sechs Bondvariablen, die jeweils zwei Werte annehmen können, erhält man so, wie im Fall des Spin-3 auf dem kubischen Gitter, 64 unterschiedliche Vertices auf jedem Untergitter.

Für die Konstruktion der lokalen Grundzustände ist eine Uminterpretation der oben beschriebenen Vertices übersichtlicher. Daher sollen also die Doppelbonds mit je zwei Zustandsvariablen in jeder Richtung in einfache Bonds mit je drei Zustandsvariablen uminterpretiert werden. Die Zustandsvariablen sollen im Folgenden mit herauslaufenden und hereinlaufenden Pfeilen und mit Null bezeichnet werden. Ein typischer Vertex ist in Abbildung 5.21 dargestellt. Es fällt auf, dass in dieser Interpretation nur noch  $3^3 = 27$  unterschiedliche Vertices auftreten, im Gegensatz zu den  $2^6 = 64$  Vertices aus der ursprünglichen Interpretation. Dass die Überlegung aber dennoch auf dasselbe Modell führt, versteht man leicht.

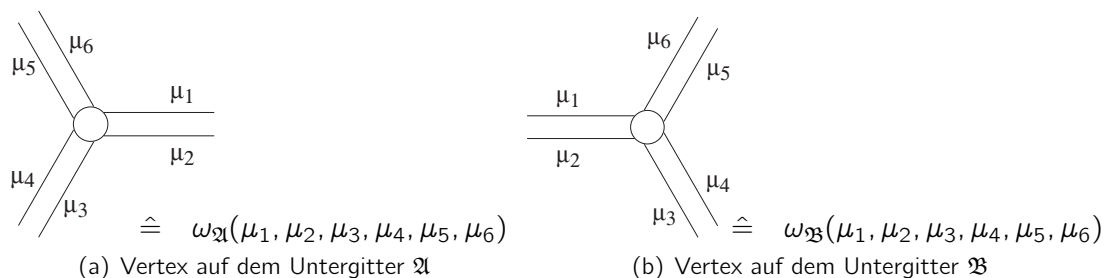


Abbildung 5.20.: Die Vertices werden durch 6 Bondvariablen  $\mu_1 \dots \mu_6$  bestimmt. Die Bondvariablen können zwei Werte annehmen, etwa „Pfeil rein“ und „Pfeil raus“.

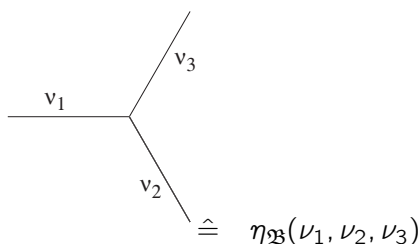


Abbildung 5.21.: In der Interpretation der Vertices mit drei Bondvariablen pro Bond wird nur noch ein Bond pro Richtung zur Konstruktion der Vertex-Zustands-Modelle benötigt.

Eine Konfiguration der Bondvariablen, bei der der eine Bond einen herauslaufenden Pfeil trägt und der andere, auf dem benachbarten Bond in derselben Richtung, einen hereinlaufenden Pfeil trägt, führt zum gleichen quantenmechanischen Zustand, wie die umgekehrte Konfiguration.

In der Interpretation mit zwei Bonds pro Richtung wird der Spin-Zustand aus der Konfiguration der Bondvariablen so bestimmt, dass die Summe der herauslaufenden Pfeile minus die Summe der hereinlaufenden Pfeile durch zwei geteilt den  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwert ergibt. In der neuen Interpretation zählen die Pfeile, die herauslaufen, mit plus eins, Pfeile, die hereinlaufen, mit minus eins. Die Summe ergibt nun den  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwert. Wieder müssen die Vorfaktoren gesondert bestimmt werden.

Für das Quadratgitter und auch für das kubische Gitter erhielten die Vertices zu gleichem Eigenwert  $\mathfrak{m}$  stets vom Betrag her den gleichen Vorfaktor (unterschieden maximal durch einen Faktor  $\sigma$ ).

Für dieses Modell gilt dies nicht, da zum Beispiel, ein Zustand  $\propto |1\rangle$  auf unterschiedliche Weise aus verschiedenen Vertices hervorgehen kann: Ein Zustand  $\propto |1\rangle$  kann durch einen Vertex mit zwei Bondvariablen gleich Null und einem herauslaufenden Pfeil bestimmt

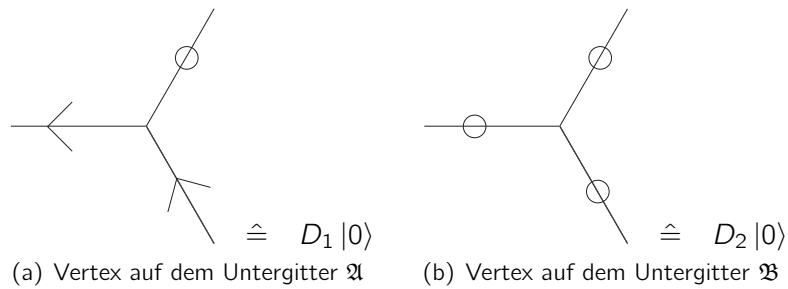


Abbildung 5.22.: Die Konfiguration der Bondvariablen unterscheidet sich topologisch voneinander und führt zu unterschiedlichen Faktoren  $D_1$  und  $D_2$ .

werden, ebenso wie durch eine Konfiguration, die zwei hereinlaufende und einen herauslaufenden Pfeil aufweist. Beide Konfigurationen unterscheiden sich topologisch voneinander. Ein ähnliches Argument kann für Zustände  $\propto |0\rangle$  gefunden werden. Damit ist einsichtig, dass es in diesem Modell mehr kontinuierliche Parameter gibt, die als Vorfaktoren auftreten können (im Vergleich zum Spin-3 auf dem kubischen Gitter). Die Abbildung 5.22 zeigt zwei Vertices auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$  mit  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwerte  $\mathbf{m} = 0$ . Die Konfigurationen der Bondvariablen unterscheiden sich topologisch voneinander.

In der folgenden Tabelle 5.4 sind die Vertices des Untergitters  $\mathfrak{A}$  den Ein-Spin-Zuständen zugeordnet.

Auch für das andere Untergitter  $\mathfrak{B}$  lässt sich eine solche Zuordnung (5.5) angeben.

Wie man anhand der späteren lokalen Grundzustände sehen kann, muss an die kontinuierlichen Parameter  $C_1, C_2, D_1, D_2$  folgende Bedingung gestellt werden:

$$\frac{D_1}{D_2} = \frac{C_1}{C_2}. \quad (5.19)$$

Nur so ist es möglich, durch geeignete Wahl der  $\lambda$ -Parameter und der Superpositionsparameter, diese Zustände zu Grundzuständen zu machen. Im Folgenden soll zur besseren Übersicht diese Wahl durch die Ersetzung  $D_2 = D_1 \frac{C_1}{C_2}$  immer erfüllt sein.

Im Gegensatz zu dem vorherigen Modell, das nur zwei Bondvariablen pro Bond trug, wurden bei diesem Modell jedem Bond drei Zustände zugeschrieben. Das Aussummieren eines inneren Bonds bedeutet in diesem Fall, dass Zwei-Spin-Zustände entstehen, die Superpositionen von drei Summanden sind. Wie man in Abbildung 5.23 sieht, erhält man auf natürliche Weise die Rechenregel (5.20) bei Vertices mit drei Bondvariablen.

$$|\psi\rangle = \alpha_1 \alpha_2 |\mathbf{m}_1 - 1, \mathbf{m}_2 + 1\rangle + \alpha_3 \alpha_4 |\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2\rangle + \alpha_5 \alpha_6 |\mathbf{m}_1 + 1, \mathbf{m}_2 - 1\rangle, \quad (5.20)$$

mit der Identifikation  $\mathbf{m}_1 = \nu_1 + \nu_2$  und  $\mathbf{m}_2 = \nu_3 + \nu_4$ . Grafisch entspricht dies gerade der

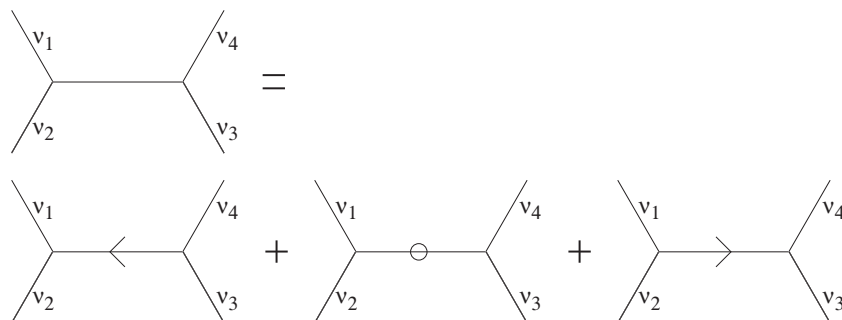


Abbildung 5.23.: Aussummieren eines inneren Bonds bei Vertices mit drei Bondvariablen.

Darstellung in Abbildung 5.23.

Durch das Aussummieren der inneren Bondvariablen erhält man die 25 Zwei-Spin-Zustände:

$A^2  3, \bar{3}\rangle + \sigma B^2  2, \bar{2}\rangle + C_2^2  1, \bar{1}\rangle$	$A^2  \bar{3}, 3\rangle + \sigma B^2  \bar{2}, 2\rangle + C_2^2  \bar{1}, 1\rangle$
$\sigma B^2  2, \bar{2}\rangle + C_1^2  1, \bar{1}\rangle + \sigma D_1^2  0, 0\rangle$	$\sigma B^2  \bar{2}, 2\rangle + C_1^2  \bar{1}, 1\rangle + \sigma D_1^2  0, 0\rangle$
$C_2^2 ( 1, \bar{1}\rangle +  \bar{1}, 1\rangle) + \sigma D_1^2  0, 0\rangle$	
$AB  \bar{2}, 3\rangle + \sigma BC_1  \bar{1}, 2\rangle + C_2 D_1  0, 1\rangle$	$AB  2, \bar{3}\rangle + \sigma BC_1  1, \bar{2}\rangle + C_2 D_1  0, \bar{1}\rangle$
$AB  3, \bar{2}\rangle + \sigma BC_1  2, \bar{1}\rangle + C_2 D_1  1, 0\rangle$	$AB  \bar{3}, 2\rangle + \sigma BC_1  \bar{2}, 1\rangle + C_2 D_1  \bar{1}, 0\rangle$
$\sigma BC_2  \bar{1}, 2\rangle + \sigma C_2 D_1  1, 0\rangle + C_1 D_1  0, 1\rangle$	$\sigma BC_2  1, \bar{2}\rangle + \sigma C_2 D_1  \bar{1}, 0\rangle + C_1 D_1  0, \bar{1}\rangle$
$\sigma BC_2  2, \bar{1}\rangle + \sigma C_2 D_1  0, 1\rangle + C_1 D_1  1, 0\rangle$	$\sigma BC_2  \bar{2}, 1\rangle + \sigma C_2 D_1  0, \bar{1}\rangle + C_1 D_1  \bar{1}, 0\rangle$
$AC_2  \bar{1}, 3\rangle + C_2^2  1, 1\rangle + \sigma BD_1  0, 2\rangle$	$AC_2  1, \bar{3}\rangle + C_2^2  \bar{1}, \bar{1}\rangle + \sigma BD_1  0, \bar{2}\rangle$
$AC_2  3, \bar{1}\rangle + C_2^2  1, 1\rangle + \sigma BD_1  2, 0\rangle$	$AC_2  \bar{3}, 1\rangle + C_2^2  \bar{1}, \bar{1}\rangle + \sigma BD_1  \bar{2}, 0\rangle$
$C_1^2  1, 1\rangle + \sigma BD_1 ( 2, 0\rangle +  0, 2\rangle)$	$C_1^2  \bar{1}, \bar{1}\rangle + \sigma BD_1 ( \bar{2}, 0\rangle +  0, \bar{2}\rangle)$
$B (C_2  2, 1\rangle + \sigma C_1  1, 2\rangle) + AD_1  0, 3\rangle$	$B (C_2  \bar{2}, \bar{1}\rangle + \sigma C_1  \bar{1}, \bar{2}\rangle) + AD_1  0, \bar{3}\rangle$
$B (\sigma C_1  2, 1\rangle + C_2  1, 2\rangle) + AD_1  3, 0\rangle$	$B (\sigma C_1  \bar{2}, \bar{1}\rangle + C_2  \bar{1}, \bar{2}\rangle) + AD_1  \bar{3}, 0\rangle$
$\sigma B^2  2, 2\rangle + AC_2 ( 3, 1\rangle +  1, 3\rangle)$	$\sigma B^2  \bar{2}, \bar{2}\rangle + AC_2 ( \bar{3}, \bar{1}\rangle +  \bar{1}, \bar{3}\rangle)$

Tabelle 5.6.: Lokale Zwei-Spin-Zustände für das Hexagonalgitter

Damit die angegebenen Zwei-Spin-Zustände lokale Eigenzustände sind, müssen an die Superpositionsparameter wieder Bedingungen gestellt werden, die im Anhang B angegeben sind.

Ebenso müssen die 15  $\lambda$ -Parameter

$$\begin{aligned} \lambda_{41}^+ &= \lambda_{31}^+ = \lambda_{31}^- = \lambda_{22}^+ = \lambda_{23}^+ = \lambda_{21}^- = \lambda_{12}^+ = \lambda_{13}^+ = \\ \lambda_{12}^- &= \lambda_{13}^- = \lambda_{02}^+ = \lambda_{03}^+ = \lambda_{04}^+ = \lambda_{02}^- = \lambda_{03}^- = 0 \end{aligned} \quad (5.21)$$

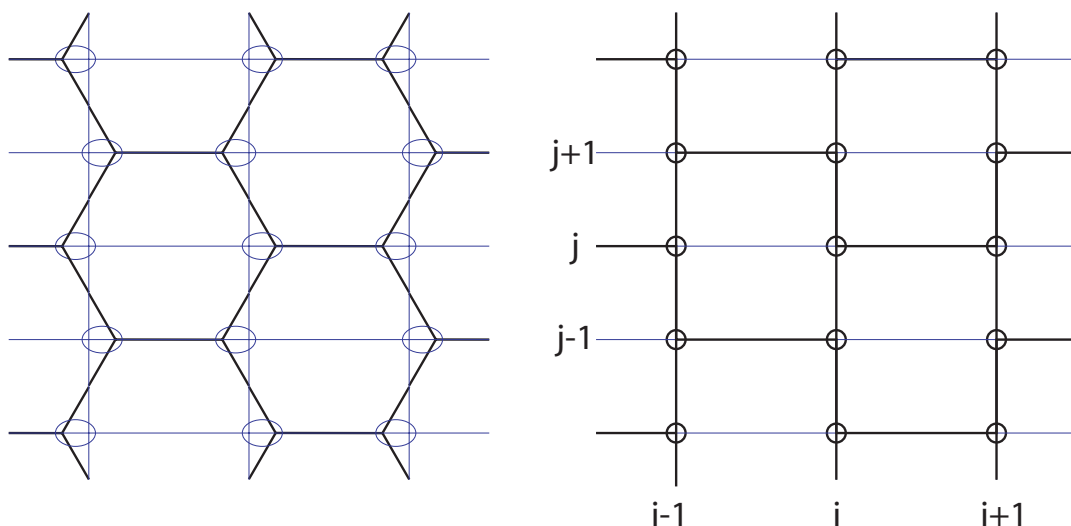


Abbildung 5.24.: Abbildung des Hexagonalgitters auf ein ausgedünntes Quadratgitter.

gesetzt werden.

Auch hier sollen diese lokalen Zustände Grundzustände der Hamiltonian  $\mathbf{h}_{ij}$  zum Eigenwert Null sein, was bedingt, dass die anderen  $\lambda$ -Parameter größer Null gesetzt werden müssen.

$$\lambda_6, \lambda_5^+, \lambda_5^-, \lambda_{42}^+, \lambda_4^-, \lambda_{32}^+, \lambda_{32}^-, \lambda_{21}^+, \lambda_{22}^-, \lambda_{11}^+, \lambda_{11}^-, \lambda_{01}^+, \lambda_{01}^- > 0 \quad (5.22)$$

Damit sind, neben 13 freien  $\lambda$ -Parametern, effektiv fünf Superpositionsparameter  $A$ ,  $B$ ,  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $D_1$  und ein diskreter Parameter  $\sigma$  in diesem Modell verfügbar. Der Off-Set ist mit  $E_0 = 0$  festgelegt; die Skala ist wieder in den Parametern enthalten.

Um aus den lokalen Grundzuständen einen eindeutigen Optimum-Grundzustand für das gesamte System zu erhalten, muss noch über die Frage der Randbedingungen nachgedacht werden. Im Gegensatz zu dem vorherigen Fall des kubischen Gitters gibt es bei einem Hexagonalgitter keine kanonische Weise, periodische Randbedingungen zu implementieren. Eine sinnvolle Realisation periodischer Randbedingungen wird mit Abbildung 5.24 erklärt.

Das Hexagonalgitter wird in einer Richtung so verbogen, dass Nachbarn, die nicht horizontal liegen, auf einer vertikalen Linie zu liegen kommen. Das entstehende Gitter sieht aus wie ein ausgedünntes Quadratgitter, und periodische Randbedingungen werden mittels der Identifikation  $i + L_x = i$  und  $j + L_y = j$  erreicht. Zur Implementierung der Monte-Carlo-Simulationen für die Modelle aus den Abschnitten (5.3.1),(5.3.1),(5.2.2) eignet sich diese Abbildung auf ein Quadratgitter besonders gut.

### Eigenschaften des Grundzustandes

Der globale Grundzustand, der nach Aussummieren aller innerer Bondvariablen aus den 25 lokalen Grundzuständen hervorgeht, besitzt eine verschwindende Gesamtmagnetisierung  $\langle \mathbf{S}_{tot}^z \rangle$ . Ebenso ist die durchschnittliche Magnetisierung einzelner Spins für alle Parameterwerte und jeder endlichen Gittergröße Null. Wie sich später zeigen wird, sind auch die longitudinalen Korrelationen streng alternierend. Der Grundzustand ist in diesem Sinne antiferromagnetisch.

Der globale Grundzustand wird von den fünf Superpositionsparametern  $A, B, C_1, C_2, D_1$  und dem diskreten Parameter  $\sigma$  bestimmt.

Wie bereits die Betrachtungen im vorherigen Kapitel gezeigt haben, gilt auch hier, dass für große Parameter  $A \rightarrow \infty$  der globale Zustand eine Superposition der zwei bereits benannten Néel-Zustände ist. Wieder lässt sich der Zustand in diesem Fall schreiben als:  $|\Psi_0\rangle = |\text{Néel}_\alpha\rangle + |\text{Néel}_\beta\rangle$ .

Für die Parameter:

$$A = \sqrt{\frac{5}{2}}, B = \sqrt{\frac{5}{6}}, C_1 = \sqrt{\frac{2}{3}}, C_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}, D_1 = \frac{1}{2}, D_2 = 1, \sigma = -1 \quad (5.23)$$

und entsprechende Wahl der  $\lambda$ -Parameter wird ein isotroper Punkt gekennzeichnet, bei dem sowohl der globale Hamilton-Operator, als auch die lokalen Hamilton-Operatoren die volle  $SO(3)$ -Symmetrie besitzen. Der globale Hamilton-Operator lässt sich dann in der Spin-Darstellung schreiben

$$\mathbf{H} = \vartheta \mathbf{H}^{(6)} + \varphi \mathbf{H}^{(5)}. \quad (5.24)$$

Dies entspricht einer Superposition von Projektionsoperatoren, wovon der erste Anteil  $\mathbf{H}^{(6)} = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{h}_{ij}^{(6)}$  aus lokalen Operatoren  $\mathbf{h}_{ij}$  besteht, die auf das Multipllett mit Gesamtspin  $S = 6$  projizieren. Der zweite  $\mathbf{H}^{(5)} = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{h}_{ij}^{(5)}$  lässt sich als Summe lokaler Operatoren schreiben, die Projektionsoperatoren auf den Unterraum mit Gesamtspin  $S = 5$  darstellen. Der Hamilton-Operator  $\mathbf{H}^{(6)}$  stimmt dabei mit dem in Abschnitt 5.2.1 in Gleichung (5.15) angegebenen Operator überein. Für den Projektionsoperator auf dem Unterraum mit Gesamtspin  $S = 5$  lässt sich die folgende Spindarstellung angeben:

$$\mathbf{h}_{ij}^{(5)} = \alpha \bar{\mathbf{S}}_i \cdot \bar{\mathbf{S}}_j + \beta (\bar{\mathbf{S}}_i \cdot \bar{\mathbf{S}}_j)^2 + \gamma (\bar{\mathbf{S}}_i \cdot \bar{\mathbf{S}}_j)^3 + \delta (\bar{\mathbf{S}}_i \cdot \bar{\mathbf{S}}_j)^4 + \eta (\bar{\mathbf{S}}_i \cdot \bar{\mathbf{S}}_j)^5 + \iota (\bar{\mathbf{S}}_i \cdot \bar{\mathbf{S}}_j)^6 + \kappa, \quad (5.25)$$

mit den Vorfaktoren:

$$\alpha = \frac{111}{700}, \quad \beta = \frac{347}{9450}, \quad \gamma = \frac{131}{75600}, \quad (5.26)$$

$$\delta = -\frac{247}{680400}, \quad \eta = -\frac{31}{680400}, \quad \iota = -\frac{1}{680400}, \quad \kappa = \frac{33}{175}. \quad (5.27)$$

Die Parameter  $\vartheta$  und  $\varphi$  sind reell und positiv.

Es sei noch darauf hingewiesen, dass die oben angegebenen Parameter (5.23) die in (5.19) geforderte Relation  $D_2 = D_1 \frac{C_1}{C_2}$  erfüllen.

Auch dieser Punkt stimmt wieder mit einem in [Affleck u. a. 1988] angegebenen VBS-Modell überein. In der Formulierung von Affleck, Kennedy, Lieb und Tasaki (AKLT) muss man auf die anfangs eingeführte Darstellung der Vertices mittels Doppelbonds in jeder Richtung zurückgreifen. So erhält man die von AKLT geforderte Bedingung  $S = nz/2$  wieder, in der  $S$  die Größe des Spins ( $S = 3$ ),  $z$  die Koordinationszahl ( $z = 3$ ) und  $n \in \mathbb{N} = 2$  ist. Auch der hier angegebene Hamiltonian entspricht der Form:

$$\mathbf{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{S'=2S-n+1(=5)}^{2S(=6)} a_{S'} \mathbf{P}_{S'}(\vec{\mathbf{S}}_i + \vec{\mathbf{S}}_j), \quad (5.28)$$

mit Projektionsoperatoren  $\mathbf{P}_{S'}$  auf den Unterraum mit Gesamtspin  $S'$ . Man erkennt hier noch einmal die Äquivalenz der beiden Formulierungen, bei der die eine von drei Zuständen der Bondvariablen ausgeht, die andere von zwei Zuständen pro Bondvariable, aber von doppelt so vielen Bonds.

Bei willkürlicher, aber positiver Wahl der  $\lambda$ -Parameter aus den Ungleichungen (5.22), stimmt der Grundzustand mit dem VBS-Grundzustand überein. Der Hamilton-Operator zeigt dann jedoch ein anderes Spektrum. Auch insofern ist die hier beschriebene Formulierung eine Verallgemeinerung auf anisotrope Wechselwirkungen.

### Monte-Carlo-Simulation und Ergebnisse

Für die Monte-Carlo-Simulationen dieses Modells wurde die Formulierung mit zwei Bonds pro Richtung gewählt, um geschlossene Loops kreieren zu können, die dann mittels Pfeilumkehr zu einer neuen Konfiguration führen. Hierbei ist es aber entscheidend, dass man die Regel des Aussummierens, wie sie in (5.20) dargestellt wurde, auf die Formulierung mit Doppel-Bonds überträgt. Schaut man auf die Zuweisung der Vertices in Abbildung 5.20, so muss man das Aussummieren schreiben als:

$$|\psi\rangle = \omega_{\mathfrak{A}}(1, 1, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6) \otimes \omega_{\mathfrak{B}}(-1, -1, \mu_7, \mu_8, \mu_9, \mu_{10}) + \quad (5.29)$$

$$\frac{1}{2} \omega_{\mathfrak{A}}(1, -1, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6) \otimes \omega_{\mathfrak{B}}(-1, 1, \mu_7, \mu_8, \mu_9, \mu_{10}) + \quad (5.30)$$

$$\frac{1}{2} \omega_{\mathfrak{A}}(-1, 1, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6) \otimes \omega_{\mathfrak{B}}(1, -1, \mu_7, \mu_8, \mu_9, \mu_{10}) + \quad (5.31)$$

$$\omega_{\mathfrak{A}}(-1, -1, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6) \otimes \omega_{\mathfrak{B}}(1, 1, \mu_7, \mu_8, \mu_9, \mu_{10}), \quad (5.32)$$

was sich im Wesentlichen nur durch einen Faktor  $\frac{1}{2}$  an den Stellen unterscheidet, an denen entgegengerichtete Bondvariablen auf benachbarten Bonds auftreten.

Leider lag auch bei diesem Modell, auf Grund des negativen Vorzeichens von  $\sigma = -1$  am isotropen Punkt, die Möglichkeit, Daten mittels der vorgestellten Simulationen zu erreichen, außerhalb des darstellbaren Regimes. Daher möchte ich hier die Ergebnisse für einen



großen Parameterbereich mit positiven Gewichten, insbesondere also mit  $\sigma = 1$ , vorstellen.

In Abhängigkeit von den unterschiedlichen Parametern war es möglich, einen Quantenphasenübergang von einer translationsinvarianten Phase hin zu einer symmetriebrochenen Phase nachzuvollziehen und den kritischen Exponenten zu bestimmen. Als geeigneten Ordnungsparameter konnte ich wieder den, in Kapitel 5.1 eingeführten Parameter, verwenden:

$$\langle O \rangle = \left| \left\langle \frac{1}{N} \sum_{\vec{J}} S^z e^{i\vec{J} \cdot \vec{K}} \right\rangle \right|, \quad (5.33)$$

mit einem Wellenvektor  $\vec{K} = (\pi, \pi)$  und dem Gitterplatzvektor  $\vec{J}$ . Der zu beobachtende Phasenübergang geht mit einem  $Z_2$ -Symmetriebruch einher. Er führt von einem nicht entarteten Grundzustand hin zu einer zweifachen Entartung. Hierbei stellt sich heraus, dass der treibende Parameter für diesen Übergang alleine der Parameter  $A$  ist. Der Phasenübergang ist im gesamten gemessenen Parameterraum zweiter Ordnung.

In der Abbildung 5.25 ist auf Tafel (II) der Ordnungsparameter gegen den treibenden Parameter  $A^2$  bei Werten  $B^2 = 2, C_1^2 = 1, C_2^2 = 0.5, D_1^2 = 1$  und  $D_2^2 = 2$  aufgetragen. Die Messungen wurden bei einer Gittergröße von  $48 \times 48$  Gitterplätzen<sup>6</sup> durchgeführt. Man erkennt gut, wie der Ordnungsparameter in der einen Phase  $A^2 < A_c^2$  (abgesehen von numerischen Ungenauigkeiten) Null ist und sich dann mit einem kritischen Exponenten öffnet. In dem großen Schaukasten (I) wurde der Logarithmus des Ordnungsparameters gegen den Logarithmus der Abweichung zum kritischen Punkt  $\ln(A^2 - A_c^2)$  aufgetragen, um den kritischen Exponenten genauer zu bestimmen. Hierzu musste wieder, wie bereits in Kapitel 5.1, der kritische Punkt zuvor genau bestimmt werden. Im Kasten (III) wurde der kritische Punkt mit Hilfe des auftretenden „Knicks“ in der Größe  $\left| \langle S_0^z S_1^z \rangle \right| - \left| \langle S_0^z S_{L/2}^z \rangle \right|$  zu  $A_c^2 = 4.0 \pm 0.2$  bestimmt, wodurch es möglich war, den kritischen Exponenten zu  $\beta = 0.107 \pm 0.005$  zu bestimmen.

Es zeigt sich damit ein kritischer Exponent, der in der Nähe des kritischen Exponenten eines Ising-Übergangs mit  $\beta_{\text{Ising}} = \frac{1}{8}$  liegt. Auch die genaue Bestimmung des kritischen Exponenten für andere Parameterbereiche liefert einen Wert in der Nähe von  $\beta = \frac{1}{8}$ , sodass man davon ausgehen kann, dass der hier beobachtete Übergang, abgesehen von numerischen Ungenauigkeiten, einen Übergang mit dem Ising-Exponenten für ein zweidimensionales Isingmodell entspricht. Eine Finite-size-Analyse konnte die Werte des kritischen Exponenten  $\beta = \frac{1}{8}$  für  $B^2 = 2, C_1^2 = 1, C_2 = 0.5, D_1 = 1, D_2 = 2$  und  $A^2 = 4$  bestätigen und lieferte überdies den kritischen Exponenten  $\nu = 1$ .

<sup>6</sup>Man beachte die zuvor beschriebene Abbildung des Hexagonalgitters auf das ausgedünnte quadratische Gitter.

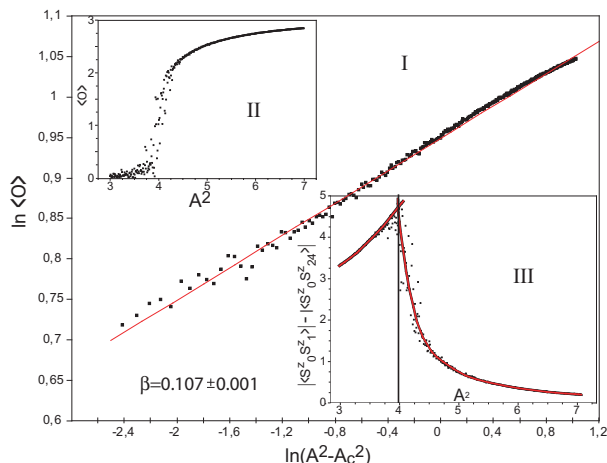
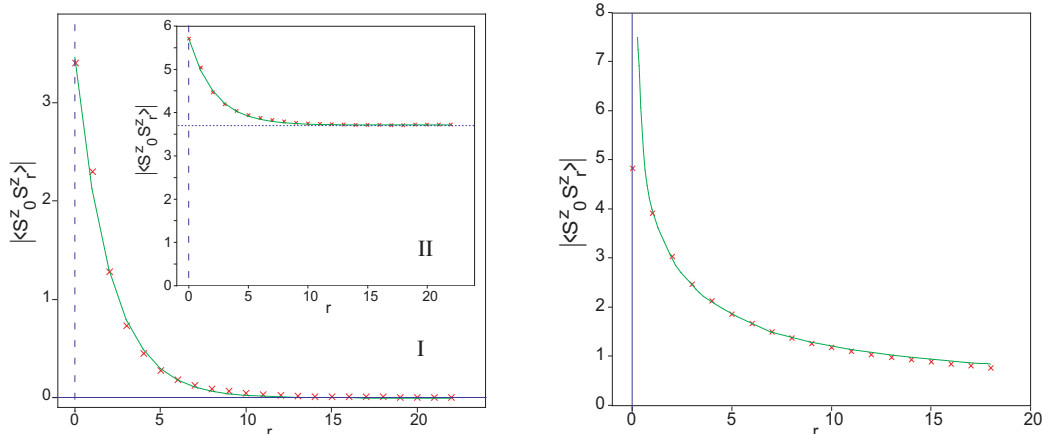


Abbildung 5.25.: Zur Bestimmung des kritischen Exponenten für die Parameter  $B^2 = 2$ ,  $C_1^2 = 1$ ,  $C_2 = 0.5$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_2 = 2$  wird der kritische Punkt zu  $A^2 = 4$  bestimmt (Tafel III) und der Ordnungsparameter im doppellogarithmischen Plot gegen den Abstand vom kritischen Punkt aufgetragen (Tafel I). Gittergröße  $48 \times 48$

### Korrelationsfunktionen

Die nächste Frage, die sich stellt, ist die nach den Korrelationsfunktionen. Auch hier lässt sich das Erwartete bestätigen, und es tritt eine exponentiell abklingende Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion innerhalb der einzelnen Phasen auf. Hierbei beobachtet man wieder das bereits bei dem Spin-2 auf dem Quadratgitter gesehene Verhalten, dass in der ungeordneten Phase die longitudinale Korrelationsfunktion für große Abstände  $r \rightarrow \infty$  gegen Null strebt. In der geordneten Phase fällt die Korrelationsfunktion hingegen auf einen endlichen Wert ab, der durch das Produkt des Erwartungswertes der Untergittermagnetisierung gegeben ist. In Abbildung 5.26 (a) ist der Betrag der longitudinalen Korrelationsfunktion  $|\langle \mathbf{S}_0^z \mathbf{S}_r^z \rangle|$  in Abhängigkeit des Abstandes  $r$  für die Parameterwerte  $B^2 = 2$ ,  $C_1^2 = 1$ ,  $C_2 = 0.5$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_2 = 2$  mit  $A^2 = 3.0$  entsprechend Tafel (I) und  $A^2 = 4.3$  entsprechend der Tafel (II) dargestellt. Die eingezeichneten Fitkurven genügen der Form:  $\langle \mathbf{S}_0^z \mathbf{S}_r^z \rangle = \langle \mathbf{S}_0^z \rangle \langle \mathbf{S}_r^z \rangle + 3.40(-1)^r e^{-r/2.0}$ , mit  $|\langle \mathbf{S}_r^z \rangle| = 0$  für  $A^2 = 3.0$  und  $\langle \mathbf{S}_0^z \mathbf{S}_r^z \rangle = \langle \mathbf{S}_0^z \rangle \langle \mathbf{S}_r^z \rangle + 3.05(-1)^r e^{-r/2.3}$ , mit  $|\langle \mathbf{S}_r^z \rangle| = 1.92$  für  $A^2 = 4.3$ . Damit ergeben sich die Korrelationslängen zu  $\xi_\ell(A^2 = 3) = 2.0$  und  $\xi_\ell(A^2 = 4.3) = 2.3$ . Dies ist durchaus eine typische Größenordnung dieser Modellklasse, entfernt vom kritischen Punkt. Zum Beispiel haben AKLT die Korrelationslänge des in [Affleck u. a. 1988] angegebenen VBS-Modells auf dem Hexagonalgitter mit einer oberen Schranke von  $\xi_1 = 3.54\dots$  benannt.

In der Nähe des kritischen Punktes  $A^2 \rightarrow A_c^2$  divergiert die Korrelationslänge  $\xi_\ell \rightarrow \infty$ . Dies ist in Abschnitt 4.3.1 Gleichung (4.21) Janke, W. in der Theorie des Finite-size-scaling



(a) Korrelationsfunktion für  $A^2 = 3.0$  (Schaukasten I) und für  $A^2 = 4.3$  (Schaukasten II). Man erkennt exponentielles Abklingen.

(b) Für  $A^2 = 4$  wird die Korrelationsfunktion kritisch und fällt mit  $1/\sqrt{r}$  ab.

Abbildung 5.26.: Die longitudinale Korrelationsfunktion für die Parameterwerte  $B^2 = 2$ ,  $C_1^2 = 1$ ,  $C_2 = 0.5$ ,  $D_1 = 1$ ,  $D_2 = 2$  gegen den Abstand  $r$ . Die Simulationen wurden wieder bei einer Gittergröße von  $48 \times 48$  Gitterplätzen vorgenommen.

genauer dargestellt. Die resultierende Korrelationsfunktion verhält sich an diesem Punkt wie:

$$\langle \mathbf{S}_0^z \mathbf{S}_r^z \rangle \propto \frac{1}{r^\eta}, \quad \text{mit dem kritischen Exponenten } \eta. \quad (5.34)$$

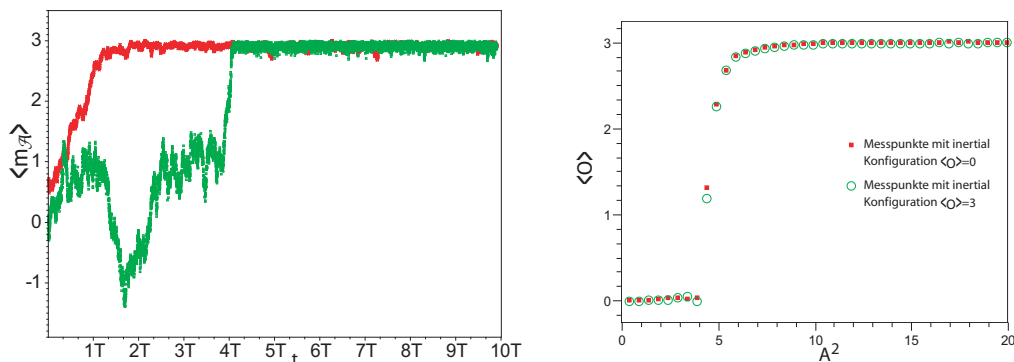
Die Abbildung 5.26 (b) zeigt die gemessene Korrelationsfunktion genau am kritischen Punkt und eine Fitkurve der Form

$$f_{crit}(r) = \text{const.} \left( \frac{1}{\sqrt{r}} + \frac{1}{\sqrt{48-r}} \right), \quad (5.35)$$

womit ich den kritischen Exponenten zu  $\eta = \frac{1}{2}$  bestimmen konnte. Da die Simulation auf einem endlichen Gitter stattgefunden hat, muss der zweite Term in Gleichung (5.35) eingeführt werden. Dieser stellt eine Korrektur erster Ordnung in Hinblick auf die periodischen Randbedingungen dar.

Bei Phasenübergängen erster Ordnung spielt der Anfangszustand eines Monte-Carlo-Laufs eine entscheidende Rolle (siehe Abschnitt 4.3.2: Hysteresemessungen). Auch für Phasenübergänge zweiter Ordnung oder ganz generell zur Identifikation einer Phase spielt der Anfangszustand ( $\hat{=}$  Target-Zustand) insofern eine Rolle, als dass man die Laufzeiten einer Monte-Carlo-Simulation erheblich verkürzen kann, wählt man den richtigen Target-Zustand aus. In Abbildung 5.27 (a) ist ein Lauf für einen Néel-artig geordneten Target-Zustand

(grün) und einen Target-Zustand mit Eigenzuständen  $\propto |0\rangle$  auf jedem Gitterplatz (rot) gezeigt. Da die Anfangswerte beide Male so gewählt sind, dass das System zu einem Néel-artigen Zustand tendiert, wird im ersten Fall das Gleichgewicht deutlich früher erreicht als im zweiten Fall. Die durch den Anfangszustand vorgegebene Untergittermagnetisierung (der Symmetriebruch ist also schon vorgegeben) ist dabei der entscheidende Beitrag. Im Fall des ungeordneten Anfangszustandes muss sich das System erst noch für eine der beiden Möglichkeiten entscheiden. Dies sieht man daran, dass die Untergittermagnetisierung während des Laufs zwischenzeitlich negative Werte annimmt.



(a) Der Ordnungsparameter  $\langle \mathbf{O} \rangle$  in einer Monte-Carlo-Simulation als Funktion der Monte-Carlo Zeit  $t$ . Bei  $A^2 = 7, B^2 = C_1^2 = C_2^2 = D_1^2 = D_2^2 = 1$ . Anzahl der Loops zwischen zwei Messpunkten 1000, Gittergröße  $48 \times 48$

(b) Der Ordnungsparameter entlang des Phasenübergangs für äquilibrierte Monte-Carlo-Läufe. Messung bei  $B^2 = C_1^2 = C_2^2 = D_1^2 = D_2^2 = 1$

Abbildung 5.27.: Bis sich eine Monte-Carlo-Simulation äquilibriert, dauert es, je nach Target-Zustand, unterschiedlich lange. Der erreichte Mittelwert ist aber in beiden Fällen derselbe. (grün): geordneter Target-Zustand, (rot): ungeordneter Target-Zustand

In beiden Fällen erreicht man aber nach genügend langer Zeit die gleichen Gleichgewichtswerte, wie sie in Abbildung 5.27 (b) für den gesamten Bereich des Phasenübergangs dargestellt sind.

### Zusammenfassung der Ergebnisse

Das hier untersuchte zweidimensionale Vertex-Zustands-Modell auf dem Hexagonalgitter zeigte bei der Konstruktion die Besonderheit, dass je nach Interpretation drei Zustandsvariable pro Bond und Richtung oder zwei Bonds pro Richtung mit zwei Variablen auftraten. Beide Konstruktionen sind äquivalent und führen zu einem, auf dem endlichen Gitter und bei periodischen Randbedingungen, eindeutigen Grundzustand. Der globale Grundzustand

wird von fünf relevanten Parametern  $A/D_2$ ,  $B/D_2$ ,  $C_1/D_2$ ,  $C_2/D_2$ ,  $D_1/D_2$  und dem diskreten  $\sigma = \pm 1$  gesteuert und zeigt, in Abhängigkeit dieser Parameter in den Monte-Carlo-Simulationen einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Den kritischen Exponenten  $\beta$  konnte ich im Rahmen der Genauigkeit zu  $\beta = \frac{1}{8}$  bestimmen. Er ist für alle untersuchten kritischen Punkte des Modells identisch. In der ungeordneten Phase ist der Grundzustand einfach, in der geordneten Phase ist er zweifach entartet. Die longitudinalen Korrelationsfunktionen zeigen in der ungeordneten Phase einen exponentiell abfallenden Verlauf auf Null, in der geordneten Phase einen auf einen endlichen Wert. Am Phasenübergang wird das Modell kritisch und die Korrelationsfunktion fällt mit dem Exponenten  $\eta = \frac{1}{2}$  algebraisch auf Null ab. Dieser Exponent entspricht wieder gerade dem Doppelten des Ising-Exponenten  $\eta_{\text{Ising}} = \frac{1}{4}$  und ist so im Einklang mit der in Kapitel 5.1 gegebenen Interpretation.

Ein isotroper Punkt konnte im Parameterraum bestimmt werden. An diesem Punkt stimmt der Grundzustand mit dem des entsprechenden AKLT-Modells überein. Der Hamilton-Operator lässt sich an diesem Punkt in Spin-Darstellung angeben. Die lokalen Hamiltonian stellen an diesem Punkt Projektionsoperatoren auf den Zwei-Spin-Unterraum mit Spin  $S = 6$  und  $S = 5$  dar.

### 5.2.3. Spin-3 auf dem Dreiecksgitter

Ein weiteres zweidimensionales Vertex-Zustands-Modell für Spin-3 lässt sich auf einem Dreiecksgitter konstruieren. Bei diesem Gitter stimmt die Koordinationszahl  $z = 6$  für Spin-3 wieder mit dem Doppelten der Spingröße überein. Aus diesem Grund kann die gleiche Regel für das Aussummieren wie in den Abschnitten 5.1 und 5.2.1 angewendet werden. Anders als bei den bislang untersuchten Modellen lässt sich das Dreiecksgitter nicht in zwei bipartite Untergitter aufteilen. Es ist aber möglich, das Gitter in drei disjunkte Untergitter zu zerlegen. Jeder Gitterplatz aus einem Untergitter soll nur nächste Nachbarn in den beiden anderen Untergittern besitzen, wie es in der Abbildung 5.28(b) dargestellt ist. Die drei Untergitter sind hier mit den Farben rot, grün und blau gekennzeichnet.

#### Konstruktion des Grundzustandes

Für das hier betrachtete Modell von Spin-3 auf dem Dreiecksgitter gelten die allgemeinen lokalen Hamilton-Operatoren aus Gleichung (5.9) mit den lokalen Zwei-Spin-Zuständen, die in Anhang A angegeben sind.

Auch hier sollen, der Übersichtlichkeit dienend, nicht alle Vertices grafisch dargestellt werden, sondern es soll die Identifikation der Abbildung 5.28 (a) gelten. Mit dieser Zuordnung

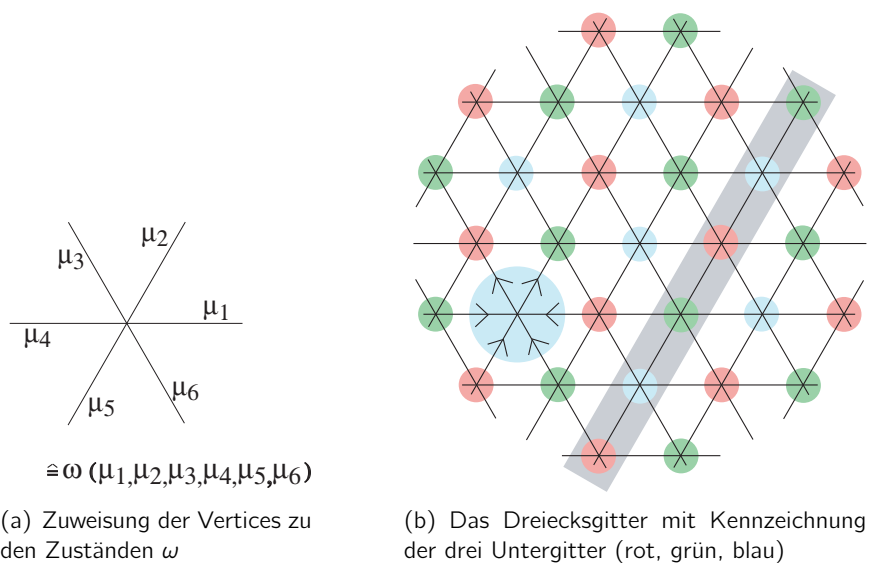


Abbildung 5.28.: Ein typischer Vertex eines Spin 3 auf dem Dreiecksgitter.

ergibt sich dieselbe Zuweisung der Vertices zu den Ein-Spin-Zuständen, wie sie bereits in (5.2) für das Spin-3 Modell auf dem kubischen Gitter vorlag. Da die gleiche Regel für das Aussummieren des inneren Bonds gilt, ergeben sich die gleichen lokalen Zwei-Spin-Zustände wie für das kubische Gitter. Diese wurden bereits in Kapitel 5.2.1 aufgelistet. Ebenso können die Bedingungen, welche der  $\lambda$ -Parameter zu Null gesetzt werden müssen

oder größer Null zu wählen sind, aus dem Abschnitt 5.2.1 übernommen werden. Dies gilt auch für die Bedingungen an die Superpositionsparameter.

Damit wird auch dieses Modell von sieben  $\lambda$ -Parametern, drei kontinuierlichen Parametern  $A, B, C$  und dem diskreten Parameter  $\sigma$  bestimmt. Wieder ist die Energieskala noch frei zu wählen, wohingegen der Energie-Nullpunkt mit  $E_0 = 0$  festgelegt ist.

Auch hier ist es wieder von Bedeutung, kurz etwas über die Wahl der Randbedingungen zu sagen. Dabei zeigt die Abbildung 5.29 (a) eine mögliche Umsetzung der periodischen Randbedingungen beim Dreiecksgitter. Die Gitterpunkte werden adressiert durch die zwei Koordinaten  $x$  und  $y$ . Dabei werden Gitterpunkte auf einem vertikalen Streifen (siehe Abbildung, grauer Streifen) mit jeweils den gleichen  $x$ -Werten identifiziert. In  $y$ -Richtung wird wie gewohnt durchnummeriert.

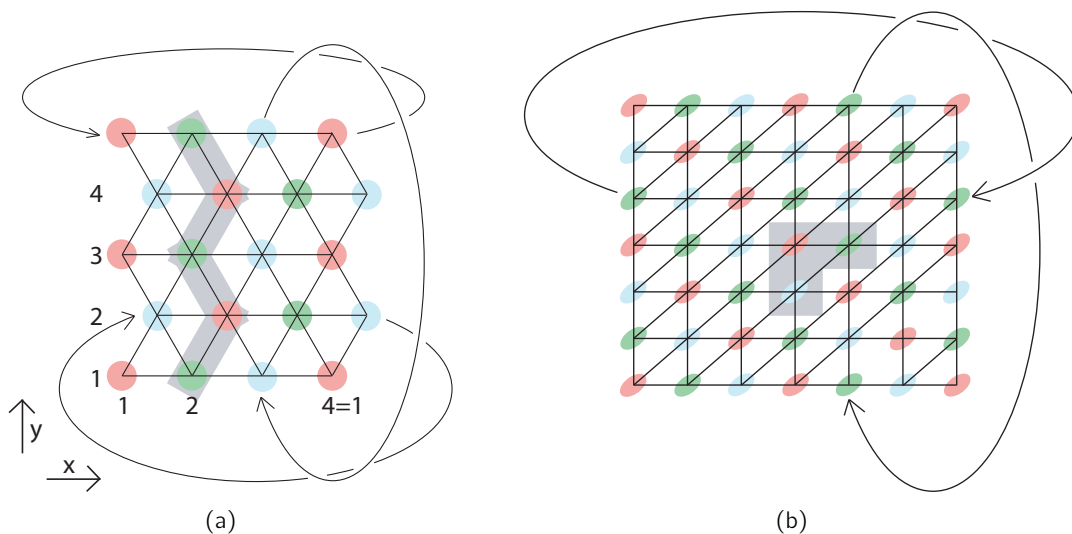


Abbildung 5.29.: Zur Wahl der periodischen Randbedingungen beim Dreiecksgitter.

Es zeigt sich, dass es bei dieser Wahl der Randbedingungen wichtig ist, in den Simulationen Gittergrößen zu betrachten, die in der einen Richtung ( $x$ -Richtung) Vielfache von 3 darstellen, während es in der anderen Richtung ( $y$ -Richtung) notwendig ist, geradzahlige Gittergrößen zu betrachten.

Eine weitere mögliche Wahl periodischer Randbedingungen ist in Abbildung 5.29 (b) dargestellt. Hier wird das Dreiecksgitter in eine Richtung um  $30^\circ$  so geschert, dass die in Abbildung 5.28 (b) grau hinterlegten Gitterpunkte auf einer Parallelen zur  $y$ -Achse übereinander zu liegen kommen. Das entstehende Gitter ist rechteckig mit zusätzlichen Bonds auf den eingezeichneten Diagonalen. Für dieses Gitter werden dann die „üblichen“ periodischen Randbedingungen angewendet (ziehe Zeichnung), wobei man beachten muss, dass die Gittergröße in beiden Richtungen ein Vielfaches von 3 ist.

In einem weiter unten folgenden Abschnitt, werde ich Ergebnisse für beide Randbedingungen vergleichend vorstellen. Es wird sich zeigen, dass kein signifikanter Unterschied in den Ergebnissen der Monte-Carlo-Simulationen auszumachen ist.

### Eigenschaften des Grundzustandes

Der Grundzustand wird, wie bereits erwähnt, von drei kontinuierlichen Parametern  $A, B$  und  $C$  gesteuert. Im Limes  $A \rightarrow \infty$  wird der Grundzustand allerdings *nicht* durch eine Superposition zweier Néel-Zustände dominiert, wie sie in den bereits untersuchten Modellen auftrat:

$$|\Psi_0\rangle \neq |\text{Néel}_{\mathfrak{A}}\rangle + |\text{Néel}_{\mathfrak{B}}\rangle. \quad (5.36)$$

Ein Néel-Zustand lässt sich entsprechend nur auf bipartiten Gittern realisieren.

Dass dies für ein tripartites Gitter nicht funktioniert, erkennt man leicht, wenn man drei Gitterplätze betrachtet, wie sie in Abbildung 5.29 (b) durch den dunkel hinterlegten Bereich hervorgehoben werden. Jeder Gitterplatz stammt aus einem der drei Untergitter. Wählt man nun eines der Untergitter aus, etwa das blaue, um dort Spins  $\propto |3\rangle$  zu platzieren, so ist man gezwungen, auf beide angrenzende Untergitter Spins  $\propto |\bar{3}\rangle$  zu platzieren. Da aber auch das rote an das grüne Untergitter (und umgekehrt) grenzt, wird an dieser Stelle die Néel-Ordnung unterbrochen.

In dem nächsten Abschnitt werde ich die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen vorstellen, die diese Aussage bestätigen.

Wieder ist es möglich, die Parameter so zu wählen, dass der Grundzustand in Form eines VBS-Zustandes geschrieben werden kann, der dann auch Grundzustand des  $SO(3)$ -symmetrischen Hamilton-Operators aus (5.15) ist. Dies gilt für die Parameter  $A = 2\sqrt{5}$ ,  $B = \sqrt{\frac{10}{3}}$ ,  $C = \frac{2}{\sqrt{3}}$ ,  $D = 1$ ,  $\sigma = -1$ , in Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus Kapitel 5.2.1.

### Monte-Carlo-Simulation und Ergebnisse

Wie schon an dem Limes  $A \rightarrow \infty$  zu sehen ist, der nicht zu einem Néel-artigen Zustand führt, wird der bislang verwendete Ordnungsparameter für dieses Modell keinen Phasenübergang messen können. Dieser misst im Wesentlichen die Untergittermagnetisierung auf einer bipartiten Zerlegung des zu Grunde liegenden Gitters. Ein endlicher Wert dieses Ordnungsparameters ist daher nicht zu vermuten. Diese Erwartung konnte ich durch die Monte-Carlo-Simulationen bestätigen.

Es liegt also nahe, einen Ordnungsparameter zu definieren, der im Wesentlichen die Untergittermagnetisierung auf je einem der *drei* Untergitter misst. Folgt man dabei der Identifikation der Gitterplätze mit den Koordinaten  $(x, y)$ , wie sie in Abbildung 5.29 (b) gegeben



ist, so lässt sich der Ordnungsparameter schreiben als:

$$\langle \mathbf{O} \rangle = \left| \left\langle \frac{1}{N} \sum_{\vec{J}} \mathbf{s}^z e^{i\vec{J} \cdot \vec{K}} \right\rangle \right|, \quad (5.37)$$

wobei dieses Mal der Wellenvektor zu  $\vec{K} = \frac{2\pi}{3}(1, 1)$  gewählt werden muss.

In den Simulationen konnte ich zeigen, dass ein Phasenübergang zweiter Ordnung existiert. In der ungeordneten Phase ist der Ordnungsparameter (5.37) dabei Null und in der geordneten Phase steigt er in Abhängigkeit des Parameters  $A^2$  auf einen maximalen Wert von  $\langle \mathbf{O} \rangle (A^2 \rightarrow \infty) = \sqrt{3}$  an, wie es in Abbildung 5.30 zu sehen ist. Im Schaukasten (I) ist dabei der Ordnungsparameter in Abhängigkeit von  $A^2$  für die Parameter  $B^2 = C^2 = D^2 = 1$  zu sehen. Die Simulationen wurden bei einer Gittergröße von  $42 \times 42$  durchgeführt. Der Schaukasten (II) zeigt im logarithmischen Plot die Bestimmung des kritischen Exponenten  $\beta$  zu  $\beta = 0.08 \pm 0.02$  bei einem kritischen Punkt von  $A_c^2 = 120$ ,  $B_c^2 = C_c^2 = D_c^2 = 1$ . Der Schaukasten (III) zeigt die gemessene Untergittermagnetisierung auf den drei Untergittern, die in Abbildung 5.28(b) mit den drei Farben grün, rot und blau gekennzeichnet wurden. Diese Untergittermagnetisierung ist für alle Untergitter in der ungeordneten Phase gleich Null, in der geordneten Phase ist sie für zwei Untergitter endlich, und steigt bis auf einen maximalen Wert von  $\pm 3$  für große Werte  $A^2$  an. Auf dem dritten Untergitter hingegen bleibt sie Null.

Betrachtet man ein antiferromagnetisches Ising-Modell auf dem Dreiecksgitter, so stellt man fest, dass eine Néel-geordnete Phase ausgeschlossen ist. Zwei benachbarte Gitterplätze können mit Spins unterschiedlichen Vorzeichens besetzt werden. Ein dritter Gitterplatz, der an beide angrenzt, muss mit dem gleichen Spin besetzt werden wie einer der beiden anderen Gitterplätze. Dies ist allgemein als Frustration [Toulouse 1977] bekannt. Anders sieht die Situation bei dem 3-Zustands-Potts-Modell aus. Gegeben ist der (klassische) Hamilton-Operator

$$\mathbf{H} = \mathfrak{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad \text{mit } \mathfrak{J} > 0. \quad (5.38)$$

Es können die Spins  $\sigma_i$  die Werte  $\sigma_i = -1, 0, 1$  annehmen, mit  $\delta$  wird das Kronecker-Delta bezeichnet, für das gilt:  $\delta_{x,x} = 1$ , Null sonst.

Bei diesem Modell ist es möglich, zum Beispiel auf dem grünen Untergitter Spins  $\sigma = +1$  und auf dem roten Untergitter  $\sigma = -1$  anzuordnen. Die Wahl  $\sigma = 0$  für Spins auf dem blauen Untergitter führt dann zum Grundzustand. Für hohe Temperaturen ist das System ungeordnet und zeigt für kleine Temperaturen einen Phasenübergang zweiter Ordnung bei  $e^{-\mathfrak{K}} \approx 0.2$ , mit  $\mathfrak{K} = \beta \mathfrak{J}$  [Wu 1982].

Der Grundzustand ist sechsfach entartet. In der geordneten Phase zeigt der Grundzustand des Vertex-Zustands-Modells auch eine sechsfache Entartung. Weiter unten werde ich erklären, wie diese Entartung zustande kommt.

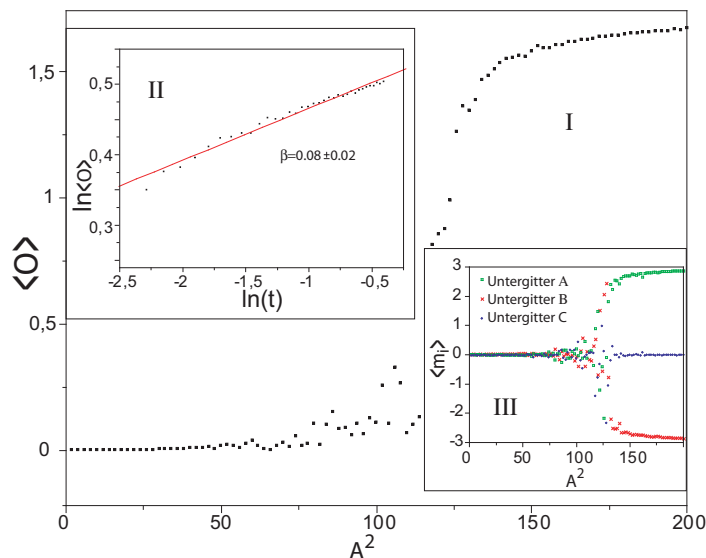


Abbildung 5.30.: Die Abbildung zeigt den Ordnungsparameter in Abhängigkeit des Parameters  $A^2$ . Der kritische Exponent konnte zu  $\beta = 0.08 \pm 0.02$  bestimmt werden (Schaukasten (II)). Der Ordnungsparameter ist im Wesentlichen der Mittelwert der Beträge der Untergittermagnetisierungen (vgl. Schaukasten (I) und (III)).

Auch das hier betrachtete Modell besitzt mehr als nur zwei Einstellmöglichkeiten für die Spins. So ist es möglich, auf einem Untergitter Spins mit  $S^z$ -Eigenwert  $+3$  zu setzen, auf dem nächsten Spins mit Eigenwert  $-3$  und auf dem dritten Untergitter Spins, die unter Umständen den Eigenwert  $0$  besitzen. Für  $A^2 \rightarrow \infty$  liegt in der symmetriegebrochenen Phase eine solche Ordnung vor.

Es ist nicht notwendig, dass auf dem Untergitter, das im Mittel verschwindende Magnetisierung besitzt, nur Zustände  $\propto |0\rangle$  vorherrschen.

Der Phasenübergang führt den einfachen Grundzustand der ungeordneten Phase hin zu einer sechsfachen Entartung. Dies ist einfach zu verstehen. Platziert man auf dem einen Untergitter einen Spin  $\propto |3\rangle$ , so hat man dafür drei Möglichkeiten, entsprechend der drei Untergitter. Um den Spin  $\propto |\bar{3}\rangle$  zu platzieren, verbleiben weitere zwei Möglichkeiten. Damit bestehen insgesamt sechs Möglichkeiten, einen geordneten Zustand zu erzeugen. Die sechsfache Entartung erklärt auch den relativ hohen Wert des kritischen Parameters  $A_c^2$ , der im Vergleich zu den anderen untersuchten Modellen (Abschnitte 5.1, 5.2.2, 5.2.1) um circa eine Größenordnung höher liegt (bei ähnlicher Wahl der anderen Parameter). Jeder der sechs symmetriegebrochenen Zustände wird mit einer Wahrscheinlichkeit  $1/6$  realisiert, im Gegensatz zu einer zweifachen Entartung, bei der nur zwischen zwei Zuständen gewählt werden muss. Der hier beschriebene Phasenübergang geht einher mit einem  $Z_3 \times Z_2$ -

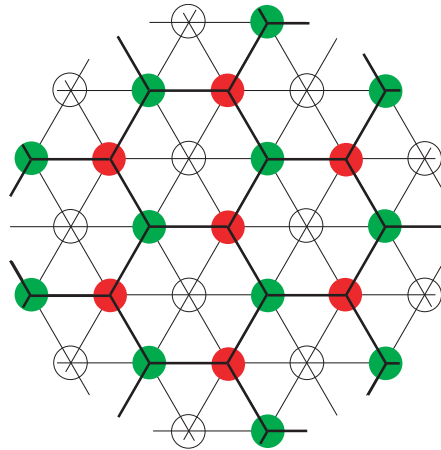


Abbildung 5.31.: Die rote Farbe soll Spins  $\propto |\bar{3}\rangle$  darstellen, die grüne Spins  $\propto |3\rangle$ . Die farblosen Kreise sind Spins  $\propto |m \leq 2\rangle$  mit einem maximalen  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwert  $m = 2$ . Es bestehen drei Möglichkeiten, das dick eingezeichnete Hexagonalgitter über das Dreiecksgitter zu legen. Dann bestehen zwei Möglichkeiten die Spins  $\propto |3\rangle$  und  $\propto |\bar{3}\rangle$  so auf dem Hexagonalgitter zuzuordnen, dass eine Néel-artige Ordnung vorherrscht. Dies führt zu einer sechsfachen Entartung des Grundzustandes, einhergehend mit dem Bruch der  $Z_3 \times Z_2$ -Symmetrie.

Symmetriebruch.

Um den ungewöhnlichen kritischen Parameter  $\beta = 0.08$  mit einer weiteren Methode zu verifizieren, habe ich auch hier eine Finite-size-Analyse durchgeführt. Die Simulationsdaten sind in Abbildung 5.32 dargestellt. Wie bereits oben erwähnt müssen die Linearabmessungen des Gitters immer Vielfache von Drei sein. Vergrößert man das Gitter in beiden Dimensionen bei jedem Schritt um Drei, so wächst die Anzahl der Gitterplätze sehr schnell an. Da für große Gitter die Effekte relativ schwer aufzulösen sind, habe ich mich also entschieden, bei jedem Schritt nur eine Dimension zu vergrößern, im nächsten dann die andere und so fort. Die gezeigten Daten sind also Daten für die Gittergrößen  $G_1 = 3 \times 3 = 9$ ,  $G_1 = 3 \times 6 = 18$ ,  $G_1 = 6 \times 6 = 36$ ,  $G_1 = 6 \times 9 = 54$  und so weiter. In das Finite-size-scaling darf aber nur die Linearabmessung einfließen. Für ein nicht quadratisches Gitter nehme ich als Linearabmessung die Wurzel aus dem Produkt der Kantenlängen, also in obigen Beispiel  $L_1 = 3$ ,  $L_2 \approx 4.24$ ,  $L_3 = 6$ ,  $L_4 \approx 7.35$  und so weiter.

Auf der Tafel (I) erkennt man gut das Aufeinanderfallen der Kurven für unterschiedliche Gittergrößen bei der Wahl des kritischen Exponenten  $\beta = 0.065 \pm 0.005$  und  $\nu = 2.0 \pm 0.2$  für einen kritischen Punkt bei  $A^2 = 120$ . Die Tafel (II) zeigt den Ordnungsparameter für die unterschiedlichen Gittergrößen in Abhängigkeit des Parameters  $A^2$ . Damit konnte neben dem kritischen Exponenten  $\beta$ , der innerhalb der Fehlergrenzen mit dem zuvor gefundenen

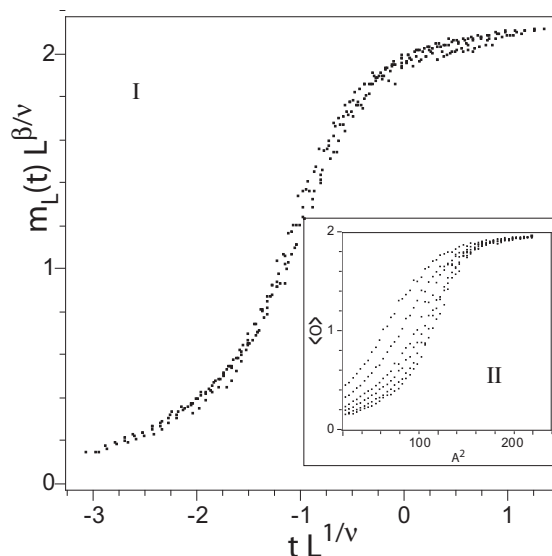


Abbildung 5.32.: Durch die Finite-size-Analyse lassen sich die kritischen Exponenten zu  $\beta = 0.065 \pm 0.005$  und  $\nu = 2.0 \pm 0.2$  und der kritische Punkt zu  $A_c^2 = 120$  bestimmen.

übereinstimmt, auch der kritische Exponent  $\nu = 2.0 \pm 0.2$  gefunden werden.

Wie bereits oben erwähnt, gibt es auch bei diesem Gitter unterschiedliche Weisen das Gitter periodisch zu schließen. Um festzustellen, ob die Wahl der periodischen Randbedingungen einen Einfluss auf die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen hat, habe ich beide vorgestellten Möglichkeiten miteinander verglichen und konnte feststellen, dass die Randbedingungen keinen Einfluss auf die Ergebnisse haben.

Den hier betrachteten Ordnungsparameter habe ich sowohl für die in Abbildung 5.29 (a) vorgestellten Randbedingungen untersucht, als auch für die im Teil (b) derselben Abbildung. In Abbildung 5.33 ist nochmals der gemessene Ordnungsparameter in Abhängigkeit von  $A^2$  für die Werte  $B^2 = C^2 = D^2 = 1$  geplottet. Dabei beziehen sich die grünen Kreise auf die in Abbildung 5.29 (a) aufgeführten Randbedingungen (PRB1) und die roten Kreuze auf die zweite Wahl der Randbedingungen (PRB2). Man erkennt die gute Übereinstimmung, die sich auch im Schaukasten (II) in einer Darstellung korrelierter Daten zeigt. Hier wurde zu gleichen Werten  $A^2$  je ein Monte-Carlo-Lauf mit entsprechenden Randbedingungen miteinander verglichen. Die mittlere Abweichung liegt nur bei  $\delta = -0.0003$  (rote, durchgezogene Linie) und der Standardfehler bei  $\sigma = 0.006$  (rote, gestrichelte Linien). Ähnliche Werte erhält man, wenn man je zwei Monte-Carlo-Läufe für gleiche Werte von  $A^2$  mit denselben Randbedingungen untersucht. Die größeren Abweichungen im mittleren Bereich spiegeln dabei die bekannten Slowing-down-Effekte in der Nähe des kritischen Punktes wider. Es ist also festzuhalten, dass die Wahl der Randbedingungen keinen signifikanten Einfluss auf die

Messergebnisse hat.

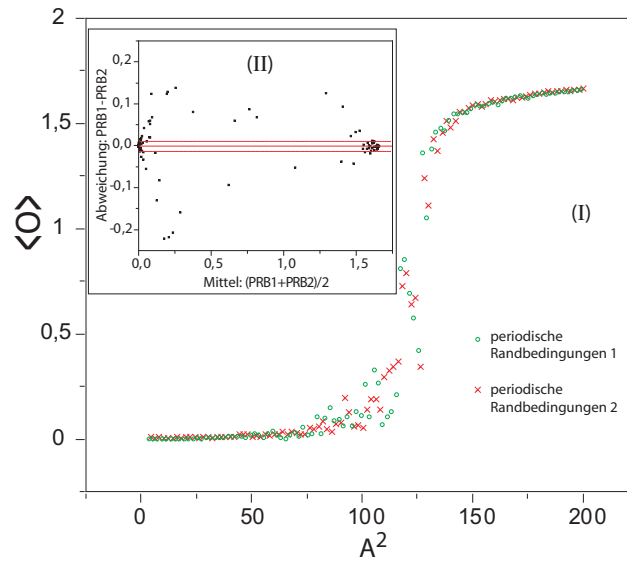


Abbildung 5.33.: Für unterschiedliche Randbedingungen wurde der Ordnungsparameter simuliert. Schaukasten (II) zeigt die Korrelation der Messwerte untereinander. Es ist keine Abhängigkeit der Ergebnisse von den Randbedingungen zu erkennen.

### Korrelationsfunktionen

Im Gegensatz zu den longitudinalen Korrelationsfunktionen  $\langle \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_r^z \rangle$  der anderen Modelle, die stets ein streng alternierendes Verhalten zeigen, ist dies bei diesem Modell in keiner der beiden Phasen nachzuweisen. Dies stimmt mit der Überlegung, dass keine Néel-Ordnung vorliegt, überein. Betrachtet man die Korrelationsfunktion auf einem Untergitter als Funktion des Abstands  $r = 3n$  mit  $n \in \mathbb{N}$ , so ist ein exponentielles Abklingen zu beobachten. In der ungeordneten Phase klingt die longitudinale Korrelationsfunktion exponentiell auf Null ab, in der geordneten Phase auf einen festen Wert, der gerade dem Quadrat der Untergittermagnetisierung entspricht.

Am kritischen Punkt selber fällt die Korrelationsfunktion aufgetragen gegen den Abstand algebraisch ab. In Abbildung 5.34 sind für eine Gittergröße von  $42 \times 42$  Gitterplätzen die longitudinalen Korrelationsfunktionen abgebildet.

Die blauen Messpunkte stellen eine Messreihe für die Parameter  $A^2 = 100, B^2 = C^2 = D^2 = 1$  in der ungeordneten Phase dar. Die Werte wurden mit der Funktion  $f(r) = c_l (e^{-r/\xi_l} + e^{-(42-r)/\xi_l})$  gefittet. Die Korrelationslänge konnte zu  $\xi_l = 3.2 \pm 0.2$  bestimmt werden,  $c_l$  wurde als Fitparameter verwendet.

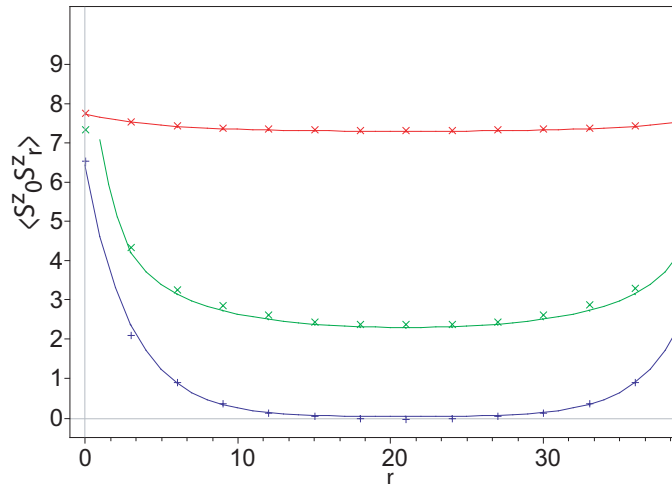


Abbildung 5.34.: Die longitudinale Korrelationsfunktion auf einem Untergitter für unterschiedliche Werte von  $A^2$  und  $B^2 = C^2 = D^2 = 1$ . (rot): geordnete Phase  $A^2 = 160$ , (grün): am kritischen Punkt  $A^2 = 120$ , (blau): ungeordnete Phase  $A^2 = 100$ . Die Gittergröße von  $42 \times 42$  bedingt, dass die Korrelationsfunktionen für große  $r$  wieder ansteigt.

In der geordneten Phase konnte ich für die roten Messpunkte die Funktion  $f(r) = a_l + c_l (e^{-r/\xi_l} + e^{-(42-r)/\xi_l})$  mit einer Korrelationslänge von  $\xi_l = 5.0 \pm 0.2$  für die Parameter  $A^2 = 160, B^2 = C^2 = D^2 = 1$  fiten. Da in der geordneten Phase eine endliche Untergittermagnetisierung vorhanden ist, tritt neben dem Fitparameter  $c_l$  noch ein zweiter Parameter  $a_c$  hinzu, der gerade dem Quadrat der Untergittermagnetisierung entspricht.

Am kritischen Punkt  $A^2 = 120, B^2 = C^2 = D^2 = 1$  zerfällt die longitudinale Korrelationsfunktion auf einem Untergitter algebraisch, und ich konnte die Funktion  $f(r) = c_l \left( \frac{1}{r^\eta} + \frac{1}{(42-r)^\eta} \right)$  mit  $\eta = 0.56 \pm 0.02$  an die Messergebnisse fiten.

Die longitudinale Korrelationsfunktion für Gitterplätze unterschiedlicher Untergitter zeigt kein einheitliches Verhalten (siehe Abbildung 5.35). In der Abbildung zeigt der grau hinterlegte Verlauf die longitudinale Korrelationsfunktion für beliebige Abstände  $r$ . Die blaue Verbindungslinie entspricht gerade der Korrelationsfunktion aus Abbildung 5.34, die dort für die ungeordnete Phase ein exponentielles Abklingen zeigt. Bezeichnet man einen Gitterpunkt auf dem blauen Untergitter mit  $r = 0$ , so stellen rote Punkte in der Abbildung die Korrelation dieses Ausgangspunktes mit einem Punkt des roten Untergitters dar  $r = 3n+1$ , und grüne, die mit einem Punkt aus dem grünen Untergitter  $r = 3n+2$ ,  $n \in \mathbb{N}$ .

Für kleine Abstände  $r$  fällt auf, dass die Korrelation zwischen einem Punkt aus dem einen Untergitter und einem aus einem anderen Untergitter stets negativ ist, was für eine antiferromagnetische Ordnung spricht. Für größere Abstände  $r \geq 11$  ist die Korrelationsfunktion für „grüne“ Abstände positiv.

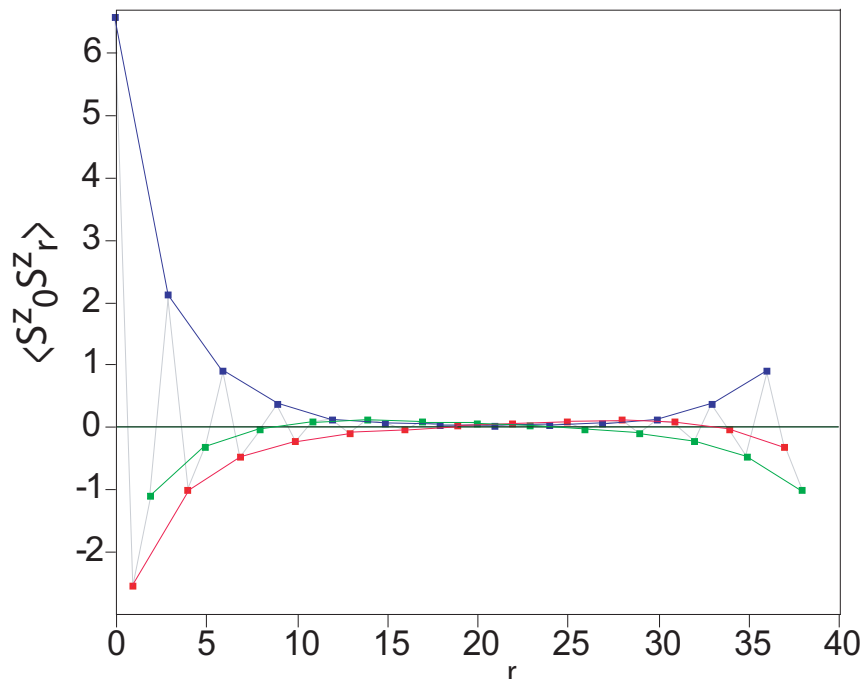


Abbildung 5.35.: Die longitudinale Korrelationsfunktion für  $A^2 = 100, B^2 = C^2 = D^2 = 1$ . Die blauen Punkte zeigen Abstände  $r = 3n$  auf demselben Untergitter, die roten zeigen Abstände  $r = 3n + 1$  und die grünen Abstände  $r = 3n + 2$  an, mit  $n \in \mathbb{N}$ . Die Gittergröße beträgt 42. Das Ansteigen der Korrelation für große Abstände  $r$  ist auf den periodischen Schluss des Gitters zurückzuführen.

Da das Gitter eine endliche Ausdehnung hat, stimmen die grünen Messpunkte gespiegelt an der halben Gittergröße mit den roten überein. Bei einer endlichen Gittergröße (hier einer Linearabmessung von  $L = 42$ ) entspricht der Gitterplatz  $L - 1 = 3n_{L-1} + 2$ , mit  $n_{L-1} = \frac{L}{3} - 1$ , gerade dem Gitterplatz  $1 = 3n_1 + 1$ , mit  $n_0 = 0$ .

### Zusammenfassung der Ergebnisse

Für Spin-3-Teilchen auf dem Dreiecksgitter entspricht die Konstruktion des Grundzustandes der des Spin-3 auf dem kubischen Gitter (Kapitel 5.2.1). So stimmen auch die Anzahl der Parameter für dieses Modell (10 kontinuierliche und ein diskreter Parameter) und die Anzahl der in den Grundzustand einfließenden Parameter (drei relevante kontinuierliche  $A/D, B/D, C/D$ , und ein diskreter) überein.

Ebenso ist ein isotroper Punkt im Parameterraum enthalten, an dem der Grundzustand mit dem des VBS-Modells übereinstimmt.

Von dem Parameter  $A^2$  getrieben kann ein Quantenphasenübergang in dem Modell beobachtet werden, der zweiter Ordnung ist. Der Phasenübergang verläuft von einem einfachen Grundzustand hin zu einem sechsfach entarteten Grundzustand. Diese Entartung der symmetriegebrochenen Phase erklärt das Auftreten des Phasenübergangs für hohe Werte von  $A^2$ , die im Vergleich zu den anderen Modellen um circa eine Größenordnung höher liegen.

Betrachtet man den dunkelhinterlegten Bereich in Abbildung 5.29(b), so stellt dieser in der symmetriegebrochenen Phase die neue Einheitszelle dar. Im Limes großer  $A$  ist anhand der Monte-Carlo-Simulationen zu sehen, dass der Grundzustand dadurch geprägt ist, dass auf einem Untergitter Spins  $\propto |3\rangle$  vorherrschen, auf einem anderen Spins  $\propto |\bar{3}\rangle$  und auf dem letzten Untergitter sich zumindest die  $S^z$ -Eigenwerte zu Null mitteln. Im Limes  $A \rightarrow \infty$  bedeutet dies aber auch, dass sich auf diesem Untergitter keine Spins  $\propto |3\rangle$  oder  $\propto |\bar{3}\rangle$  befinden können, da sich ja bereits auf einem der benachbarten Untergittern Spins mit gleicher maximaler  $S^z$ -Komponente befinden. Dies ist aufgrund der Konstruktion ausgeschlossen.

Bei dem Phasenübergang für die Parameter  $B^2 = C^2 = D^2 = 1$  konnte ich die kritischen Exponenten  $\beta = 0.07 \pm 0.02$  und  $\nu = 2.0 \pm 0.2$  ermitteln und den kritischen Punkt zu  $A_c^2 = 120$  bestimmen.



$\omega(1, 1, 1, 1, 1, 1)$	$A  3\rangle$	$\omega(-1, -1, -1, -1, -1, -1)$	$A  \bar{3}\rangle$
$\omega(-1, 1, 1, 1, 1, 1)$	$B  2\rangle$	$\omega(1, -1, -1, -1, -1, -1)$	$\sigma B  \bar{2}\rangle$
$\omega(1, -1, 1, 1, 1, 1)$	$\sigma B  2\rangle$	$\omega(-1, 1, -1, -1, -1, -1)$	$B  \bar{2}\rangle$
$\omega(1, 1, -1, 1, 1, 1)$	$B  2\rangle$	$\omega(-1, -1, 1, -1, -1, -1)$	$\sigma B  \bar{2}\rangle$
$\omega(1, 1, 1, -1, 1, 1)$	$\sigma B  2\rangle$	$\omega(-1, -1, -1, 1, -1, -1)$	$B  \bar{2}\rangle$
$\omega(1, 1, 1, 1, -1, 1)$	$B  2\rangle$	$\omega(-1, -1, -1, -1, 1, -1)$	$\sigma B  \bar{2}\rangle$
$\omega(1, 1, 1, 1, 1, -1)$	$\sigma B  2\rangle$	$\omega(-1, -1, -1, -1, -1, 1)$	$B  \bar{2}\rangle$
$\omega(-1, -1, 1, 1, 1, 1)$	$C  1\rangle$	$\omega(1, 1, -1, -1, -1, -1)$	$C  \bar{1}\rangle$
$\omega(-1, 1, -1, 1, 1, 1)$	$\sigma C  1\rangle$	$\omega(1, -1, 1, -1, -1, -1)$	$\sigma C  \bar{1}\rangle$
$\omega(-1, 1, 1, -1, 1, 1)$	$C  1\rangle$	$\omega(1, -1, -1, 1, -1, -1)$	$C  \bar{1}\rangle$
$\omega(-1, 1, 1, 1, -1, 1)$	$\sigma C  1\rangle$	$\omega(1, -1, -1, -1, 1, -1)$	$C  \bar{1}\rangle$
$\omega(-1, 1, 1, 1, 1, -1)$	$C  1\rangle$	$\omega(1, -1, -1, -1, -1, 1)$	$\sigma C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, -1, -1, 1, 1, 1)$	$C  1\rangle$	$\omega(-1, 1, 1, -1, -1, -1)$	$C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, -1, 1, -1, 1, 1)$	$\sigma C  1\rangle$	$\omega(-1, 1, -1, 1, -1, -1)$	$\sigma C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, -1, 1, 1, -1, 1)$	$C  1\rangle$	$\omega(-1, 1, -1, -1, 1, -1)$	$C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, -1, 1, 1, 1, -1)$	$\sigma C  1\rangle$	$\omega(-1, 1, -1, -1, -1, 1)$	$\sigma C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, 1, -1, -1, 1, 1)$	$C  1\rangle$	$\omega(-1, -1, 1, 1, -1, -1)$	$C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, 1, -1, 1, -1, 1)$	$\sigma C  1\rangle$	$\omega(-1, -1, 1, -1, 1, -1)$	$C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, 1, -1, 1, 1, -1)$	$C  1\rangle$	$\omega(-1, -1, 1, -1, -1, 1)$	$\sigma C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, 1, 1, -1, -1, 1)$	$C  1\rangle$	$\omega(-1, -1, -1, 1, 1, -1)$	$C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, 1, 1, -1, 1, -1)$	$\sigma C  1\rangle$	$\omega(-1, -1, -1, 1, -1, 1)$	$\sigma C  \bar{1}\rangle$
$\omega(1, 1, 1, 1, -1, -1)$	$C  1\rangle$	$\omega(-1, -1, -1, -1, 1, 1)$	$C  \bar{1}\rangle$
$\omega(-1, -1, -1, 1, 1, 1)$	$D  0\rangle$	$\omega(1, 1, 1, -1, -1, -1)$	$\sigma D  0\rangle$
$\omega(-1, -1, 1, -1, 1, 1)$	$\sigma D  0\rangle$	$\omega(1, 1, -1, 1, -1, -1)$	$D  0\rangle$
$\omega(-1, -1, 1, 1, -1, 1)$	$D  0\rangle$	$\omega(1, -1, 1, 1, -1, -1)$	$\sigma D  0\rangle$
$\omega(-1, -1, 1, 1, 1, -1)$	$\sigma D  0\rangle$	$\omega(-1, 1, 1, 1, -1, -1)$	$D  0\rangle$
$\omega(-1, 1, -1, -1, 1, 1)$	$D  0\rangle$	$\omega(1, 1, -1, -1, 1, -1)$	$\sigma D  0\rangle$
$\omega(-1, 1, -1, 1, -1, 1)$	$\sigma D  0\rangle$	$\omega(1, -1, 1, -1, 1, -1)$	$D  0\rangle$
$\omega(-1, 1, -1, 1, 1, -1)$	$D  0\rangle$	$\omega(-1, 1, 1, -1, 1, -1)$	$\sigma D  0\rangle$
$\omega(1, -1, -1, -1, 1, 1)$	$\sigma D  0\rangle$	$\omega(1, 1, -1, -1, -1, 1)$	$D  0\rangle$
$\omega(1, -1, -1, 1, -1, 1)$	$D  0\rangle$	$\omega(1, -1, 1, -1, -1, 1)$	$\sigma D  0\rangle$
$\omega(1, -1, -1, 1, 1, -1)$	$\sigma D  0\rangle$	$\omega(-1, 1, 1, -1, -1, 1)$	$D  0\rangle$

Tabelle 5.2.: Zuordnung der Vertices zu den Ein-Spin-Zuständen

$\eta_{\mathfrak{A}}(1 1 1)$	$A 3\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(-1 -1 -1)$	$A \bar{3}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(0 1 1)$	$B 2\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(0 -1 -1)$	$B \bar{2}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(1 0 1)$	$B 2\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(-1 0 -1)$	$B \bar{2}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(1 1 0)$	$B 2\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(-1 -1 0)$	$B \bar{2}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(-1 1 1)$	$C_2 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(1 -1 -1)$	$C_2 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(1 -1 1)$	$C_2 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(-1 1 -1)$	$C_2 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(1 1 -1)$	$C_2 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(-1 -1 1)$	$C_2 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(0 0 1)$	$C_1 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(0 0 -1)$	$C_1 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(0 1 0)$	$C_1 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(0 -1 0)$	$C_1 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(1 0 0)$	$C_1 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(-1 0 0)$	$C_1 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(0 -1 1)$	$D_1 0\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(0 1 -1)$	$D_1 0\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(-1 0 1)$	$D_1 0\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(1 0 -1)$	$D_1 0\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(-1 1 0)$	$D_1 0\rangle$	$\eta_{\mathfrak{A}}(1 -1 0)$	$D_1 0\rangle$
$\eta_{\mathfrak{A}}(0 0 0)$	$D_2 0\rangle$		

Tabelle 5.4.: Zuordnung der Vertices zu den Ein-Spin-Zuständen auf dem Untergitter  $\mathfrak{A}$

$\eta_{\mathfrak{B}}(1 1 1)$	$A 3\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(-1 -1 -1)$	$A \bar{3}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(0 1 1)$	$\sigma B 2\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(0 -1 -1)$	$\sigma B \bar{2}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(1 0 1)$	$\sigma B 2\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(-1 0 -1)$	$\sigma B \bar{2}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(1 1 0)$	$\sigma B 2\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(-1 -1 0)$	$\sigma B \bar{2}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(-1 1 1)$	$C_2 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(1 -1 -1)$	$C_2 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(1 -1 1)$	$C_2 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(-1 1 -1)$	$C_2 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(1 1 -1)$	$C_2 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(-1 -1 1)$	$C_2 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(0 0 1)$	$C_1 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(0 0 -1)$	$C_1 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(0 1 0)$	$C_1 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(0 -1 0)$	$C_1 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(1 0 0)$	$C_1 1\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(-1 0 0)$	$C_1 \bar{1}\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(0 -1 1)$	$\sigma D_1 0\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(0 1 -1)$	$\sigma D_1 0\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(-1 0 1)$	$\sigma D_1 0\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(1 0 -1)$	$\sigma D_1 0\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(-1 1 0)$	$\sigma D_1 0\rangle$	$\eta_{\mathfrak{B}}(1 -1 0)$	$\sigma D_1 0\rangle$
$\eta_{\mathfrak{B}}(0 0 0)$	$D_2 0\rangle$		

Tabelle 5.5.: Zuordnung der Vertices zu den Ein-Spin-Zuständen auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$

## 5.3. Spin-2 Modelle

### 5.3.1. Spin-2 auf dem Hexagonalgitter: der schwache Anti-Ferromagnet

In Kapitel 5.2.2 wurde ein Vertex-Zustands-Modell mit Spins der Größe  $S = 3$  auf dem Hexagonalgitter konstruiert und untersucht.

Die Frage liegt nahe, ob sich auch Spins anderer Größe, etwa Spin- $\frac{3}{2}$  oder Spin-2, auf derselben Topologie eignen, um Vertex-Zustands-Modelle zu konstruieren. Wir haben in Kapitel 5.2.2 gesehen, dass mit einer Koordinationszahl  $z = 3$  der minimale Spin zur Konstruktion eines Vertex-Zustands-Modells  $S = \frac{3}{2}$  ist. Dieser Optimum-Grundzustand mit  $S = \frac{3}{2}$  auf dem Hexagonalgitter wurde von Niggemann *et al.* [Niggemann u. a. 1997] konstruiert und untersucht. Das in der Veröffentlichung vorgestellte Modell enthält 5 kontinuierliche Parameter und einen diskreten Parameter. Der Grundzustand selber wird von einem nicht-entarteten Grundzustand über einen quantenkritischen Punkt in eine symmetriebrochene, geordnete Phase getrieben, in der der Grundzustand zweifach entartet ist. Der Phasenübergang ist zweiter Ordnung. Die kritische, longitudinale Korrelation fällt mit  $\frac{1}{\sqrt{r}}$  gegen den Abstand  $r$  ab. Entfernt vom kritischen Punkt, fällt sie exponentiell auf Null in der ungeordneten Phase und auf einen endlichen Wert in der geordneten Phase ab. An dem  $SO(3)$ -symmetrischen Punkt entspricht hierbei der Grundzustand dem Grundzustand des bereits öfters zitierten VBS-Modells [Affleck u. a. 1987].

Betrachtet man nun, statt des Spin- $\frac{3}{2}$  Modells, ein Vertex-Zustands-Modell mit Spin-2, so verändert sich das Verhalten des Modells drastisch. Es zeigt sich, dass zur Konstruktion des Grundzustandes eines Vertex-Zustands-Modells mit Spin-2 auf dem Hexagonalgitter konzeptionell etwas Neues hinzutritt, das ich mit „freien Bonds“ bezeichnen möchte.

In der Sprechweise von AKLT kann man sich einen Spin-2 aus vier symmetrisierten Spin- $\frac{1}{2}$  aufgebaut vorstellen. Bei den VBS-Modellen formt jeder dieser Spin- $\frac{1}{2}$ , antisymmetrisiert mit einem Spin- $\frac{1}{2}$  seines nächsten Nachbarn, einen Bond. Für ein Spin-2 Modell auf dem Hexagonalgitter würde diese Konstruktion bedeuten, dass zu zwei nächsten Nachbarn *ein* Bond erzeugt werden müsste, wo hingegen zum dritten Nachbarn *zwei* Bonds auftreten müssen. Da aus Symmetriegründen dieser Doppel-Bond zwischen allen nächsten Nachbarn auftreten kann, ist der so konstruierte Grundzustand exponentiell in der Systemgröße entartet.

Da ich mich hier auf niedrig entartete oder nicht entartete Grundzustände beschränken möchte, schließe ich also diese Konstruktion aus. Eine andere Möglichkeit besteht nun darin, einen Bond pro Gitterplatz zu fixieren und zum Beispiel, je nach Untergitter, mit einem herauslaufenden oder mit einem hereinlaufenden Pfeil als Bondvariable zu versehen. Dieser Bond wird nicht, wie die anderen, aussummiert und soll daher als „freier Bond“ bezeichnet werden. Die Abbildung 5.36 zeigt ein Beispiel einer Anordnung von freien Bonds,

die eine schwach antiferromagnetische Grundmagnetisierung des Grundzustandes darstellt. Der Begriff „schwach“ antiferromagnetisch soll dabei auf den Referenzzustand hindeuten, der eine Grundmagnetisierung von  $S^z = \pm\frac{1}{2}$  je nach Untergitter aufweist; im Gegensatz zu dem maximal möglichen Wert von  $S^z = \pm 2$ . In der Abbildung trägt dabei das Untergitter  $\mathfrak{A}$  die Grundmagnetisierung  $S^z = +\frac{1}{2}$  (die Pfeile auf diesem Untergitter laufen heraus, je einer pro Gitterplatz) und das Untergitter  $\mathfrak{B}$  eine Grundmagnetisierung  $S^z = -\frac{1}{2}$ .

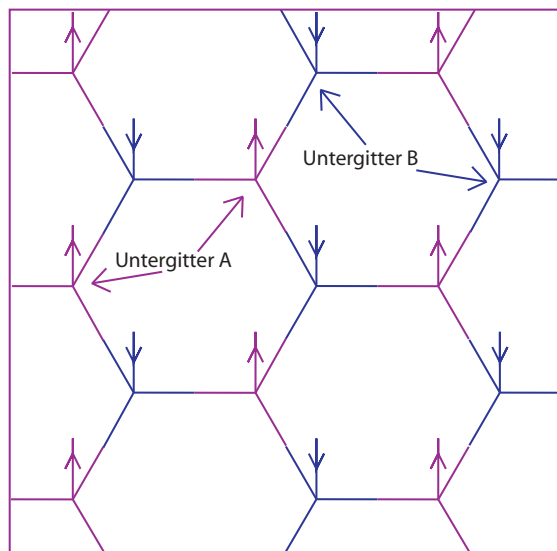


Abbildung 5.36.: Auf dem Hexagonalgitter lassen sich zweifach entartete Grundzustände mit Hilfe von „freien Bonds“ konstruieren. Die inneren Bonds werden aussummiert. Hier das Beispiel einer schwach antiferromagnetischen Grundmagnetisierung.

Der globale Hamiltonian für dieses Modell soll aber die volle Translationsinvarianz des zu Grunde liegenden Gitters aufweisen, was bedingt, dass auch die umgekehrte Besetzung der Grundmagnetisierung auf die Untergitter den gleichen Energieeigenwert liefern muss. Die Anordnung mit hereinlaufenden Pfeilen auf dem Untergitter  $\mathfrak{A}$  und herauslaufenden auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$  führt dementsprechend zu einem weiteren Grundzustand. Der Grundzustand ist demnach schon auf dem endlichen Gitter *zweifach exakt entartet*.

### Konstruktion des Grundzustandes

Wie bereits oben mit der Translationsinvarianz des globalen Hamiltonians angedeutet, soll auch dieses Modell den Symmetrien 2-4 aus dem Unterkapitel 2.2 genügen. Hierzu sollen die lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{ij}$  wieder in Form von Projektionsoperatoren geschrieben werden. Die, den Projektoren zu Grunde liegenden Zwei-Spin-Zustände, lassen sich auch wieder nach den Quantenzahlen  $\mathfrak{p}$  des Paritätsoperators  $\mathbf{P}_{ij}$  und der der Magnetisie-

rung  $\mathbf{m}$  des Operators  $\mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z$  klassifizieren. Im Anhang A.2 sind die 25 entsprechenden Zwei-Spin-Zustände aufgelistet. Die lokalen Hamilton-Projektions-Operatoren erhalten die Darstellung:

$$\begin{aligned}
h_{ij} = & \lambda_4(|v_4\rangle\langle v_4| + |v_{-4}\rangle\langle v_{-4}|) + \\
& \lambda_3^+(|v_3^+\rangle\langle v_3^+| + |v_{-3}^+\rangle\langle v_{-3}^+|) + \\
& \lambda_3^-(|v_3^-\rangle\langle v_3^-| + |v_{-3}^-\rangle\langle v_{-3}^-|) + \\
& \lambda_{21}^+(|v_{21}^+\rangle\langle v_{21}^+| + |v_{-21}^+\rangle\langle v_{-21}^+|) + \\
& \lambda_{22}^+(|v_{22}^+\rangle\langle v_{22}^+| + |v_{-22}^+\rangle\langle v_{-22}^+|) + \\
& \lambda_2^-(|v_2^-\rangle\langle v_2^-| + |v_{-2}^-\rangle\langle v_{-2}^-|) + \\
& \lambda_{11}^+(|v_{11}^+\rangle\langle v_{11}^+| + |v_{-11}^+\rangle\langle v_{-11}^+|) + \\
& \lambda_{12}^+(|v_{12}^+\rangle\langle v_{12}^+| + |v_{-12}^+\rangle\langle v_{-12}^+|) + \\
& \lambda_{11}^-(|v_{11}^-\rangle\langle v_{11}^-| + |v_{-11}^-\rangle\langle v_{-11}^-|) + \\
& \lambda_{12}^-(|v_{12}^-\rangle\langle v_{12}^-| + |v_{-12}^-\rangle\langle v_{-12}^-|) + \\
& \lambda_{01}^+ |v_{01}^+\rangle\langle v_{01}^+| + \lambda_{02}^+ |v_{02}^+\rangle\langle v_{02}^+| + \\
& \lambda_{03}^+ |v_{03}^+\rangle\langle v_{03}^+| + \\
& \lambda_{01}^- |v_{01}^-\rangle\langle v_{01}^-| + \lambda_{02}^- |v_{02}^-\rangle\langle v_{02}^-|.
\end{aligned} \tag{5.39}$$

In diesen lokalen Hamilton-Operatoren sind 15  $\lambda$ -Parameter und sieben Superpositionsparameter  $a_i$  enthalten, inclusive eines trivialen Faktors für die Skala und einen für den Energie-Nullpunkt.

Wie bereits oben erwähnt, gibt es zwei Möglichkeiten die freien Bonds mit Pfeilen zu versehen. Zunächst wollen wir die betrachten, bei der auf dem Untergitter  $\mathfrak{A}$  herauslaufende Pfeile auf den freien Bonds sitzen und hereinlaufende auf denen des Untergitters  $\mathfrak{B}$ . Wie bereits in dem Kapitel zuvor, soll den einzelnen Pfeil-Konfigurationen der Vertices eindeutig je ein Ein-Spin-Zustand zugeschrieben werden. Hierzu soll zunächst ein typischer Vertex für jedes Untergitter identifiziert werden. Abbildung 5.37 zeigt für jedes Untergitter separat einen typischen Vertex mit Bondvariablen  $\mu_i$ , die die Werte „Pfeil raus“ ( $\hat{=} +1$ ) und „Pfeil rein“ ( $\hat{=} -1$ ) annehmen können.

Um von einer gegebenen Konfiguration auf den  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustand zu schließen, muss hier die Regel 3.64 aus Kapitel 3 modifiziert werden.

Als Beispiel wurde in Abschnitt 5.1 folgende Regel angewandt:

$$|\mathbf{m}(\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6)\rangle = \left| \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \mu_i \right\rangle. \tag{5.40}$$

In dem hier vorliegenden Fall soll diese Regel abgeändert gelten. Zunächst soll auch hier wieder die Summe der herauslaufenden minus der Summe der hereinlaufenden Pfeile gebildet werden. Jetzt muss aber für den freien Bond auf dem Untergitter  $\mathfrak{A}$  noch zusätzlich ein

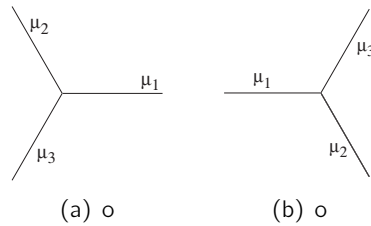


Abbildung 5.37.: Ähnlich wie bei dem Spin-3 Modell auf dem Hexagonalgitter lassen sich auch hier Vertices den beiden Untergittern  $\mathfrak{A}$  und  $\mathfrak{B}$  zuschreiben. Die Bondvariablen können hier aber nur die Werte „Pfeil rein“ und „Pfeil raus“ annehmen.

„herauslaufender Pfeil“ addiert werden. Auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$  erniedrigt man die Differenz um Eins, entsprechend dem hereinlaufenden Pfeil auf dem freien Bond. Die Hälfte dieser Differenz entspricht nun dem  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwert, der dem Vertex zugeschrieben wird. Als Formel geschrieben:

$$|\mathbf{m}(\mu_1, \mu_2, \mu_3)\rangle_{\mathfrak{A}/\mathfrak{B}} = \left| \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^3 \mu_i \pm 1 \right) \right\rangle, \quad (5.41)$$

wobei das plus für die Gitterplätze mit herauslaufendem Pfeil (+1) und das minus Zeichen für hereinlaufende Pfeile (-1) zu nehmen ist.

Auch hier gilt wieder, dass die Vorfaktoren aus den gegebenen Symmetrien heraus bestimmt werden müssen. Es ergeben sich so folgende Vertices für das Untergitter  $\mathfrak{A}$ :

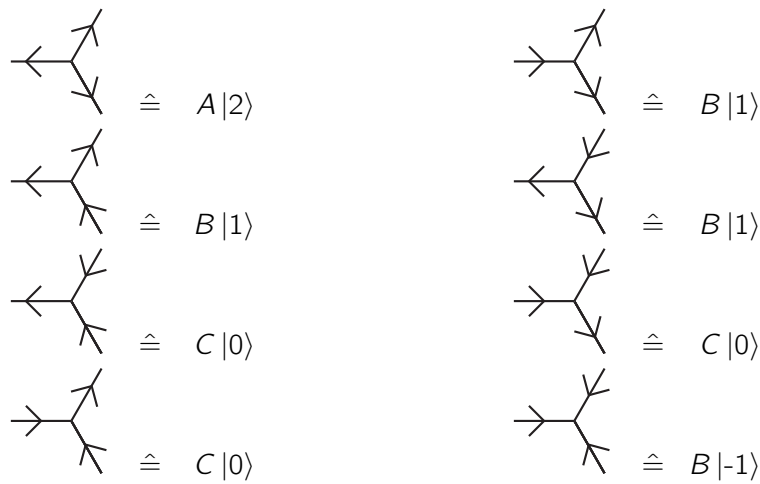


Tabelle 5.7.: Zuweisung der Vertices auf dem Untergitter  $\mathfrak{A}$ . Man kann sich an jedem Vertex noch einen freien Bond mit herauslaufendem Pfeil als Bondvariable denken.

Und folgende Vertices für das Untergitter  $\mathfrak{B}$ :

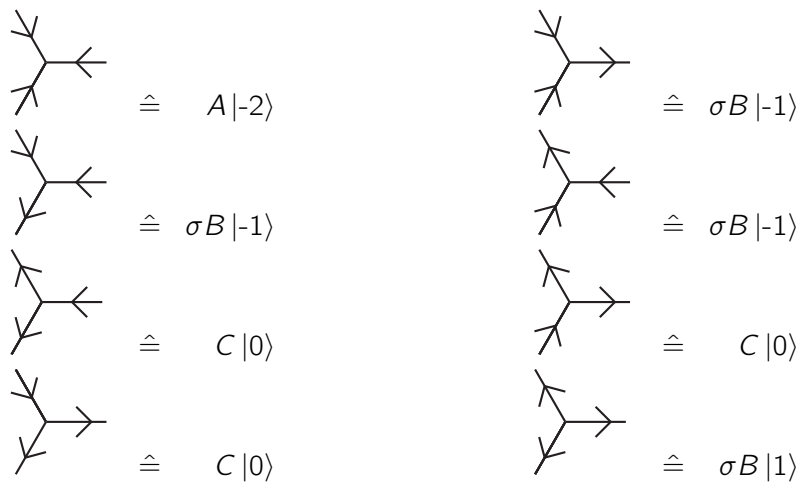


Tabelle 5.8.: Zuweisung der Vertices auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$ . Man kann sich an jedem Vertex noch einen freien Bond mit hereinlaufendem Pfeil als Bondvariable denken.

Dabei sind die Parameter  $A, B, C$  kontinuierliche, reelle Parameter, wo hingegen  $\sigma$  nur die beiden Werte  $\pm 1$  annehmen kann. Das Aussummieren des inneren Bonds führt zu den

folgenden neun lokalen Zwei-Spin-Zuständen:

$$\begin{aligned}
 & AC |2, 0\rangle + \sigma B^2 |1, 1\rangle \\
 & AC |0, \bar{2}\rangle + \sigma B^2 |\bar{1}, \bar{1}\rangle \\
 & \sigma ab |2, \bar{1}\rangle + BC |1, 0\rangle \\
 & AB |1, \bar{2}\rangle + BC\sigma |0, \bar{1}\rangle \\
 & \quad BC |1, 0\rangle_\sigma \\
 & \quad BC |\bar{1}, 0\rangle_\sigma \\
 & A^2 |\bar{2}, 2\rangle + \sigma B^2 |\bar{1}, 1\rangle \\
 & \sigma B^2 |\bar{1}, 1\rangle + C^2 |0, 0\rangle \\
 & \sigma B^2 |1, \bar{1}\rangle + C^2 |0, 0\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{5.42}$$

Da das System, wie bereits oben erwähnt, translationsinvariant oder invariant unter Zeitumkehr sein soll, muss der Referenzzustand, der aus der Umkehr aller Pfeile entsteht, auch zu einem Grundzustand führen. Dies erreicht man durch den Austausch der Untergitter so, dass nun auf den freien Bonds vom Untergitter  $\mathfrak{A}$  die hereinlaufenden Pfeile und auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$  die herauslaufenden Pfeile gesetzt werden. Es entsteht dadurch folgende Zuweisung der Vertices auf dem Untergitter  $\mathfrak{A}$ :

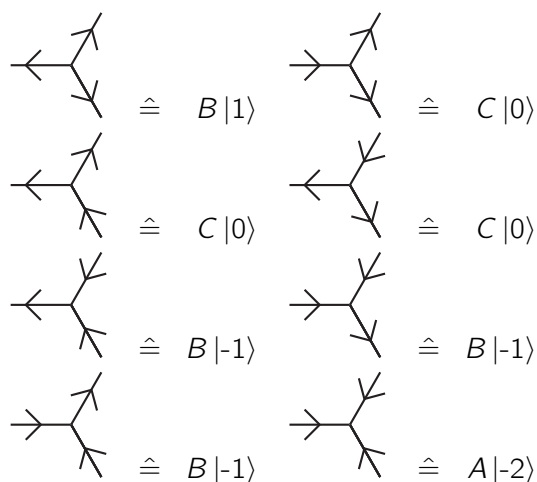


Tabelle 5.9.: Zuweisung der Vertices auf dem Untergitter  $\mathfrak{A}$ . Man kann sich an jedem Vertex noch einen freien Bond mit hereinlaufendem Pfeil als Bondvariable denken.

Auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$  entsprechend:



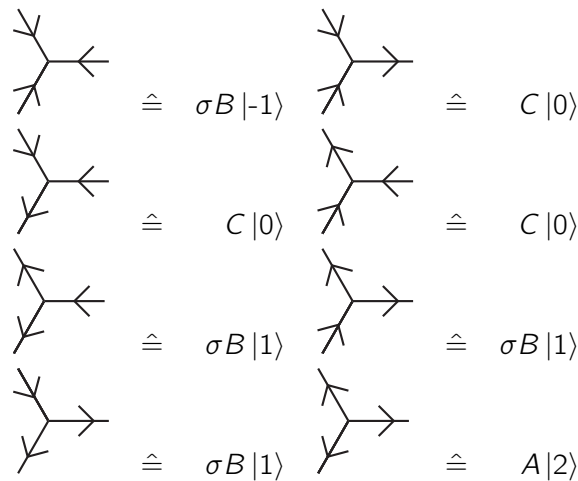


Tabelle 5.10.: Zuweisung der Vertices auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$ . Man kann sich an jedem Vertex noch einen freien Bond mit herauslaufendem Pfeil als Bondvariable denken.

Hier führt das Aussummieren des inneren Bonds zu fünf weiteren lokalen Grundzuständen:

$$\begin{aligned}
 & AC |0, 2\rangle + \sigma B^2 |1, 1\rangle \\
 & AC |\bar{2}, 0\rangle + \sigma B^2 |\bar{1}, \bar{1}\rangle \\
 & A^2 |2, \bar{2}\rangle + \sigma B^2 |1, \bar{1}\rangle \\
 & \sigma AB |\bar{1}, 2\rangle + BC |0, 1\rangle \\
 & AB |\bar{2}, 1\rangle + BC \sigma |\bar{1}, 0\rangle.
 \end{aligned} \tag{5.43}$$

Damit liegen insgesamt 14 lokale Zwei-Spin-Zustände vor, die durch geeignete Wahl der Parameter zu lokalen Grundzuständen werden.

Die folgenden beiden Sätze von Bedingungen machen die 14 Zwei-Spin-Zustände zu Eigenzuständen der lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{ij}$ . Es müssen folgende  $\lambda$ -Parameter zu Null gesetzt werden:

$$\lambda_2^- = \lambda_{22}^+ = \lambda_{11}^\sigma = \lambda_{12}^+ = \lambda_{12}^- = \lambda_{02}^+ = \lambda_{03}^+ = \lambda_{01}^- = \lambda_{02}^- = 0. \tag{5.44}$$

Des Weiteren müssen für die Superpositionsparameter folgende Gleichungen erfüllt sein:

$$a_1 = -\frac{AC}{\sigma B^2}, a_{\frac{1}{2}(5+\sigma)} = -\frac{\sigma A}{C}, a_4 = -\frac{\sigma A^2}{B^2}, a_5 = \frac{A^2}{C^2} \tag{5.45}$$

Damit die gegebenen lokalen Eigenzustände zum Eigenwert Null nun auch noch Grundzustände werden, müssen die anderen Spektralparameter  $\lambda$  positiv gewählt werden:

$$\lambda_4, \lambda_3^+, \lambda_3^-, \lambda_{21}^+, \lambda_{11}^{-\sigma}, \lambda_{01}^+ > 0. \tag{5.46}$$

Sind diese drei Sätze an Bedingungen erfüllt, so sind die lokalen Zwei-Spin-Zustände Eigenzustände zu den lokalen Wechselwirkungen  $\mathbf{h}_{ij}$  zum niedrigsten Eigenwert  $e_0 = 0$ . Die lokalen Grundzustände sind 14-fach entartet. Es gibt neben den 14 lokalen Grundzuständen genau 11 angeregte Zustände. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann man die auftretenden kontinuierlichen Parameter  $A, B, C$  so reskalieren, dass in das Modell nur das Verhältnis  $A/C$  und  $B/C$  einfließt. Neben den resultierenden zwei kontinuierlichen Parametern enthält das Modell noch den diskreten  $\sigma$  sowie die 6 positiven  $\lambda$ -Parameter.

### Eigenschaften des Grundzustandes

Ein globaler Zustand entsteht wieder durch das Aussummieren der inneren Bondvariablen. Hierzu müssen einmal die Vertices aussummiert werden, die auf dem Untergitter  $\mathfrak{A} + \frac{1}{2}$  Grundmagnetisierung und auf Untergitter  $\mathfrak{B}$  die Grundmagnetisierung  $-\frac{1}{2}$  aufweisen, ferner auch jene Vertices, die durch vertauschen der Untergitter entstehen. Dies führt zu zwei verschiedenen globalen Zuständen, die mit der Energie  $E_0 = 0$  den Grundzustand bilden. Der Grundzustand ist damit auf jedem endlichen (und unendlichen) Gitter zweifach exakt entartet. Dabei wurden wieder periodische Randbedingungen angenommen, wie sie bereits in Abschnitt 5.2.2 verwendet wurden.

In den Grundzustand fließen die beiden Parameter  $A/C$  und  $B/C$  sowie der diskrete Parameter  $\sigma$  ein.

Durch einen globalen Spin-Flip  $\mathbf{S}^z \rightarrow -\mathbf{S}^z$  überführt man dabei den einen globalen Zustand in den anderen Zustand. Dies gilt für alle Parameter  $A/C, B/C$  und  $\sigma$ . Die globale Magnetisierung  $\langle \mathbf{S}_{total}^z \rangle$  ist Null, die Magnetisierung pro Spin ist allerdings endlich.

Durch Konstruktion zeigt jeder der beiden Zustände eine antiferromagnetische, Néel-artige Ordnung. Für die Untergittermagnetisierung  $\mathbf{m}_{\mathfrak{A}/\mathfrak{B}}$  gilt:

$$\begin{cases} \mathbf{m}_{\mathfrak{A}} = \langle \mathbf{S}_i^z \rangle, & \text{für } i \in \mathfrak{A}; \\ \mathbf{m}_{\mathfrak{B}} = -\mathbf{m}_{\mathfrak{A}} = \langle \mathbf{S}_i^z \rangle, & \text{für } i \in \mathfrak{B}. \end{cases} \quad (5.47)$$

Die Untergittermagnetisierung liegt dabei in dem Wertebereich von  $0 \leq |\mathbf{m}_{\mathfrak{A}/\mathfrak{B}}| \leq 2$ . Für  $A \rightarrow \infty$  erwartet man auch hier einen voll polarisierten Néel-Zustand, der für den einen Grundzustand auf dem Untergitter  $\mathfrak{A}$   $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustände  $|2\rangle$  und auf dem anderen Untergitter  $\mathfrak{B}$   $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustände  $|\bar{2}\rangle$  trägt. Für den zweiten Grundzustand ist die Anordnung genau entgegengesetzt. Im Unterschied zum Grenzfall  $A \rightarrow \infty$  des Spin-3 Vertex-Zustands-Modells auf dem endlichen kubischen oder auf dem endlichen Hexagonalgitter (5.2.1, 5.2.2) ist nicht nur die Überlagerung der beiden Néel-Zustände  $|\Psi_0\rangle = |\text{Néel}_{\mathfrak{A}}\rangle + |\text{Néel}_{\mathfrak{B}}\rangle$  (vgl. Gl. (5.14)) Grundzustand, sondern jeder der beiden Néel-Zustände alleine ist auch Grundzustand.

Ein isotroper Punkt liegt nicht im Parameterbereich des Modells. Das Modell zeigt für alle Parameter eine Anisotropie in  $z$ -Richtung des Spin-Raums. Insbesondere ist es nicht möglich, die Parameter so zu wählen, dass man einen Grundzustand in Übereinstimmung mit dem VBS-Modell erhält.

### Monte-Carlo-Simulation und Ergebnisse

In weiten Bereichen des Parameterraumes habe ich Monte-Carlo-Simulationen nach der bereits beschriebenen Methode durchgeführt. Diese sollen hier vorgestellt und erläutert werden.

Als wichtigstes Ergebnis ist festzuhalten, dass bei diesem Modell kein Quanten-Phasenübergang zu beobachten ist. Der Grund dafür liegt darin, dass bereits durch Konstruktion jeder der beiden Grundzustände symmetriebrochen ist. Bei den anderen Modellen ging der Phasenübergang mindestens mit einem  $Z_2$ -Symmetriebruch einher. Die Spin-Flip invariante und translationsinvariante Phase geht in eine symmetriebrochene Phase über. Die hier betrachteten Grundzustände besitzen per Konstruktion diese Symmetrie nicht.

Als nächstes möchte ich einen Blick auf die Untergittermagnetisierung werfen. Diese liegt für alle Parameter in dem Bereich  $0 \leq m_{\text{A}}, -m_{\text{B}} \leq 2$  für den ersten Grundzustand und Entsprechendes mit umgekehrtem Vorzeichen für den zweiten Grundzustand. Dabei nähert man sich der oberen Grenze für  $A^2 \rightarrow \infty$ , der unteren für  $C^2 \rightarrow \infty$  [7]. Da im gesamten Parameterbereich der Grundzustand nicht voll polarisiert ist, möchte ich von einem *schwachen Antiferromagneten* sprechen. Die Abbildung 5.38 zeigt die Untergittermagnetisierung in Abhängigkeit der Parameter<sup>8</sup>  $A^2$  und  $C^2$ .

An dieser Abbildung ist deutlich zu erkennen, dass kein Phasenübergang in diesem Modell vorliegt.

### Korrelationsfunktionen

Auch die longitudinalen Korrelationsfunktionen rechtfertigen die Bezeichnung „antiferromagnetisch“. Sie zeigen für alle Parameter ein im Abstand  $r$  alternierendes Verhalten und klingen im gesamten Parameterbereich exponentiell ab. Dabei hat die Korrelationsfunktion die schon bekannte Form  $\langle \mathbf{S}_0^z \mathbf{S}_r^z \rangle = \langle \mathbf{S}_0^z \rangle \langle \mathbf{S}_r^z \rangle + (-1)^r a e^{-r/\xi}$ . In Abbildung 5.39 wird für die Parameterwerte  $A^2 = B^2 = C^2 = 1$  die Korrelationsfunktion dargestellt und die dazugehörige Korrelationslänge im logarithmischen Plot zu  $\xi_\ell = 2.1$  bestimmt.

<sup>7</sup>Oder entsprechend der Reskalierung für  $A^2 \rightarrow 0, B^2 \rightarrow 0$ .

<sup>8</sup>Es sei noch mal erwähnt, dass bei der Monte-Carlo-Simulation stets die Quadrate der Parameter einfließen.

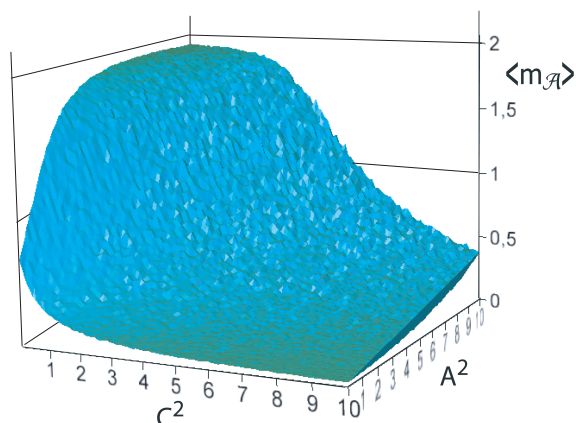


Abbildung 5.38.: Die Abbildung zeigt die Magnetisierung auf dem Untergitter  $\mathcal{A}$  in Abhängigkeit der Parameter  $A^2$  und  $C^2$ ,  $B^2 = 1$ . Man erkennt im gesamten Parameterbereich ein kontinuierliches Öffnen der Magnetisierung. Ein Phasenübergang ist nicht zu erkennen. Man erkennt nur an dem Parametertrand für  $A^2 \rightarrow \infty$  und kleinen Werten  $C^2$  eine fast vollständige Polarisation. Für  $C^2 \rightarrow \infty$  verschwindet die Untergittermagnetisierung. Gittergröße:  $48 \times 48$

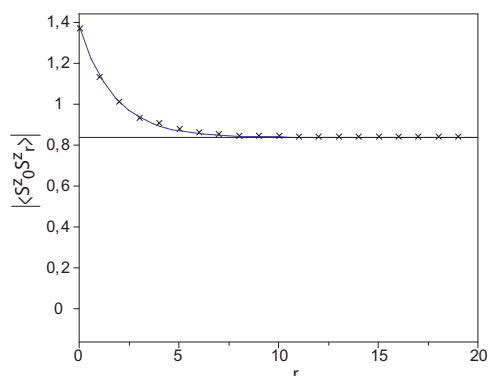


Abbildung 5.39.: Die longitudinale Korrelationsfunktion zeigt exponentielles Abklingen bis auf einen Wert  $\langle S_0^z \rangle \langle S_r^z \rangle$ , der das Produkt der Untergittermagnetisierungen an den Plätzen 0 und  $r$  darstellt. Gittergröße:  $48 \times 48$

### Zusammenfassung der Ergebnisse

Die Konstruktion des Grundzustandes zeigte bei diesem Modell die Besonderheit einer „Grundmagnetisierung“, die je nach Untergitter eine Größe von  $\pm \frac{1}{2}$  betrug und zu einem zweifach entarteten Grundzustand führte. Diese Entartung ist exakt, auch bei endlichen Gittergrößen. Im gesamten Parameterraum findet sich kein Phasenübergang. Ursache hierfür

ist die Grundmagnetisierung, die bereits einen Symmetriebruch der diskreten Translationsinvarianz (oder der Spin-Flip-Invarianz) darstellt. Die Grundmagnetisierung wurde mittels freier Bonds hervorgerufen. Die Art der Konstruktion lässt sich mit der Konstruktion eines schwachen Antiferromagneten bei einer Spin-2-Kette mittels Matrix-Produkt-Ansatz [Ahrens u. a. 2002] vergleichen. Hier entsteht die Grundmagnetisierung dadurch, dass man von der Hauptdiagonalen der Matrizen mit der Besetzung der Ein-Spin-Zustände  $\propto |0\rangle$  abweicht.

Die verschwindende Gesamtmagnetisierung, die antiferromagnetischen Korrelationen sowie eine alternierende Untergittermagnetisierung, die nicht der vollen Polarisation entspricht, rechtfertigen die Bezeichnung „schwacher Antiferromagnet“ für den Grundzustand dieses Modells.

### 5.3.2. Spin-2 auf dem Hexagonalgitter: der schwache Ferromagnet/ Ferrimagnet

In dem vorangegangenen Kapitel wurde bereits ein Spin-2 Vertex-Zustands-Modell auf einem Hexagonalgitter besprochen. Der Konstruktion lag die Idee freier Bonds zu Grunde, die für eine Magnetisierung in dem Referenzzustand verantwortlich waren.

Natürlich ist man bei der Besetzung der freien Bonds mit Pfeilen nicht an das in Abschnitt 5.3.1 vorgegebene Schema gebunden. Man kann zum Beispiel auch auf jedem freien Bond die Pfeile herauslaufen lassen, was einer Grundmagnetisierung  $+\frac{1}{2}$  pro Gitterplatz entspricht. Diesen Ansatz möchte ich in hier vorstellen.

#### Konstruktion des Grundzustandes

Ausgangspunkt für die Konstruktion sind, wie im vorangegangenen Abschnitt, die allgemeinen lokalen Hamilton-Operatoren der Gleichung (5.39). Für diese Operatoren werden im Folgenden Einschränkungen gefordert, sodass die lokalen Zwei-Spin-Zustände zu Grundzuständen werden. Nach wie vor sollen die Wechselwirkungen den Symmetrien aus Kapitel 2.2 genügen.

In Gleichung (5.41) wurde die veränderte Summenregel angegeben, die der Konfiguration von Bondvariablen (Pfeilen) eines Vertex einen  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustand zuweist, je nachdem ob der freie Bond ein herauslaufender oder hereinlaufender Pfeil ist.

In diesem Abschnitt soll die Unterscheidung nach Untergittern nicht gemacht werden; so soll jedem Gitterplatz ein freier Bond mit herauslaufendem Pfeil zugeordnet werden. Die Zuordnung zu dem  $\mathbf{S}^z$ -Eigenzustand wird dann durch folgende Formel beschrieben:

$$|\mathbf{m}(\mu_1, \mu_2, \mu_3)\rangle_l = \left| \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^3 \mu_i + 1 \right) \right\rangle. \quad (5.48)$$

Es ergeben sich die Zuordnungen der Vertices zu den Ein-Spin-Zuständen, wie sie in den Tabellen 5.11 und 5.12 aufgeführt werden.

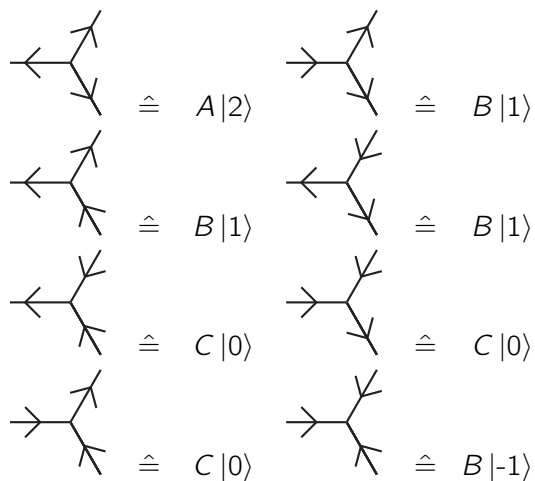


Tabelle 5.11.: Zuweisung der Vertices. Man kann sich an jedem Vertex noch einen freien Bond mit herauslaufendem Pfeil als Bondvariable denken. Dies gilt auch auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$ .

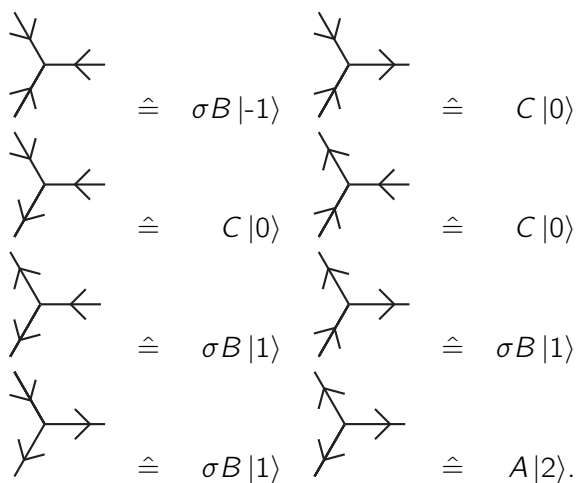


Tabelle 5.12.: Dieselbe Zuweisung wie für das Untergitter  $\mathfrak{A}$  gilt hier auch für das Untergitter  $\mathfrak{B}$ .

Das Aussummieren der inneren Bondvariablen führt zu den folgenden Zwei-Spin-Zuständen:

$$\begin{aligned}
 & AB |2, 1\rangle_\sigma \\
 & AC |2, 0\rangle + \sigma B^2 |1, 1\rangle \\
 & AC |0, 2\rangle + \sigma B^2 |1, 1\rangle \\
 & \sigma AB |2, -1\rangle + BC |1, 0\rangle \\
 & AB |-1, 2\rangle + \sigma BC |0, 1\rangle \\
 & BC |1, 0\rangle_\sigma \\
 & C^2 |0, 0\rangle + \sigma B^2 |-1, 1\rangle \\
 & C^2 |0, 0\rangle + \sigma B^2 |1, -1\rangle \\
 & BC |-1, 0\rangle_\sigma,
 \end{aligned} \tag{5.49}$$

mit den reellen Parametern  $A, B, C$  und dem diskreten  $\sigma = \pm 1$ .

Um ebenfalls in diesem Modell die Spin-Flip-Symmetrie zu gewährleisten, müssen auch Vertices betrachtet werden, die hereinlaufende Pfeile auf den freien Bonds haben. Die Zuordnungen der Vertices zu den Ein-Spin-Zuständen werden in den Tabellen 5.13 und 5.14 dargestellt.

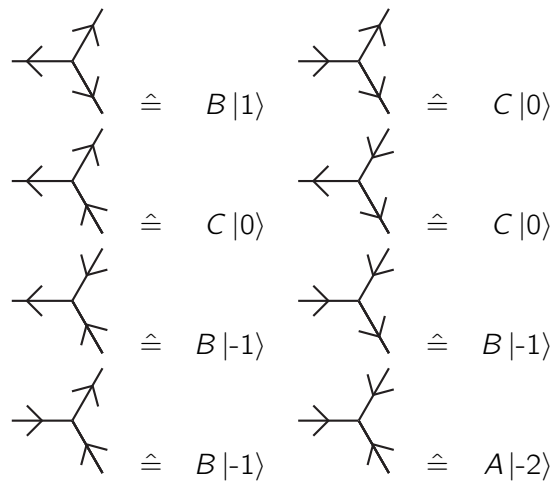


Tabelle 5.13.: Zuweisung der Vertices. Man kann sich an jedem Vertex noch einen freien Bond mit hereinlaufendem Pfeil als Bondvariable denken. Dies gilt hier nicht nur auf dem Untergitter  $\mathfrak{B}$ . Bei beiden tritt also eine Grundmagnetisierung  $-\frac{1}{2}$  hinzu.

$$\begin{array}{ccc}
\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} & \hat{=} & A|-2\rangle & \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} & \hat{=} & \sigma B|-1\rangle \\
\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} & \hat{=} & \sigma B|-1\rangle & \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} & \hat{=} & \sigma B|-1\rangle \\
\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} & \hat{=} & C|0\rangle & \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} & \hat{=} & C|0\rangle \\
\begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} & \hat{=} & C|0\rangle & \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} & \hat{=} & \sigma B|1\rangle.
\end{array}$$

Tabelle 5.14.: Dieselbe Zuweisung wie für das Untergitter  $\mathfrak{A}$  gilt hier auch für das Untergitter  $\mathfrak{B}$ .

Dies führt nach dem Aussummieren des inneren Bonds zu fünf weiteren Zwei-Spin-Zuständen:

$$\begin{aligned}
& AB|-2, -1\rangle_{\sigma} \\
& AC|-2, 0\rangle + \sigma B^2|-1, -1\rangle \\
& AC|0, -2\rangle + \sigma B^2|-1, -1\rangle \\
& \sigma AB|-2, 1\rangle + BC|-1, 0\rangle \\
& AB|1, -2\rangle + \sigma BC|0, -1\rangle.
\end{aligned} \tag{5.50}$$

Sie enthalten wieder die oben eingeführten Parameter  $A, B, C$  und  $\sigma$ .

Wieder sollen diese 14 lokalen Zustände Eigenzustände der lokalen Hamilton-Operatoren sein, was zu folgenden Bedingungen für die  $\lambda$ -Parameter führt:

$$\lambda_3^{\sigma} = \lambda_{21}^{+} = \lambda_2^{-} = \lambda_{11}^{-} = \lambda_{12}^{\sigma} = \lambda_{03}^{+} = \lambda_{02}^{-} = \lambda_{01}^{-} = 0, \tag{5.51}$$

und für die Superpositionsparameter zu:

$$a_1 = \frac{2\sigma B^2}{AC}, a_3 = \sigma \frac{C}{A}, a_4 = -a_5 \sigma \frac{C^2}{B^2}, a_6 = \frac{1}{a_5} \sigma \frac{2B^2 C^2}{2C^4 + B^4}. \tag{5.52}$$

Dabei hängen die Variablen  $a_4$  und  $a_6$  von der Wahl von  $a_5$  ab.

Neben den Bedingungen, die die 14 lokalen Zustände zu Eigenzuständen der Hamiltonian  $\mathbf{h}_{ij}$  zum Eigenwert Null machen, müssen noch

$$\lambda_4, \lambda_3^{-\sigma}, \lambda_{22}^{+}, \lambda_{12}^{-\sigma}, \lambda_{01}^{+}, \lambda_{02}^{+}, \lambda_{01}^{-} > 0 \tag{5.53}$$



sein, damit die Zwei-Spin-Zustände lokale Grundzustände sind.

Effektiv fließen in das Modell wieder zwei kontinuierliche Parameter  $A/C, B/C$  sowie der diskrete Parameter  $\sigma = \pm 1$  und die sieben  $\lambda$ -Parameter aus Gleichung (5.53) ein. Der Energie-Nullpunkt ist mit  $E_0 = e_0 = 0$  festgelegt, die Skala ist in den Parametern enthalten.

Der globale Grundzustand entsteht wieder durch das Aussummieren der inneren Bondvariablen auf dem periodisch geschlossenen Gitter.

### Eigenschaften des Grundzustandes

Der Grundzustand ist auf jedem endlichen Gitter exakt zweifach entartet. Der Grundzustand wird von zwei kontinuierlichen Parametern  $A/C, B/C$  und einem diskreten  $\sigma$  gesteuert. Unter einem globalen Spin-Flip  $\mathbf{S}^z \rightarrow -\mathbf{S}^z$  wird der eine Grundzustand in den anderen überführt (und umgekehrt). Die globalen Zustände besitzen die volle Translationsinvarianz des zu Grunde liegenden Gitters. Die mittlere Magnetisierung pro Spin beträgt  $\langle \mathbf{S}^z \rangle_{I/II} = \pm \frac{1}{2}$ . Das plus Zeichen bezieht sich auf den globalen Zustand, der herauslaufende Pfeile auf den freien Bond trägt ( $I$ ) und das minus Zeichen auf den mit hereinlaufenden Pfeilen auf den freien Bonds ( $II$ ). Diese schwach ferromagnetische beziehungsweise ferrimagnetische Ordnung gilt für den gesamten Parameterbereich auf einem endlichen Gitter.

Der Parameterrand  $A \rightarrow \infty$  führt zu keinem Néel-Zustand mit maximaler Polarisierung, da in jedem der beiden Grundzustände einer der Ein-Spin-Zustände mit maximaler  $\mathbf{S}^z$ -Komponente nicht realisiert werden kann. Für Zustand ( $I$ ) sind dies die Zustände  $|\bar{2}\rangle$  und für Zustand ( $II$ ) sind dies Zustände  $|2\rangle$ . Im thermodynamischen Limes ist es aber denkbar, dass ein Phasenübergang hin zu einem alternierenden Zustand auftritt, der zum Beispiel auf dem einen Untergitter eine Magnetisierung  $\mathbf{m} = 2$  und auf dem anderen eine Magnetisierung  $\mathbf{m} = -1$  für den Zustand ( $I$ ) aufweist.

Wie bereits im Modell des vorangegangenen Abschnitts, liegt auch bei diesem Modell kein isotroper Punkt im Parameterbereich. Im Gegensatz zu anderen, in dieser Arbeit untersuchten Modellen, stimmt an keinem Punkt der hier konstruierte Grundzustand mit einem VBS-Grundzustand überein.

### Monte-Carlo-Simulation und Ergebnisse

Auch für dieses Modell habe ich Monte-Carlo-Simulationen für einen großen Bereich des Parameterraumes durchgeführt, die im Folgenden vorgestellt werden:

Zunächst möchte ich einen Ordnungsparameter einführen, den ich bei den Simulationen für verschiedene Werte untersucht habe. In Abschnitt 5.1 wurde in Gleichung (5.3) ein

Ordnungsparameter eingeführt, der im Wesentlichen die Untergittermagnetisierung misst. Für das hier vorliegende Modell soll wiederum die Untergittermagnetisierung gemessen werden, allerdings korrigiert um die einheitliche Grundmagnetisierung von  $\mathbf{m} = \pm \frac{1}{2}$  je nach betrachtetem Grundzustand. Der in Gleichung (5.3) angegebene Ordnungsparameter

$$\langle \mathbf{O} \rangle = \left| \left\langle \frac{1}{N} \sum_{\vec{J}} \mathbf{s}^z e^{i\vec{J} \cdot \vec{K}} \right\rangle \right| \quad (5.54)$$

eignet sich auch hier, mit dem Wellenvektor  $\vec{K} = (\pi, \pi)$  und entsprechendem Gittervektor  $\vec{J}$ . Damit ist ein Ordnungsparameter gegeben, der in der ungeordneten Phase gleich Null und in der geordneten Phase endlich ist und maximal einen Wert  $\langle \mathbf{O} \rangle = \frac{3}{2}$  annimmt.

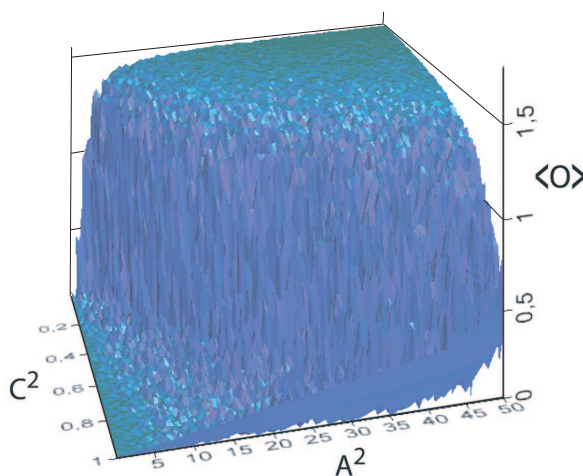


Abbildung 5.40.: Der Ordnungsparameter in Abhängigkeit der Parameter  $A^2$  und  $C^2$ . Deutlich sieht man einen Phasenübergang von einem ungeordneten Bereich hin zu einem geordneten Bereich. In der Nähe des Phasenübergangs erkennt man eine Zunahme des numerischen Rauschens, das auf den kritischen Abbremsvorgang (critical slowing-down) und auf Finite-size-Effekte zurückzuführen ist. Man erkennt nur an dem Parameterrand für  $A^2 \rightarrow \infty$  und kleinen Werten  $C^2$  den Maximalwert des Ordnungsparameter von  $\langle \mathbf{O} \rangle = 1\frac{1}{2}$ . Gittergröße:  $48 \times 48$

In Abbildung 5.40 ist der Ordnungsparameter in Abhängigkeit der Parameter  $0 \leq A^2 \leq 50$  und  $0 \leq C^2 \leq 1$  und  $B^2 = 1$  dargestellt. Man erkennt deutlich ein Anwachsen des Ordnungsparameters bei festgehaltenem  $C^2$  für größer werdende Werte  $A^2$ . Für größere Werte von  $C^2$  tritt dieser Phasenübergang erst später ein.

Bei dem Phasenübergang wird die Translationsinvarianz, die in der ungeordneten Phase vorliegt, gebrochen. Die Untergittermagnetisierung ist in der geordneten Phase für beide

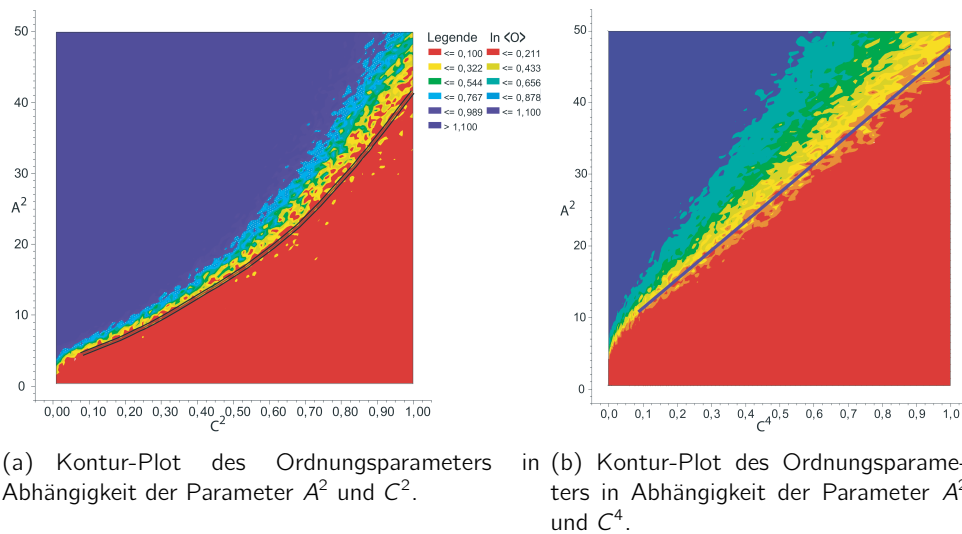


Abbildung 5.41.: Der Phasenübergang vollzieht sich entlang einer Linie  $A^2 = (41 \pm 2)C^4 + (6.9 \pm 0.3)$ , wie aus der Geraden in Teil (b) gut zu erkennen ist.

Untergitter unterschiedlich.

Wie in Abbildung 5.41 dargestellt, lässt sich in weiten Bereichen des Parameterraumes ein quadratischer Zusammenhang zwischen den Parameterwerten  $A^2$  und  $C^2$  als Phasengrenze erkennen. Die Abbildung 5.41 (a) zeigt einen Konturplot des Ordnungsparameters in Abhängigkeit der Simulationsparameter  $A^2$  und  $C^2$  mit eingezeichneter Phasenübergangslinie, die einem Parabelstück nachempfunden ist. Den quadratischen Verlauf erkennt man besser noch in der Abbildung (b), bei der der Ordnungsparameter in Abhängigkeit der Parameter  $A^2$  und  $C^4$  aufgetragen wurde. Die Phasenübergangslinie konnte ich zu  $A^2 = (41 \pm 2)C^4 + (6.9 \pm 0.3)$  bestimmen. Für sehr kleine Werte von  $C^2$  gilt dieser Zusammenhang nicht mehr.

Eine Erklärung für diesen quadratischen Zusammenhang konnte ich bislang nicht finden.

Bei dem hier auftretenden Phasenübergang handelt es sich um einen Übergang zweiter Ordnung. In Abbildung 5.42 ist zur Bestimmung des kritischen Exponenten der Phasenübergang in Abhängigkeit des Parameters  $A^2$  bei festgehaltenen Parameterwerten  $B^2 = 1$  und  $C^2 = 1$  dargestellt. Der kritische Punkt wurde für  $B^2 = 1$  und  $C^2 = 1$  zu  $A_c^2 = 45$  bestimmt, in Übereinstimmung mit der Abbildung 5.41.

Den kritischen Exponenten konnte ich zu  $\beta = 0.123 \pm 0.003$  bestimmen. Auch für andere Wertepaare konnte ich innerhalb der Fehlergrenzen diesen kritischen Exponenten bestätigen. Der kritische Exponent  $\beta = 0.123 \pm 0.003$  stimmt innerhalb der Fehlergrenzen

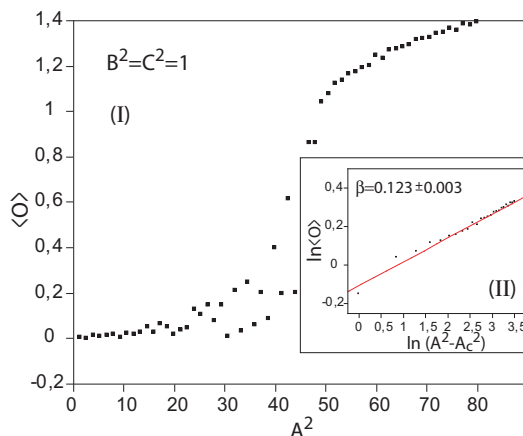


Abbildung 5.42.: Zur Bestimmung des kritischen Exponenten  $\beta$  wurde der Ordnungsparameter im logarithmischen Plot gegen den Abstand vom kritischen Punkt aufgetragen (Tafel (II)). Er ergibt sich zu  $\beta = 0.123 \pm 0.003$ . Tafel (I) zeigt den Ordnungsparameter in Abhängigkeit des Phasenübergang treibenden Parameters  $A^2$ . Gittergröße:  $48 \times 48$

mit dem Ising-Exponenten  $\beta_{Ising} = \frac{1}{8}$  überein.

### Korrelationsfunktionen

Mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung zusammenhängend ist auch die Divergenz entsprechender Korrelationslängen. Dies lässt sich bei dem Phasenübergang gut sehen. Für die ungeordnete Phase fällt die longitudinale Korrelationsfunktion exponentiell auf  $\frac{1}{4}$  ab (siehe Abb. 5.43). Der halblogarithmische Plot (II) zeigt die Bestimmung der Korrelationslänge für die Werte  $A^2 = 35$ ,  $B^2 = C^2 = 1$  zu  $\xi_\ell = 2.6 \pm 0.1$ . Am kritischen Punkt divergiert die Korrelationslänge ( $\xi_\ell \rightarrow \infty$  für  $A^2 \rightarrow A_c^2$ ) und die Korrelationsfunktion zerfällt algebraisch. Im Schaukasten (III) erhält man bei einem doppellogarithmischen Plot eine Steigung von  $\eta = 0.51 \pm 0.06$ . Für die geordnete Phase erhält man wieder ein exponentielles Abklingen auf einen endlichen Wert, der gerade dem Produkt der Untergittermagnetisierungen entspricht.

### Zusammenfassung der Ergebnisse

Bei der Konstruktion des Grundzustandes bin ich wieder von dem Bild der freien Bonds ausgegangen. In diesem Modell wurde keine Unterscheidung nach Untergittern getroffen und allen Vertices wurden herauslaufende Pfeile auf den freien Bonds zugeschrieben. Um den geforderten Symmetrien zu genügen, musste ein zweiter Satz von Vertices mit hereinlaufenden Pfeilen auf den freien Bonds aufgestellt werden. Diese Konstruktion führte so zu zwei exakt entarteten Grundzuständen, die von zwei kontinuierlichen Parametern und einen

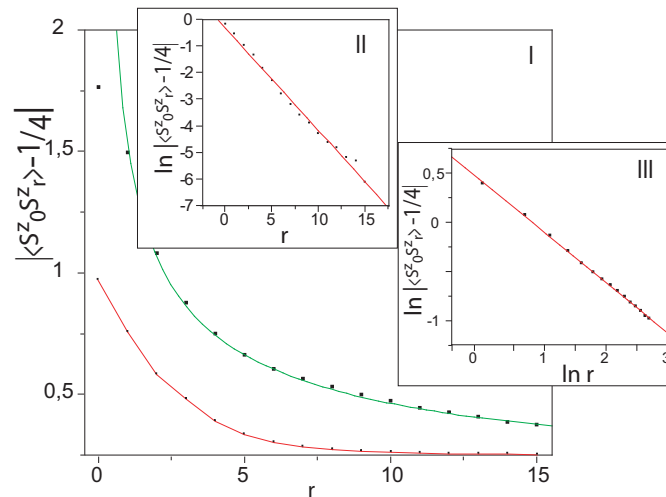


Abbildung 5.43.: Die Abbildung zeigt die longitudinale Korrelationsfunktion; einmal in der ungeordneten Phase (rot) und einmal am kritischen Punkt (grün). Der halb-logarithmische Plot (Tafel (II)) dient zur Bestimmung der Korrelationslänge  $\xi_\ell$ , der doppellogarithmische Plot der Tafel (III) zur Bestimmung des kritischen Exponenten  $\eta$ . Gittergröße:  $48 \times 48$

diskreten Parameter gesteuert wurden. In Abhängigkeit von den Parametern war in den Monte-Carlo-Simulationen ein Quantenphasenübergang zweiter Ordnung zu beobachten, der von einem zweifach entarteten Grundzustand zu einem vierfach entarteten Grundzustand führte. Die geordnete Phase brach dabei die zuvor vorhandene Spin-Flip-Invarianz und die diskrete Translationsinvarianz. Es war möglich, für unterschiedliche Parametersätze den kritischen Exponenten zu bestimmen, mit der der Ordnungsparameter anwächst. Dieser entsprach innerhalb der Fehlergrenzen dem Ising-Exponenten  $\beta_{\text{Ising}} = \frac{1}{8}$  des zweidimensionalen Ising-Modells. Auch für die Korrelationsfunktionen war es möglich, entfernt vom kritischen Punkt, die Korrelationslängen zu bestimmen. Die Korrelationsfunktionen zeigten in diesem Bereich exponentielles Abklingen. Am kritischen Punkt zerfiel die longitudinale Korrelation mit  $\approx 1/\sqrt{r}$ . Dieser kritische Exponent  $\eta = \frac{1}{2}$  stimmt mit dem Ergebnis des Spin-3 Modells auf dem Hexagonalgitter, aber auch mit dem Ergebnis des Spin-2 auf dem Quadratgitter überein.

Man kann sich nun überlegen, ob eine andere Anordnung der Pfeile auf den freien Bonds zu weiteren Vertex-Zustands-Modellen führt. Tatsächlich ist eine jede beliebige Anordnung denkbar, allerdings müssen auch hier die Forderungen der Symmetrien (2.2) erfüllt werden, was dazu führt, dass nur noch hoch entartete Grundzustände möglich sind. Diese sollen hier nicht betrachtet werden. In diesem Sinne erschöpfen sich mit den beiden letzten Optimum-Grundzuständen aus Abschnitt 5.3.1 und 5.3.2 die Möglichkeiten Spin-2 Vertex-

Zustands-Modelle auf dem Hexagonalgitter zu konstruieren.<sup>9</sup>

---

<sup>9</sup>Für das in Kapitel 5.2.2 betrachtete Modell des Spin-3 auf dem Hexagonalgitter besteht natürlich auch die Möglichkeit einen Ansatz mit freien Bonds nachzuvollziehen. Dieser würde dann unter anderem auch zu Vertex-Zustands-Modelle führen, die eine ähnliche Struktur wie die des Spin-2 auf dem Hexagonalgitter aufweisen. Hierzu würden drei freie Bonds eingeführt werden müssen, die dann zu Grundmagnetisierungen von  $\pm\frac{1}{2}$ ,  $\pm\frac{3}{2}$  führen.

# 6. Zusammenfassung und Ausblick

## 6.1. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit habe ich das Konzept der *Optimum-Grundzustände* (Kapitel 2) vorgestellt und systematisch für Quantenspinsysteme in Dimensionen  $D > 1$  untersucht. Optimum-Grundzustände sind *globale Grundzustände*, die eine spezielle Struktur besitzen und aus *lokalen Grundzuständen* aufgebaut werden. In einer Dimension können diese mit Hilfe der *Matrix-Produkt-Grundzustände* (Kapitel 3.1) realisiert werden. In beliebiger Dimension kann bei der Konstruktion auf verallgemeinerte *Vertex-Zustands-Modelle* (Kapitel 3.3) zurückgegriffen werden. Im Gegensatz zu den Matrix-Produkt-Grundzuständen lassen sich für Vertex-Zustands-Modelle keine analytischen Ausdrücke für Erwartungswerte und Korrelationen finden. Um dennoch Aussagen über das  $T = 0$ -Verhalten der Vertex-Zustands-Modelle treffen zu können, kann man auf die Simulation der *korrespondierenden klassischen Vertex-Modelle* (Kapitel 3.4.1) der selben Dimension wie die Quanten-Systeme mittels *Monte-Carlo-Simulationen* (Kapitel 4) zurückgreifen. Hier bietet sich der *Metropolis-Algorithmus* (Kapitel 4.2) an. Die korrespondierenden klassischen Vertex-Modelle unterliegen der Beschränkung, dass nur Vertices mit gleicher Anzahl hereinlaufender Pfeile auf den *Bra-Bonds* und den *Ket-Bonds* ein nichtverschwindendes Gewicht zugeschrieben wird. Um dieser Einschränkung Rechnung zu tragen, habe ich einen *Loop-Algorithmus* (Kapitel 4.4.1) für das korrespondierende klassische Vertex-Modell implementiert.

Mit den zuvor zusammengefassten Methoden wurden in dieser Arbeit sechs unterschiedliche Spin-Modelle untersucht. Alle sechs Modelle lassen sich mit Vertex-Zustands-Modellen in zwei und in drei Dimensionen auf unterschiedlichen Gittern realisieren. Es wurde jedem Gitterplatz ein Spin zugeschrieben, der je nach Modell für jeden Gitterplatz einheitlich die Größe  $S = 2$  oder  $S = 3$  hatte. Dabei hat sich gezeigt, dass sowohl die Größe des Spins als auch das zu Grunde liegende Gitter und die Dimensionalität des Systems Einfluss auf die Eigenschaften haben.

Die wichtigsten Eigenschaften der Modelle sind in der Tabelle 6.1 zusammengefasst. Die Tabelle zeigt zunächst die Größe des Spins pro Gitterplatz an und geht auf Eigenschaften des Gitters ein, auf dem das Modell konstruiert wurde. Danach werden die resultierenden physikalischen Eigenschaften des jeweiligen Vertex-Zustands-Modells aufgelistet.

Spin: Gitter:	Spin-2 quadratisch	Spin-2 hexagonal	Spin-2 hexagonal	Spin-3 kubisch	Spin-3 hexagonal	Spin-3 dreieck
Dimension $D$	2	2	2	3	2	2
Zerlegung des Gitters:	bipartit	bipartit	bipartit	bipartit	bipartit	tripartit
Koordinations- zahl $z$	4	3	3	6	3	6
relevante Para- meter (Grund- zustand):	2 kont. & 1 dis- kreter	2 kont. & 1 diskre- ter	2 kont. & 1 diskre- ter	3 kont. & 1 diskre- ter	5 kont. & 1 diskre- ter	3 kont. & 1 diskre- ter
Ordnung:	antiferro- magnetisch	schwach antiferro- magnetisch	schwach ferro- magnetisch	antiferro- magnetisch	antiferro- magnetisch	antiferro- magnetisch
Entartung des GZ auf endl. Gitter:	einfach	zweifach	zweifach	einfach	einfach	einfach
Phasenüber- gang:	ja	nein	ja	ja	ja	ja
Ordnung des Phasenüber- gangs:	zweiter	-	zweiter	erster & u.U. zwei- ter	zweiter	zweiter
Ordnungs- parameter $\left\langle \frac{1}{N} \sum \mathbf{S}^z e^{i\vec{J}\cdot\vec{K}} \right\rangle$ , mit $\vec{K} =$	$2\pi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$2\pi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$2\pi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$2\pi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$2\pi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$2\pi \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
Entartung in der geordneten Phase:	zweifach	-	vierfach	zweifach	zweifach	sechsfach
kritischer Expo- nent $\beta$ :	$\approx \frac{1}{8}$	--	$\approx \frac{1}{8}$	-- & 0.05	$\approx \frac{1}{8}$	$\approx 0.07$
kritischer Expo- nent $\eta$ :	$\approx \frac{1}{2}$	--	$\approx \frac{1}{2}$	--	$\approx \frac{1}{2}$	--
Isotroper Punkt:	ja, VBS	nein	nein	ja, VBS	ja, VBS	ja, VBS
Kapitel:	5.1	5.3.1	5.3.2	5.2.1	5.2.2	5.2.3

Tabelle 6.1.: Tabellarische Übersicht über die wichtigsten Eigenschaften der untersuchten Modelle.

Für die Modelle, bei denen die Koordinationszahl  $z$  mit dem doppelten des Spins  $S$  übereinstimmt, besteht genau eine Möglichkeit, ein Vertex-Zustands-Modell auf dem zu Grunde liegenden Gitter zu konstruieren (Spin-2 auf dem Quadratgitter, Spin-3 auf dem kubischen



Gitter, Spin-3 auf dem Dreiecksgitter). Diese Aussage wird unmittelbar verständlich, wenn man sich die Konstruktion mittels je einem Spin- $\frac{1}{2}$  pro Bond vor Augen hält. In diesen Fällen stimmt bei geeigneter Wahl der Parameter der Grundzustand mit dem VBS-Grundzustand überein. Es ist daher nicht verwunderlich, dass diese Modelle in einem weiten Bereich des Parameterbereichs, in dem auch der VBS-Punkt liegt, exponentiell abfallende Korrelationsfunktionen  $\langle \mathbf{S}_i^z \mathbf{S}_r^z \rangle$  aufweisen, mit endlicher Korrelationslänge  $\xi_\ell$ . Die Phase ist ungeordnet und einfach, wie es von diesen VBS-Modelle her bekannt ist.

Die Modelle, bei denen  $z = 2S$  gilt und das zu Grunde liegende Gitter eine bipartite Unterteilung besitzt, zeigen einen Quantenphasenübergang in Abhängigkeit der Parameter in Dimensionen  $D \geq 2$ , der mit einem  $Z_2$ -Symmetriebruch einhergeht. Der Ordnungsparameter misst bei diesen Modellen im Wesentlichen die Untergittermagnetisierung in der geordneten Phase und liegt dann zwischen Null und  $S$ . Es lassen sich zwei Grenzfälle betrachten. Betrachtet man den Limes, in dem das Gewicht des Zustandes  $|0\rangle$  gegen unendlich geht, wird der globale Zustand  $|\Psi_0\rangle$  durch Zustände  $|0\rangle$  dominiert. Eine Untergittermagnetisierung tritt nicht auf. Geht hingegen das Gewicht des Zustands zum betragsmäßig größten  $\mathbf{S}^z$ -Eigenwert gegen unendlich, so wird der Grundzustand von einer Überlagerung zweier Néel-Zustände dominiert:  $|\Psi_0\rangle_{endlich} = |\text{Néel}\rangle_{\mathfrak{A}} \pm |\text{Néel}\rangle_{\mathfrak{B}}$ . Im thermodynamischen Limes, führt die Konkurrenz zwischen den beiden Néel-Zuständen zu einem spontanen Symmetriebruch für Dimensionen  $D \geq 2$ .

Lässt sich für das Gitter, auf dem das Vertex-Zustands-Modell konstruiert wird, keine bipartite Zerlegung finden, so führen die zuvor angestellten Überlegungen nicht weiter. Geht man aber von dem Hexagonalgitter aus, das über das Dreiecksgitter gelegt werden kann, wie es in Abbildung 5.31 gezeigt wurde, kann man auf diesem wieder die Überlegungen anstellen wie zuvor. Da sich in diesem Fall das Hexagonalgitter in drei unterschiedlichen Weisen über das Dreiecksgitter legen lässt, führt dies zu einer entsprechend höheren Entartung des Grundzustandes (hier  $2 \cdot 3 = 6$ ).

Für Modelle, bei denen in beschriebener Weise Koordinationszahl und Spingröße übereinstimmen ( $z = 2S$ ), lässt sich die Zahl der lokalen Zwei-Spin-Grundzustände mit  $4S^2$  und die der angeregten Zustände mit  $4S + 1$  angeben.

Stimmt ein Vielfaches der Koordinationszahl  $z$  mit dem Doppelten der Spingröße in der Form  $nz = 2S$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , überein, so kann man Vertex-Zustands-Modelle konstruieren, die  $n$  Bonds zwischen zwei Gitterplätzen besitzen. Jeder Bond trägt dabei Bondvariablen, die zwei Zustände annehmen können. Es lässt sich eine Uminterpretation zu einfachen Bonds finden mit Bondvariablen, die mehr als zwei Einstellmöglichkeiten tragen.

Auch bei diesen Vertex-Zustands-Modellen kann man einen VBS-Punkt im Parameterraum angeben (vgl. Spin-3 auf dem Hexagonalgitter). Wieder gilt, dass der Grundzustand in der Phase, in dem der VBS-Punkt zu finden ist, einfach ist und ungeordnet. Die Korrelationsfunktionen fallen in dieser Phase exponentiell ab. Die bisher angestellten Überlegungen zum

Phasenübergang gelten auch hier.

Gilt allgemein, dass der Spin die Relation  $S \geq nz/2$  erfüllt, so lassen sich eine Vielzahl von Vertex-Zustands-Modellen konstruieren. Wie in dem Fall der Spin-2 Modelle auf dem Hexagonalgitter lassen sich dann *freie Bonds* einführen.

Ob ein Phasenübergang im Parameterraum dieser Modelle gefunden werden kann, hängt dabei von der Konstruktion ab. Wie das Beispiel des Spin-2 Schwachen-Antiferromagneten auf dem Hexagonalgitter zeigt, ist auch auf einem bipartiten Gitter nicht unbedingt von einem Phasenübergang auszugehen. In diesem Fall wurde eine  $Z_2$ -Symmetrie bereits bei der Konstruktion des Grundzustandes gebrochen. Der Schwache-Ferromagnet oder Ferromagnet hingegen zeigt einen Phasenübergang. Die freien Bonds können als eine Grundmagnetisierung betrachtet werden, die einen Referenzzustand bilden. Entscheidend für den Phasenübergang ist dann unter anderem die Symmetrie dieser Referenzzustände.

Alle untersuchten Modelle zeigten in der ungeordneten Phase exponentiell im Abstand  $r$  abklingende longitudinale Korrelationsfunktionen  $\langle \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_r^z \rangle$ . Innerhalb der Phase war die Korrelationslänge  $\xi_\ell$  endlich. Lag in dem Parameterbereich der Modelle eine geordnete Phase vor, so fielen die longitudinalen Korrelationsfunktionen  $\langle \mathbf{S}_1^z \mathbf{S}_r^z \rangle$  exponentiell auf einen endlichen Wert ab, der dem Produkt der Untergittermagnetisierungen am Gitterplatz 1 und am Gitterplatz  $r$  entspricht.

Für die zweidimensionalen Modelle, die einen Phasenübergang zeigen, konnte ich einen Phasenübergang zweiter Ordnung nachweisen. Ging dieser Phasenübergang mit einer Brechung einer  $Z_2$ -Symmetrie einher, so konnte ich den kritischen Exponenten  $\beta$  zu  $\beta \approx \frac{1}{8}$  bestimmen. Dieser Exponent stimmt mit dem kritischen Exponenten des zweidimensionalen Ising-Übergangs überein. Die longitudinalen Korrelationsfunktionen zerfielen für diese Modelle am kritischen Punkt algebraisch mit einem kritischen Exponenten  $\eta \approx \frac{1}{2}$ . Dieser Exponent entspricht gerade dem Doppelten des Ising-Übergangs in zwei Dimensionen. Dies konnte aus den Überlegungen zum Acht-Vertex-Modell verstanden werden.

Das Spin-3-Modell auf dem kubischen Gitter zeigte kein einheitliches Verhalten in Bezug auf den zu beobachtenden Phasenübergang. In Teilen des Parameterraumes konnte ich eindeutig einen Phasenübergang erster Ordnung nachweisen, der von der zuvor beschriebenen ungeordneten Phase hin zu einer geordneten Phase verlief. In bestimmten Bereichen des Parameterraumes konnte ich die Ordnung des Phasenübergangs nicht eindeutig bestimmen. Hier kann es sich sowohl um einen Phasenübergang handeln, der schwach erster oder zweiter Ordnung ist. Ist der Phasenübergang zweiter Ordnung, so kann man einen trikritischen Punkt in dem Modell ausmachen. Dieses Szenario scheint nach bisherigem Wissensstand wahrscheinlicher.

Alle hier vorgestellten Spin-2 Modelle befinden sich auf zweidimensionalen Gittern (Hexagonalgitter  $z = 3$  bzw. Quadratgitter  $z = 4$ ). Es zeigt das Modell des schwachen Antifer-

romagneten auf dem Hexagonalgitter keinen Phasenübergang. Das Spin-2 Modell auf dem Quadratgitter zeigt einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Man erkennt also, dass trotz der lokalen Betrachtungsweise der Optimum-Grundzustände die Gitterstruktur und nicht nur die Dimensionalität des Gitters einen Einfluss auf die Eigenschaften der Modelle hat. Genauer gesagt ist das Verhältnis von der Größe des Spins  $S$  zur Koordinationszahl  $z$  des Gitters und die Zerlegung in Untergitter wesentlich.

## 6.2. Ausblick

Die umfassenden Untersuchungen von Vertex-Zustands-Modellen auf unterschiedlichen Gittern geben einen systematischen Einblick in die Vielfalt der auftretenden physikalischen Eigenschaften dieser Modelle. Eine der noch ungeklärten Fragen dieser Arbeit ist die nach der Ordnung des Phasenübergangs des Spin-3 Modells auf dem kubischen Gitter in dem diskutierten Parameterbereich.

Der vielversprechendste Ansatz ist nach meiner Auffassung die Implementierung von Cluster-Algorithmen zur Untersuchung dieses Bereichs.

In dem Fall, dass sich ein Phasenübergang zweiter Ordnung bestätigen würde, würde ein Finite-size-scaling neben dem kritischen Exponenten  $\beta$  auch den kritischen Exponenten  $\nu$  bestimmen lassen. Auch der kritische Exponent  $\eta$  wäre damit zugänglich. Diese würden das Einstufen des Phasenübergangs in die Klassen der bereits bekannten Phasenübergänge erleichtern. Mit Hilfe eines Cluster-Algorithmus für dieses Modell scheint es dann auch sinnvoll, entlang der Phasengrenze des Übergangs erster Ordnung zum trikritischen Punkt zu gelangen. Eine Analyse der Korrelationslänge entlang der Phasenübergangslinie in Abhängigkeit zur Entfernung zum trikritischen Punkt kann Aufschluß über den kritischen Punkt selber geben.

Im generische Fall einer Energielücke innerhalb der Phasen ist zu erwarten, dass sich Eigenschaften des Modells bei kleinen Störungen qualitativ nicht ändern. Es besteht nun die Herausforderung, eine systematische Aussage darüber treffen zu können, in wieweit die Eigenschaften von Vertex-Zustands-Modellen auf Parameterbereiche außerhalb der Gültigkeit dieser Modelle noch bestehen bleiben. Kleine Störungen in dem Hamilton-Operator der Vertex-Zustands-Modelle ändern daher nichts an den Grundzustands-Eigenschaften. Eine solche Systematik zeigt die Relevanz dieser Modellklasse in Bezug auf physikalische Systeme.

Nahe eines Quantenphasenübergangs zweiter Ordnung existieren jedoch niederenergetische Anregungen und man kann sich fragen, ob kleine Störungen der Systeme mit Optimum-Grundzuständen am Quantenphasenübergang zweiter Ordnung „relevant“ sind und sich die Natur des Quantenphasenübergangs ändert. Im besonderen Interesse stehen dabei die bestimmten kritischen Exponenten und bei dem Vertex-Zustands-Modellen auf dem kubischen Gitter auch die Ordnung des Phasenübergangs. Fradkin *et al.* [Ardonne u. a. 2004, Fradkin

u. a. 2004] konnten diese Frage für das sogenannte Quantendimermodell lösen, für das bei geeigneter Wahl der Kopplungsparameter ein Optimum-Grundzustand existiert [Rokhsar und Kivelson 1988]. Dies gelang durch das Aufstellen einer effektiven Feldtheorie für dieses Modell und der darauffolgenden Symmetrieanalyse der möglichen Störungen und der Bestimmung von deren Relevanz.

Ein weiterer interessanter Aspekt kann in der Bestimmung von Variationszuständen bestehen, die niedrigliegende Anregungen der betrachteten Vertex-Zustands-Modelle beschreiben. Insbesondere könnte man damit versuchen, Aussagen über eine Energielücke zu treffen.

Die mittlerweile etablierte Idee der Optimum-Grundzustände erlaubt es, schnell auf neue Fragestellungen zu reagieren, die aus dem experimentellen Umfeld an die Theorie herangetragen werden, und eine Antwort darauf zu geben, ob eine Modellbildung mittels Vertex-Zustands-Modelle oder durch Matrix-Produkt-Grundzustände machbar ist.

Zum Zeitpunkt, als Haldane seine Vermutung [Haldane 1983a, Haldane 1983b] äußerte, lag noch keine experimentelle Realisation von Substanzen vor, die seine Aussagen hätte bestätigen können. Heute können wir auf eine große Anzahl physikalischer Substanzen zurückgreifen, die dem Haldane-Szenario entsprechen.

Es besteht so die Hoffnung, dass es von experimenteller Seite möglich ist, Substanzen zu synthetisieren, deren modellhafte Beschreibung mit Vertex-Zustands-Modellen möglich ist. Da es prinzipiell möglich ist, Substanzen mit hohem Spin zu konstruieren, zeigt die Substanz  $RbMnCl_3$ , die sich durch Spins der Größe  $S = 5/2$  angeordnet auf einem Hexagonalgitter mit antiferromagnetischer Ordnung beschreiben lässt [Bogdanov und Dragunov 1998]. Die Hoffnung scheint daher berechtigt, zum Beispiel Substanzen synthetisieren zu können, die eine Realisation der Spin-2-Modelle auf dem Quadratgitter darstellen.

Wie in der Arbeit dargestellt wurde, lassen sich die hier vorgestellten Monte-Carlo-Algorithmen nur auf Modelle mit positiven Gewichten anwenden. Da aber auch Modelle mit negativen Gewichten (insbesondere für alle Modelle mit  $\sigma = -1$ ) physikalische Relevanz besitzen, besteht das Interesse an einer Methode, diese zu untersuchen. Hier kann man an eine geeignete Abbildung der negativen Gewichte auf positive denken oder aber auch an die Anwendung neuer DMRG-Algorithmen [Nishino 1995] auf die Modelle.

# A. Lokale Zwei-Spin-Zustände

Wie im Kapitel 2.2 bereits erläutert, soll der globale Hamilton-Operator gewissen Symmetrien genügen. Diese Symmetrien sind gängig für physikalische Systeme:

i. *Homogenität im (Orts-) Raum*: diskrete Translationsinvarianz des zu Grunde liegenden Gitters,

ii. *Paritätsinvarianz*:

$$[\mathbf{h}_{ij}, \mathbf{P}_{ij}] = 0 \leftrightarrow \text{Eigenwert: } \mathbf{p}, \quad (\text{A.1})$$

iii. *Rotationsinvarianz* in der  $(x, y)$ -Ebene des Spin-Raumes:  $SO(2)$ -Symmetrie,

$$[\mathbf{h}_{ij}, \mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z] = 0 \leftrightarrow \text{Eigenwert: } \mathbf{m}, \quad (\text{A.2})$$

iv. *Zeitumkehrinvarianz/ Spin-Flip-Invarianz*:  $\lambda$ -Parameter zu festen  $\mathbf{p}$ , selben Index  $i$  und betraglich gleicher Magnetisierung  $\mathbf{m}$  sind identisch.

Diesen Symmetrien sollen die Hamilton-Operatoren genügen. Während der ersten Symmetrie Rechnung getragen wird, indem alle lokalen Hamilton-Operatoren identisch gewählt werden (sie sollen nur auf unterschiedliche Gitterplätze wirken), wirkt sich die letzte Symmetrie auf die Spektral- oder  $\lambda$ -Parameter aus und verringert deren Anzahl. Um den Symmetrien *ii* und *iii* zu genügen, kann man die lokalen Wechselwirkungen als Summe lokaler Projektionsoperatoren  $\mathbf{h}_{ij} = \sum |v_x\rangle_{ij} \langle v_x|_{ij}$  schreiben, deren Summanden aus Zwei-Spin-Zuständen bestehen, die sich nach den Quantenzahlen  $\mathbf{m}$  und  $\mathbf{p}$  ordnen lassen. In den nächsten beiden Abschnitten sind die lokalen Zwei-Spin-Zustände für zwei Spin-3 bzw. zwei Spin-2 aufgelistet.

### A.1. Lokale Zwei-Spin-Zustände für Spin-3

In diesem Abschnitt möchte ich die lokalen Zwei-Spin-Zustände aufführen, die obigen Symmetrien genügen sollen. Hierzu werden die entsprechenden Zwei-Spin-Zustände der Spin-3 Modelle nach den Quantenzahlen der Magnetisierung  $m$  und denen der Parität  $p$  geordnet. Es tritt unter Umständen ein Laufindex  $i$  hinzu.

$$\begin{aligned}
m = 6, p = 1 : & \quad |v_6\rangle = |3, 3\rangle, & (A.3) \\
m = -6, p = 1 : & \quad |v_{-6}\rangle = |\bar{3}, \bar{3}\rangle \\
m = 5, & \quad |3, 2\rangle, \quad |2, 3\rangle \rightarrow \\
p = 1 : & \quad |v_5^+\rangle = |3, 2\rangle_+ := |3, 2\rangle + |2, 3\rangle, \\
p = -1 : & \quad |v_5^-\rangle = |3, 2\rangle_- := |3, 2\rangle - |2, 3\rangle \\
m = -5, & \quad |\bar{3}, \bar{2}\rangle, \quad |\bar{2}, \bar{3}\rangle \rightarrow \\
p = 1 : & \quad |v_{-5}^+\rangle = |\bar{3}, \bar{2}\rangle_+, \\
p = -1 : & \quad |v_{-5}^-\rangle = |\bar{3}, \bar{2}\rangle_- \\
m = 4, & \quad |2, 2\rangle, \quad |3, 1\rangle, \quad |1, 3\rangle \rightarrow \\
p = 1 : & \quad |v_{41}^+\rangle = a_1 |2, 2\rangle + |3, 1\rangle_+, \\
& \quad |v_{42}^+\rangle = 2 |2, 2\rangle - a_1 |3, 1\rangle_+, \\
p = -1 : & \quad |v_4^-\rangle = |3, 1\rangle_- \\
m = -4, & \quad |\bar{2}, \bar{2}\rangle, \quad |\bar{3}, \bar{1}\rangle, \quad |\bar{1}, \bar{3}\rangle \rightarrow \\
p = 1 : & \quad |v_{-41}^+\rangle = a_1 |\bar{2}, \bar{2}\rangle + |\bar{3}, \bar{1}\rangle_+, \\
& \quad |v_{-42}^+\rangle = 2 |\bar{2}, \bar{2}\rangle - a_1 |\bar{3}, \bar{1}\rangle_+, \\
p = -1 : & \quad |v_{-2}^-\rangle = |\bar{2}, 0\rangle_- \\
m = 3, & \quad |1, 2\rangle, \quad |2, 1\rangle, \quad |3, 0\rangle, \quad |0, 3\rangle \rightarrow \\
p = 1 : & \quad |v_{31}^+\rangle = a_2 |2, 1\rangle_+ + |3, 0\rangle_+, \\
& \quad |v_{32}^+\rangle = |2, 1\rangle_+ - a_2 |3, 0\rangle_+, \\
p = -1 : & \quad |v_{31}^-\rangle = a_3 |2, 1\rangle_- + |3, 0\rangle_-, \\
& \quad |v_{32}^-\rangle = |2, 1\rangle_- - a_3 |3, 0\rangle_- \\
m = -3, & \quad |\bar{1}, \bar{2}\rangle, \quad |\bar{2}, \bar{1}\rangle, \quad |\bar{3}, 0\rangle, \quad |0, \bar{3}\rangle \rightarrow \\
p = 1 : & \quad |v_{-31}^+\rangle = a_2 |\bar{2}, \bar{1}\rangle_+ + |\bar{3}, 0\rangle_+, \\
& \quad |v_{-32}^+\rangle = |\bar{2}, \bar{1}\rangle_+ - a_2 |\bar{3}, 0\rangle_+, \\
p = -1 : & \quad |v_{-31}^-\rangle = a_3 |\bar{2}, \bar{1}\rangle_- + |\bar{3}, 0\rangle_-, \\
& \quad |v_{-32}^-\rangle = |\bar{2}, \bar{1}\rangle_- - a_3 |\bar{3}, 0\rangle_-
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{m} = 2, & \quad |1, 1\rangle, |2, 0\rangle, |0, 2\rangle, |3, \bar{1}\rangle, |\bar{1}, 3\rangle \rightarrow \\
\mathbf{p} = 1 : & \quad |v_{21}^+\rangle = a_5 |1, 1\rangle + a_4 |2, 0\rangle_+ + |3, \bar{1}\rangle_+, \\
& \quad |v_{22}^+\rangle = 2 \frac{1 + a_4 a_6}{a_5} |1, 1\rangle - a_6 |2, 0\rangle_+ - |2, \bar{1}\rangle_+, \\
& \quad |v_{23}^+\rangle = -\frac{2a_5(a_4 - a_6)}{2a_4 + (2a_4^2 + a_5^2)a_6} |1, 1\rangle \\
& \quad \quad + \frac{2 + a_5^2 + 2a_4 a_6}{2a_4 + (2a_4^2 + a_5^2)a_6} |2, 0\rangle_+ - |3, \bar{1}\rangle_+, \\
\mathbf{p} = -1 : & \quad |v_{21}^-\rangle = a_7 |2, 0\rangle_- + |3, \bar{1}\rangle_-, \\
& \quad |v_{22}^-\rangle = |2, 0\rangle_- - a_7 |3, \bar{1}\rangle_-, \\
\mathbf{m} = -2, & \quad |\bar{1}, \bar{1}\rangle, |\bar{2}, 0\rangle, |0, \bar{2}\rangle, |\bar{3}, 1\rangle, |1, \bar{3}\rangle \rightarrow \\
\mathbf{p} = 1 : & \quad |v_{-21}^+\rangle = a_5 |\bar{1}, \bar{1}\rangle + a_4 |\bar{2}, 0\rangle_+ + |\bar{3}, 1\rangle_+, \\
& \quad |v_{-22}^+\rangle = 2 \frac{1 + a_4 a_6}{a_5} |\bar{1}, \bar{1}\rangle - a_6 |\bar{2}, 0\rangle_+ - |\bar{3}, 1\rangle_+, \\
& \quad |v_{-23}^+\rangle = -\frac{2a_5(a_4 - a_6)}{2a_4 + (2a_4^2 + a_5^2)a_6} |\bar{1}, \bar{1}\rangle \\
& \quad \quad + \frac{2 + a_5^2 + 2a_4 a_6}{2a_4 + (2a_4^2 + a_5^2)a_6} |\bar{2}, 0\rangle_+ - |\bar{3}, 1\rangle_+, \\
\mathbf{p} = -1 : & \quad |v_{-21}^-\rangle = a_7 |\bar{2}, 0\rangle_- + |\bar{3}, 1\rangle_-, \\
& \quad |v_{-22}^-\rangle = |\bar{2}, 0\rangle_- - a_7 |\bar{3}, 1\rangle_-, \\
\mathbf{m} = 1, & \quad |1, 0\rangle, |0, 1\rangle, |2, \bar{1}\rangle, |\bar{1}, 2\rangle, |3, \bar{2}\rangle, |\bar{2}, 3\rangle \rightarrow \\
\mathbf{p} = 1 : & \quad |v_{11}^+\rangle = a_9 |1, 0\rangle_+ + a_8 |2, \bar{1}\rangle_+ + |3, \bar{2}\rangle_+, \\
& \quad |v_{12}^+\rangle = \frac{1 + a_8 a_{10}}{a_9} |1, 0\rangle_+ - a_{10} |2, \bar{1}\rangle_+ - |3, \bar{2}\rangle_+, \\
& \quad |v_{13}^+\rangle = -\frac{2a_9(a_8 - a_{10})}{2a_8 + (2a_8^2 + a_9^2)a_{10}} |1, 0\rangle_+ \\
& \quad \quad + \frac{2 + a_9^2 + 2a_8 a_{10}}{2a_8 + (2a_8^2 + a_9^2)a_{10}} |2, \bar{1}\rangle_+ - |3, \bar{2}\rangle_+, \\
\mathbf{p} = -1 : & \quad |v_{11}^-\rangle = a_{12} |1, 0\rangle_- + a_{11} |2, \bar{1}\rangle_- + |3, \bar{2}\rangle_-, \\
& \quad |v_{12}^-\rangle = \frac{1 + a_{11} a_{13}}{a_{12}} |1, 0\rangle_- - a_{13} |2, \bar{1}\rangle_- - |3, \bar{2}\rangle_-, \\
& \quad |v_{13}^-\rangle = -\frac{2a_{12}(a_{11} - a_{13})}{2a_{11} + (2a_{11}^2 + a_{12}^2)a_{13}} |1, 0\rangle_- \\
& \quad \quad + \frac{2 + a_{12}^2 + 2a_{11} a_{13}}{2a_{11} + (2a_{11}^2 + a_{12}^2)a_{13}} |2, \bar{1}\rangle_- - |3, \bar{2}\rangle_-,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{m} = -1, & \quad |\bar{1}, 0\rangle, \quad |0, \bar{1}\rangle, \quad |\bar{2}, 1\rangle, \quad |1, \bar{2}\rangle, \quad |\bar{3}, 2\rangle, \quad |2, \bar{3}\rangle \rightarrow \\
\mathbf{p} = 1 : & \quad |v_{-11}^+\rangle = a_9 |\bar{1}, 0\rangle_+ + a_8 |\bar{2}, 1\rangle_+ + |\bar{3}, 2\rangle_+, \\
& \quad |v_{-12}^+\rangle = 2 \frac{1 + a_8 a_{10}}{a_9} |\bar{1}, 0\rangle_+ - a_{10} |\bar{2}, 1\rangle_+ - |\bar{3}, 2\rangle_+, \\
& \quad |v_{-13}^+\rangle = -\frac{2a_9(a_8 - a_{10})}{2a_8 + (2a_8^2 + a_9^2)a_{10}} |\bar{1}, 0\rangle_+ \\
& \quad \quad + \frac{2 + a_9^2 + 2a_8 a_{10}}{2a_8 + (2a_8^2 + a_9^2)a_{10}} |\bar{2}, 1\rangle_+ - |\bar{3}, 2\rangle_+, \\
\mathbf{p} = -1 : & \quad |v_{-11}^-\rangle = a_{12} |\bar{1}, 0\rangle_- + a_{11} |\bar{2}, 1\rangle_- + |\bar{3}, 2\rangle_-, \\
& \quad |v_{-12}^-\rangle = 2 \frac{1 + a_{11} a_{13}}{a_{12}} |\bar{1}, 0\rangle_- - a_{13} |\bar{2}, \bar{1}\rangle_- - |\bar{3}, 2\rangle_-, \\
& \quad |v_{-13}^-\rangle = -\frac{2a_{12}(a_{11} - a_{13})}{2a_{11} + (2a_{11}^2 + a_{12}^2)a_{13}} |\bar{1}, 0\rangle_- \\
& \quad \quad + \frac{2 + a_{12}^2 + 2a_{11} a_{13}}{2a_{11} + (2a_{11}^2 + a_{12}^2)a_{13}} |\bar{2}, 1\rangle_- - |\bar{3}, 2\rangle_-, \\
\mathbf{m} = 0, & \quad |0, 0\rangle, \quad |1, \bar{1}\rangle, \quad |\bar{1}, 1\rangle, \quad |2, \bar{2}\rangle, \quad |\bar{2}, 2\rangle, \quad |3, \bar{3}\rangle, \quad |\bar{3}, 3\rangle \rightarrow \\
\mathbf{p} = 1 : & \quad |v_{01}^+\rangle = a_{16} |0, 0\rangle + a_{15} |1\bar{1}\rangle_+ + a_{14} |2, \bar{2}\rangle_+ + |3, \bar{3}\rangle_+, \\
& \quad |v_{02}^+\rangle = 2 \frac{1 + a_{14} a_{17} + a_{15} a_{18}}{a_{16}} |0, 0\rangle - a_{18} |1, \bar{1}\rangle_+ - a_{17} |2, \bar{2}\rangle_+ - |3, \bar{3}\rangle_+, \\
& \quad |v_{03}^+\rangle = A |0, 0\rangle + B |1, \bar{1}\rangle_+ + C |2, \bar{2}\rangle_+ - |3, \bar{3}\rangle_+, \\
& \quad |v_{04}^+\rangle = -a_{16} |0, 0\rangle + D |1, \bar{1}\rangle_+ + E |2, \bar{2}\rangle_+ - |3, \bar{3}\rangle_+ \\
\mathbf{p} = -1 : & \quad |v_{01}^-\rangle = a_{21} |1\bar{1}\rangle_{-1} + a_{20} |2, \bar{2}\rangle_- + |3, \bar{3}\rangle_-, \\
& \quad |v_{02}^-\rangle = \frac{(1 + a_{20} a_{22})}{a_{21}} |1, \bar{1}\rangle_{-1} - a_{22} |2, \bar{2}\rangle_- - |3, \bar{3}\rangle_-, \\
& \quad |v_{03}^-\rangle = -\frac{a_{21}(a_{20} - a_{22})}{a_{20} + (a_{20}^2 + a_{21}^2)a_{22}} |1, \bar{1}\rangle_{-1} + \frac{1 + a_{21}^2 + a_{20} a_{22}}{a_{20} + (a_{20}^2 + a_{21}^2)a_{22}} |2, \bar{2}\rangle_- - |3, \bar{3}\rangle_-
\end{aligned}$$

$$A := -\frac{2a_{16}((a_{14} - a_{17})a_{17} + (a_{15} - a_{18})a_{18})}{a_{17}(2a_{14} + (2a_{14}^2 + a_{16}^2)a_{17}) + 2a_{15}(1 + 2a_{14}a_{17})a_{18} + (2a_{15}^2 + a_{16}^2)a_{18}^2} \quad (\text{A.4})$$

$$B := \frac{a_{18}(2 + a_{16}^2 + 2a_{14}a_{17} + 2a_{15}a_{18})}{a_{17}(2a_{14} + (2a_{14}^2 + a_{16}^2)a_{17}) + 2a_{15}(1 + 2a_{14}a_{17})a_{18} + (2a_{15}^2 + a_{16}^2)a_{18}^2}$$

$$C := \frac{a_{17}(2 + a_{16}^2 + 2a_{14}a_{17} + 2a_{15}a_{18})}{a_{17}(2a_{14} + (2a_{14}^2 + a_{16}^2)a_{17}) + 2a_{15}(1 + 2a_{14}a_{17})a_{18} + (2a_{15}^2 + a_{16}^2)a_{18}^2}$$

$$D := \frac{(2 + 2a_{14}^2 + a_{16}^2)a_{17} + 2a_{14}a_{15}a_{18}}{2a_{15}a_{17} - 2a_{14}a_{18}}$$

$$E := \frac{2a_{14}a_{15}a_{17} + (2 + 2a_{15}^2 + a_{16}^2)a_{18}}{-2a_{15}a_{17} + 2a_{14}a_{18}}$$



## A.2. Lokale Zwei-Spin-Zustände für Spin-2

Analog zu den Überlegungen der Zwei-Spin-Zustände der Spin-3 Modelle lassen sich auch die relevanten Zwei-Spin-Zustände der Spin-2 Modelle anordnen.

$$\begin{aligned}
 m = 4, p = 1 : & \quad |v_4\rangle = |2, 2\rangle, & (A.5) \\
 m = -4, p = 1 : & \quad |v_{-4}\rangle = |\bar{2}, \bar{2}\rangle \\
 m = 3, & \quad |2, 1\rangle, \quad |1, 2\rangle \rightarrow \\
 p = 1 : & \quad |v_3^+\rangle = |2, 1\rangle_+ := |2, 1\rangle + |1, 2\rangle, \\
 p = -1 : & \quad |v_3^-\rangle = |2, 1\rangle_- := |2, 1\rangle - |1, 2\rangle \\
 m = -3, & \quad |\bar{2}, \bar{1}\rangle, \quad |\bar{1}, \bar{2}\rangle \rightarrow \\
 p = 1 : & \quad |v_{-3}^+\rangle = |\bar{2}, \bar{1}\rangle_+, \\
 p = -1 : & \quad |v_{-3}^-\rangle = |\bar{2}, \bar{1}\rangle_- \\
 m = 2, & \quad |1, 1\rangle, \quad |2, 0\rangle, \quad |0, 2\rangle \rightarrow \\
 p = 1 : & \quad |v_{21}^+\rangle = a_1 |1, 1\rangle + |2, 0\rangle_+, \\
 & \quad |v_{22}^+\rangle = 2 |1, 1\rangle - a_1 |2, 0\rangle_+, \\
 p = -1 : & \quad |v_{21}^-\rangle = |2, 0\rangle_- \\
 m = -2, & \quad |\bar{1}, \bar{1}\rangle, \quad |\bar{2}, \bar{0}\rangle, \quad |0, \bar{2}\rangle \rightarrow \\
 p = 1 : & \quad |v_{-21}^+\rangle = a_1 |\bar{1}, \bar{1}\rangle + |\bar{2}, \bar{0}\rangle_+, \\
 & \quad |v_{-22}^+\rangle = 2 |\bar{1}, \bar{1}\rangle - a_1 |\bar{2}, \bar{0}\rangle_+, \\
 p = -1 : & \quad |v_{-21}^-\rangle = |\bar{2}, \bar{0}\rangle_- \\
 m = 1, & \quad |0, 1\rangle, \quad |1, 0\rangle, \quad |2, \bar{1}\rangle, \quad |\bar{1}, 2\rangle \rightarrow \\
 p = 1 : & \quad |v_{11}^+\rangle = a_2 |1, 0\rangle_+ + |2, \bar{1}\rangle_+, \\
 & \quad |v_{12}^+\rangle = |1, 0\rangle_+ - a_2 |2, \bar{1}\rangle_+, \\
 p = -1 : & \quad |v_{11}^-\rangle = a_3 |1, 0\rangle_- + |2, \bar{1}\rangle_-, \\
 & \quad |v_{12}^-\rangle = |1, 0\rangle_- - a_3 |2, \bar{1}\rangle_- \\
 m = -1, & \quad |0, \bar{1}\rangle, \quad |\bar{1}, 0\rangle, \quad |\bar{2}, 1\rangle, \quad |1, \bar{2}\rangle \rightarrow \\
 p = 1 : & \quad |v_{-11}^+\rangle = a_2 |\bar{1}, 0\rangle_+ + |\bar{2}, 1\rangle_+, \\
 & \quad |v_{-12}^+\rangle = |\bar{1}, 0\rangle_+ - a_2 |\bar{2}, 1\rangle_+, \\
 p = -1 : & \quad |v_{-11}^-\rangle = a_3 |\bar{1}, 0\rangle_- + |\bar{2}, 1\rangle_-, \\
 & \quad |v_{-12}^-\rangle = |\bar{1}, 0\rangle_- - a_3 |\bar{2}, 1\rangle_-
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{m} = 0, & \quad |0, 0\rangle, \quad |1, \bar{1}\rangle, \quad |\bar{1}, 1\rangle, \quad |2, \bar{2}\rangle, \quad |\bar{2}, 2\rangle \rightarrow \\
\mathbf{p} = 1: & \quad |v_{01}^+\rangle = a_5 |0, 0\rangle + a_4 |1, \bar{1}\rangle_+ + |2, \bar{2}\rangle_+, \\
& \quad |v_{02}^+\rangle = 2 \frac{1 + a_4 a_6}{a_5} |0, 0\rangle - a_6 |1, \bar{1}\rangle_+ - |2, \bar{2}\rangle_+, \\
& \quad |v_{03}^+\rangle = -\frac{2a_5(a_4 - a_6)}{2a_4 + (2a_4^2 + a_5^2)a_6} |0, 0\rangle \\
& \quad \quad + \frac{2 + a_5^2 + 2a_4 a_6}{2a_4 + (2a_4^2 + a_5^2)a_6} |1, \bar{1}\rangle_+ - |2, \bar{2}\rangle_+, \\
\mathbf{p} = -1: & \quad |v_{01}^-\rangle = a_7 |1, \bar{1}\rangle_- + |2, \bar{2}\rangle_-, \\
& \quad |v_{02}^-\rangle = |1, \bar{1}\rangle_- - a_7 |2, \bar{2}\rangle_-.
\end{aligned}$$

## B. Abhängigkeiten der Superpositionsparameter

Für das Vertex-Zustands-Modell aus Abschnitt 5.2.2 des Spin-3-Modells auf dem Hexagonalgitter müssen für die Superpositionsparameter Bedingungen erfüllt sein, damit die angegebenen lokalen Zustände auch Eigenzustände sind. Folgende Bedingungen müssen erfüllt sein:

$$a_1 = \frac{\sigma B^2}{AC_2}, \quad (B.1)$$

$$a_2 = \frac{B(C_2 + \sigma C_1)}{AD_1}, \quad a_3 = \frac{B(\sigma C_1 - C_2)}{AD_1}, \quad (B.2)$$

$$a_4 = -\frac{\sigma AC_1^2 C_2}{B(C_1^2 - 2C_2^2)D_1}, \quad a_5 = \frac{2AC_2}{C_1^2 - 2C_2^2}, \quad (B.3)$$

$$a_7 = \frac{\sigma BD_1}{AC_2}, \quad (B.4)$$

$$a_8 = \frac{A(\sigma C_1 + C_2)}{C_2^2 - C_1^2 - \sigma C_1 C_2}, \quad a_9 = \frac{ABC_2}{D_1(C_1^2 - C_2^2 + C_1 C_2 \sigma)}, \quad (B.5)$$

$$a_{11} = \frac{\sigma AC_1 - AC_2}{C_2^2 - C_1^2 + \sigma C_1 C_2}, \quad a_{12} = \frac{ABC_2}{D_1(C_1^2 - C_2^2 - \sigma C_1 C_2)} \quad (B.6)$$

$$a_{14} = \frac{A^2(C_2 - 2C_2^2)}{B^2(3C_2^2 - C_1^2)\sigma}, \quad a_{15} = \frac{A^2}{3C_2^2 - C_1^2} \quad (B.7)$$

$$a_{16} = \frac{2A^2 C_2^2}{(3C_2^2 - C_1^2)D_1^2 \sigma}, \quad a_{20} = \frac{A^2 C_1^2}{B^2(C_1^2 - C_2^2)\sigma} \quad (B.8)$$

$$a_{21} = \frac{A^2}{(C_1^2 - C_2^2)}, \quad (B.9)$$

Sind diese Bedingungen erfüllt, so sind die angegebenen lokalen Zwei-Spin-Zustände Eigenzustände des lokalen Hamiltonian mit Eigenwert Null.

Es sei hier noch bemerkt, dass nicht alle Superpositionsparameter  $a_i$  des ursprünglichen Hamiltonian durch die Modellparameter  $A, B, C_1, C_2, D_1, D_2 = D_1 \frac{C_1}{C_2}$  festgelegt sind. Diese tauchen aber nicht in den lokalen Wechselwirkungen auf, da die entsprechenden Spektralparameter  $\lambda_j$  dann zu Null gewählt worden sind.

Wie obige Bedingungen erkennen lassen, sind mit den Bedingungen nicht alle Fälle abgedeckt. Für die Wahl  $C_1 = C_2$  zum Beispiel wird der Nenner in den Bedingungen für  $a_{20}$

und  $a_{21}$  Null. Ähnliche Fälle treten für andere Bedingungen auf. Diese Fälle sind damit aber nicht ausgeschlossen, vielmehr muss man dann eine andere Wahl treffen, welche der  $\lambda$ -Parameter zu Null und welche größer Null angenommen werden sollen und neue Bedingungen müssen erfüllt sein.

Dies ist in jedem Fall möglich, soll aber hier nicht aufgelistet werden, da keine neue Erkenntnis in den Bedingungen zu finden ist.

Generell soll aber der Parameterrand, der dadurch gekennzeichnet ist, dass ein Parameter gleich Null oder unendlich ist, ausgeschlossen bleiben.

## C. Entartung der Grundzustände

Der in Kapitel 5.1 betrachtete Grundzustand ist auf einem endlichen Gitter, das periodisch geschlossen ist, einfach. Der Beweis soll hier skizziert werden. Die Beweisskizze ist dabei exemplarisch, sodass auch die angegebene Entartung der anderen Modelle leicht eingesehen werden kann, indem man den Beweis auf das entsprechende Gitter und auf das entsprechende Modell überträgt.

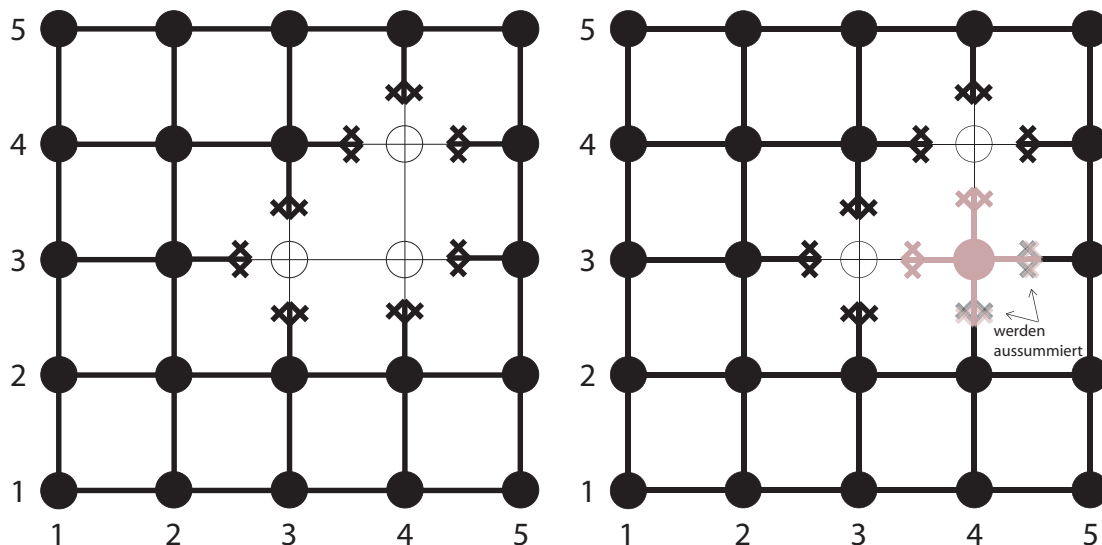
Der Beweis ist dem Beweis von H.Niggemann *et al.* [Niggemann u. a. 1997] nachempfunden und wird induktiv geführt.

Zunächst möchte ich aber die grundlegende Idee des Beweises darstellen: Den Ausgangspunkt bildet ein leeres Schachbrettgitter der Kantenlänge  $N \times M$ , das periodisch geschlossen sein soll. Leer soll bedeuten, dass keine Spins auf den Gitterplätzen vorhanden sein sollen. Nach und nach soll das Gitter nun in beliebiger Reihenfolge mit Spins ( $S=2$ ) aufgefüllt werden, indem Vertices, wie sie in [Niggemann u. a. 2000] vorgestellt werden<sup>1</sup>, an die Gitterplätze angeheftet werden. Wird dabei ein Vertex auf ein Gitterplatz geheftet, das bereits besetzte Nachbarn hat, wird über den inneren Bond der jeweiligen Gitterplätze summiert. Die Abbildung C.1 zeigt ein Quadratgitter der Größe  $4 \times 4$ , das periodisch geschlossen sein soll. Die Gitterplätze  $(5,y)$  sollen also mit den Gitterplätzen  $(1,y)$  und die Gitterplätze  $(x,5)$  mit den Plätzen  $(x,1)$  identifiziert werden. In Abbildung C.1(a) ist das Gitter bis auf drei Gitterplätze gefüllt. Es existieren zwei Arten von Bonds. Die erste Art sind diejenigen Bonds, bei denen die inneren Bondvariablen aussummiert wurden. Die zweite sind die freien Bonds. Sie ragen von einem besetzten Gitterplatz zu einem unbesetzten. Diese freien Bonds tragen ihre Bondvariablen, in dem hier betrachteten Fall die Variablen „Pfeil rein“ und „Pfeil raus“ und führen so zu einer Entartung  $2^{\text{Anzahl der freien Bonds}}$ . Jede Konfiguration an Pfeilen auf den freien Bonds führt zu einem Grundzustand der entsprechenden Spinkonfiguration. Indem alle Konfigurationen der Pfeile durchlaufen werden, werden *alle möglichen Grundzustände* erzeugt. Lineare Abhängigkeiten entstehen nur durch topologisch äquivalente Konfigurationen der freien Bondvariablen [Affleck u. a. 1988].

Wird nun ein weiterer Vertex auf einen der freien Gitterplätze gesetzt, wie in Abbildung C.1(b) mit dem roten Vertex angedeutet, so wird wieder über die inneren Bonds summiert, was die Entartung pro aussummierten Bond halbiert. Gleichzeitig erhöht sich die Entartung um das Zweifache pro neuem freien Bond. In dem hier gezeigten Beispiel bleibt die Entar-

---

<sup>1</sup>Bei diesen Vertices handelt es sich lediglich um die zweidimensionale Spin-2 Variante, der in Kapitel 5.2.1 verwendeten Vertices für Spin-3 in drei Dimensionen.



(a) Das Gitter enthält noch drei freie Plätze und acht freie Bonds. Die Entartung beträgt somit  $2^8$ . Bei Modellen mit  $n$  Zuständen pro Bond, liegt die Entartung bei  $n^m$ , wenn  $m$  die Anzahl der freien Bonds bezeichnet.

(b) Wird ein Gitterplatz mit einem Spin besetzt, so werden die Bonds, die zu benachbarten Spins zeigen, aussummiert. Befindet sich auf dem Nachbarplatz kein Spin, so führen die freien Bonds zur Entartung.

Abbildung C.1.: In der Abbildung wird ein Quadratgitter der Kantenlänge  $4 \times 4$  gezeigt, das periodisch geschlossen sein soll (Gitterplatz (5,1) wird z.B. mit dem Gitterplatz (1,1) identifiziert). Die schwarz gefärbten Kreise stellen Spins dar, die leeren Kreise freie Gitterplätze. Bei den dick gezeichneten Bonds wurde die innere Variable aussummiert. Freie Bonds tragen noch beide Pfeile und führen so zur Entartung.

tion also konstant. Füllt man das Gitter bis zum letzten Platz, so werden auch noch die übrig gebliebenen freien Bonds aussummiert und der globale Grundzustand ist einfach. Der globale Zustand ist der gewünschte Optimum-Grundzustand des Modells.

Für den rigorosen Beweis möchte ich auf die Veröffentlichung [Niggemann u. a. 1997] verweisen, in der der Beweis induktiv vorgeführt wurde.

# Literaturverzeichnis

- [Affleck u. a. 1987] Affleck, I. ; Kennedy, T. ; Lieb, E. H. ; Tasaki, T.: Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. In: Physical Review Letters 59 (1987), S. 799
- [Affleck u. a. 1988] Affleck, I. ; Kennedy, T. ; Lieb, E. H. ; Tasaki, T.: Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets. In: Commun. Math. Phys. 115 (1988), S. 477
- [Aharony 1982] Aharony, A.: Multicritical Points. In: Hahne, F.J.W. (Hrsg.): Critical Phenomena Bd. 186, Spinger-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1982, S. 209–258
- [Ahrens u. a. 2002] Ahrens, M. A. ; Schadschneider, A. ; Zittartz, J.: Exact ground states of spin-2 chains. In: Europhysics Letters (2002), 59, S. 889–895
- [Ahrens u. a. 2005] Ahrens, M. A. ; Schadschneider, A. ; Zittartz, J.: Exact ground states of quantum spin-2 models on the hexagonal lattice. In: Physical Review B (2005), 71, Nr. 17, S. 174432–+
- [Ardonne u. a. 2004] Ardonne, E. ; Fendley, P. ; Fradkin, E.: Topological order and conformal quantum critical points. In: Annals of Physics 310 (2004), April, S. 493–551
- [Avenel u. a. 1992] Avenel, O. ; Xu, J. ; Xia, J. S. ; Xu, M.-F. ; Andraka, B. ; Lang, T. ; Moyland, P. L. ; Ni, W. ; Signore, P. J. ; van Woerkens, C. M. ; Adams, E. D. ; Ihas, G. G. ; Meisel, M. W. ; Nagler, S. E. ; Sullivan, N. S. ; Takano, Y. ; Talham, D. R. ; Goto, T. ; Fujiwara, N.: Low-temperature magnetic measurements of an  $S=1$  linear-chain Heisenberg antiferromagnet. In: Physical Review B (1992), 46, S. 8655–8658
- [Baxter 1982] Baxter, R.J.: Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. New York: Academic Press, 1982
- [Bethe 1931] Bethe, H.: Zur Theorie der Metalle: Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. In: Zeitschrift für Physik 71 (1931), S. 205 ff.
- [Binder 1987] Binder, K.: REVIEW ARTICLE: Theory of first-order phase transitions. In: Reports of Progress in Physics 50 (1987), Juli, S. 783–859
- [Binder und Heermann 1988] Binder, K. ; Heermann, D. W.: Monte Carlo simulation in statistical physics. an introduction. Springer Series in Solid-State Sciences, Berlin: Springer, 1988, 1988

- [de Boer und Schadschneider 1995] Boer, J. de ; Schadschneider, A.: Exact Ground States of Generalized Hubbard Models. In: Physical Review Letters 75 (1995), S. 4298
- [Bogdanov und Dragunov 1998] Bogdanov, A. N. ; Dragunov, I. E.: Metastable states, spin-reorientation transitions, and domain structures in planar hexagonal antiferromagnets. In: Journal of Low Temperature Physics 24 (1998), Dezember, S. 852–857
- [Botet u. a. 1983] Botet, R. ; Jullien, R. ; Kolb, M.: Finite-size-scaling study of the spin-1 Heisenberg-Ising chain with uniaxial anisotropy. In: Physical Review B 28 (1983), Oktober, S. 3914–3921
- [Challa u. a. 1986] Challa, M. S. S. ; Landau, D. P. ; Binder, K.: Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions. In: Physical Review B (1986), 34, S. 1841–1852
- [Delica u. a. 1991] Delica, T. ; Kopinga, K. ; Leschke, H. ; Mon, K. K.: Thermal properties of chains of antiferromagnetically coupled spins with  $S = 1$ : numerical evidence of the Haldane gap at nonzero temperatures. In: Europhysics Letters 15 (1991), Mai, S. 55–+
- [Derrida 1998] Derrida, B.: An exactly soluble non-equilibrium system: the asymmetric simple exclusion process. In: Physics Reports 301 (1998), S. 65–83
- [Derrida u. a. 1993] Derrida, B. ; Evans, M. R. ; Hakim, V. ; Pasquier, V.: Exact solution of a 1D asymmetric exclusion model using a matrix formulation . In: Journal of Physics A Mathematical General 26 (1993), April, S. 1493–1517
- [Elliott u. a. 1970] Elliott, R. J. ; Pfeuty, P. ; Wood, C.: Ising Model with a Transverse Field. In: Physical Review Letters (1970), 25, S. 443–446
- [Evertz u. a. 1993] Evertz, H. G. ; Lana, G. ; Marcu, M.: Cluster algorithm for vertex models. In: Physical Review Letters (1993), 70, S. 875–879
- [Evertz und Marcu 1993] Evertz, H. G. ; Marcu, M.: The loop-cluster algorithm for the case of the 6 vertex model. In: Nuclear Physics B Proceedings Supplements (1993), 30, S. 277–280
- [Fisher und Privman 1985] Fisher, M. E. ; Privman, V.: First-order transitions breaking  $O(n)$  symmetry: Finite-size scaling. In: Physical Review B (1985), 32, S. 447–464
- [Flouquet ] Flouquet, J.: On the Heavy Fermion Road. In: ArXiv Condensed Matter e-prints
- [Fradkin u. a. 2004] Fradkin, E. ; Huse, D. ; Moessner, R. ; Oganesyan, V. ; Sondhi, S.: On bipartite Rokhsar-Kivelson points and Cantor deconfinement. In: APS Meeting Abstracts (2004), März, S. 20005–+
- [Fradkin und Susskind 1978] Fradkin, E. ; Susskind, L.: Order and disorder in gauge systems and magnets. In: Physical Review D (1978), 17, S. 2637–2658



- [Georges u. a. 1996] Georges, A. ; Kotliar, G. ; Krauth, W. ; Rozenberg, M. J.: Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. In: Reviews of Modern Physics (1996), 68, S. 13–125
- [Golinelli u. a. 1992] Golinelli, O. ; Jolicoeur, T. ; Lacaze, R.: Haldane gaps in a spin-1 Heisenberg chain with easy-plane single-ion anisotropy. In: Physical Review B 45 (1992), Mai, S. 9798–9805
- [Haida u. a. ] Haida, O. ; Matsuo, T. ; Suga, H. ; Seki, S.:
- [Haldane 1983a] Haldane, F. D. M.: Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the  $O(3)$  nonlinear sigma model. In: Physics Letters A 93 (1983), Februar, S. 464–468
- [Haldane 1983b] Haldane, F. D. M.: Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State. In: Physical Review Letters 50 (1983), April, S. 1153–1156
- [Haldane 1983] Haldane, F.D.M.: Continuum Dynamics of the 1-D Heisenberg Antiferromagnet: Identification with the  $O(3)$  Nonlinear Sigma Model. In: Physics Letters 93A (1983), S. 464
- [Hirsch 1985] Hirsch, J. E.: Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study. In: Physical Review B (1985), 31, S. 4403–4419
- [Imry 1980] Imry, Y.: Finite-size rounding of a first-order phase transition. In: Physical Review B (1980), 21, S. 2042–2043
- [Janke 1994] Janke, W. ; D. P. Landau, H.-B. S. (Hrsg.): Recent Developments in Monte-Carlo Simulations of First-Order Phase Transitions, in Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics VII. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1994
- [Janke 1996] Janke, W. ; K. H. Hoffmann, M. S. (Hrsg.): Monte Carlo Simulations of Spin Systems, in Computational Physics. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1996 ( 10)
- [Kadanoff und Ceva 1971] Kadanoff, L. P. ; Ceva, H.: Determination of an Operator Algebra for the Two-Dimensional Ising Model. In: Physical Review B (1971), 3, S. 3918–3939
- [Katsumata u. a. 1989] Katsumata, K. ; Hori, H. ; Takeuchi, T. ; Date, M. ; Yamagishi, A. ; Renard, J. P.: Magnetization process of an  $S = 1$  linear-chain Heisenberg antiferromagnet. In: Physical Review Letters 63 (1989), S. 86
- [Klümper u. a. 1991] Klümper, A. ; Schadschneider, A. ; Zittartz, J.: Equivalence and solution of anisotropic spin-1 models and generalized t-J fermion models in one dimension . In: Journal of Physics A Mathematical General (1991), 24, S. L955–L959

- [Klümper u. a. 1993] Klümper, A. ; Schadschneider, A. ; Zittartz, J.: Matrix Produkt Ground States for One-Dimensional Spin-1 Quantum Antiferromagnets. In: Europhysics Letters 24 (1993), S. 293–297
- [Klümper u. a. 1992] Klümper, A. ; Schadschneider, A. ; Zittartz, J.: Groundstate properties of a generalized VBS-model. In: Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter 87 (1992), S. 281–287
- [Kosterlitz und Thouless 1973] Kosterlitz, J. M. ; Thouless, D. J.: Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. In: Journal of Physics C: Solid State Physics (1973), 6, S. 1181–1203
- [Lieb 1967a] Lieb, E. H.: Exact Solution of the F Model of An Antiferroelectric. In: Physical Review Letters (1967), 18, S. 1046–1048
- [Lieb 1967b] Lieb, E. H.: Exact Solution of the Two-Dimensional Slater KDP Model of a Ferroelectric. In: Physical Review Letters (1967), 19, S. 108–110
- [Lieb 1967c] Lieb, E. H.: Residual Entropy of Square Ice. In: Physical Review (1967), 162, S. 162–172
- [Mermin und Wagner 1966] Mermin, N. D. ; Wagner, H.: Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. In: Physical Review Letters (1966), 17, S. 1133–1136
- [Metropolis u. a. 1953] Metropolis, N. ; Rosenbluth, A.W. ; Rosenbluth, M.N. ; Teller, A.H. ; Teller, E.: Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. In: Journal of Chemical Physics 21 (1953), Nr. 6
- [Nagel 1969a] Nagel, J. F.: In: Communications in Mathematical Physics 13 (1969), 62–7 S
- [Nagel 1969b] Nagel, J. F.: Study of the F Model Using Low-Temperature Series. In: Journal of Chemical Physics 50 (1969), S. 2813–2818
- [Niggemann u. a. 1997] Niggemann, H. ; Klümper, A. ; Zittartz, J.: Quantum phase transition in spin- $\frac{3}{2}$  systems on the hexagonal lattice - optimum ground state approach. In: Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter 104 (1997), S. 103
- [Niggemann u. a. 2000] Niggemann, H. ; Klümper, A. ; Zittartz, J.: Ground state phase diagram of a spin-2 antiferromagnet on the square lattice. In: The European Physical Journal B 13 (2000), S. 15
- [Niggemann und Zittartz 1996] Niggemann, H. ; Zittartz, J.: Optimum ground states for spin- $\frac{3}{2}$  chains. In: Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter 101 (1996), S. 289 – 297
- [Nishino 1995] Nishino, T.: In: Journal of Physics Soc. Jpn. 64 (1995), L3598 S

- [Pfleiderer 2005a] Pfleiderer, C.: Novel Phases of Magnetic Metals. Springer, 2005a
- [Pfleiderer 2005b] Pfleiderer, C.: Why first order quantum phase transitions are interesting. In: Journal of the Physics of Condensed Matter (2005), 17, S. 987–+
- [Privman und Fisher 1985] Privman, V. ; Fisher, M. E.: Finite-size rounding of first-order transitions. In: Journal of Applied Physics (1985), 57, S. 3327–3328
- [Rahman und Stillinger 1972] Rahman, A. ; Stillinger, F. H.: In: Journal of Chemical Physics 57 (1972), Nr. 9, 4009–4017 S
- [Renard u. a. 1987] Renard, J. P. ; Verdaguer, M. ; Regnault, L. P. ; Erkelens, W. A. C. ; Rossat-Mignod, J. ; Stirling, W. G.: Presumption for a quantum energy gap in the quasi-one-dimensional  $S = 1$  Heisenberg antiferromagnet  $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ . In: Europhysics Letters 3 (1987), April, S. 945–+
- [Rokhsar und Kivelson 1988] Rokhsar, D. S. ; Kivelson, S. A.: Superconductivity and the quantum hard-core dimer gas. In: Physical Review Letters 61 (1988), November, S. 2376–2379
- [Rys 1963] Rys, F.: In: Helv. Phys. Acta 36 (1963), 537–59 S
- [Sachdev 1999] Sachdev, Subir: Quantum Phase Transitions. Cambridge: Cambridge University Press, 1999. – ISBN 0–521–00454–3
- [Scaletter 1999] Scaletter, R.T ; Nightingale, M.P. (Hrsg.) ; Umrigar, C.J. (Hrsg.): Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry. 1999
- [Senthil u. a. 2004] Senthil, T. ; Vojta, M. ; Sachdev, S.: Weak magnetism and non-Fermi liquids near heavy-fermion critical points. In: Physical Review B (2004), 69, Nr. 3, S. 035111–+
- [Senthil u. a. 2005] Senthil, T. ; Vojta, M. ; Sachdev, S.: Quantum phase transitions out of the heavy Fermi liquid. In: Physica B: Condensed Matter 359-361 (2005), 4, S. 9–16
- [Slater 1941] Slater, J. C.: Theory of the transition in  $KH_2PO_4$ . In: Journal of Chemical Physics 9 (1941), Nr. 16
- [Stewart 2001] Stewart, G. R.: Non-Fermi-liquid behavior in d- and f-electron metals. In: Reviews of Modern Physics (2001), 73, S. 797–855
- [Sutherland 1967] Sutherland, B.: Exact Solution of a Two-Dimensional Model for Hydrogen-Bonded Crystals. In: Physical Review Letters (1967), 19, S. 103–104
- [Suzuki 1976a] Suzuki, M.: Relationship between d-Dimensional Quantal Spin Systems and (d+1)-Dimensional Ising Systems —Equivalence, Critical Exponents and Systematic Approximants of the Partition Function and Spin Correlations—. In: Progress of Theoretical Physics (1976), 56, S. 1454–1469

- [Suzuki 1976b] Suzuki, M.: Relationship between  $d$ -Dimensional Quantal Spin Systems and  $(d+1)$ -Dimensional Ising Systems —Equivalence, Critical Exponents and Systematic Approximants of the Partition Function and Spin Correlations—. In: Progress of Theoretical Physics (1976), 56, S. 1454–1469
- [Toulouse 1977] Toulouse, G.: In: Communications in Physics (G.B.) 2 (1977), 115 S
- [Trotter 1959] Trotter, H.F.: On the product of semi-groups of operators. In: Proceedings of the American Mathematical Society 10 (1959), Nr. 545
- [Vishwanath u. a. 2004] Vishwanath, A. ; Balents, L. ; Senthil, T.: Quantum criticality and deconfinement in phase transitions between valence bond solids. In: Physical Review B (2004), 69, Nr. 22, S. 224416–+
- [Vojta 2003] Vojta, M.: Quantum phase transitions. In: Reports of Progress in Physics (2003), 66, S. 2069–2110
- [Vojta u. a. 2005] Vojta, M. ; Tong, N. ; Bulla, R.: Quantum Phase Transitions in the Sub-Ohmic Spin-Boson Model: Failure of the Quantum-Classical Mapping. In: Physical Review Letters 94 (2005), Provided by the Smithsonian/NASA Astrophysics Data System, Nr. 7, S. 070604–+
- [Wegner 1994] Wegner, Franz: Flow-equations for Hamiltonians. In: Annalen der Physik 3 (1994), S. 77–91
- [White und Huse 1993] White, S. R. ; Huse, D. A.: Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic  $S=1$  Heisenberg chain. In: Physical Review B 48 (1993), S. 3844
- [White und Noack 1992] White, S. R. ; Noack, R. M.: Real-space quantum renormalization groups. In: Physical Review Letters 68 (1992), S. 3487
- [Wilson 1971a] Wilson, K. G.: Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture. In: Physical Review B (1971), 4, S. 3174–3183
- [Wilson 1971b] Wilson, K. G.: Renormalization Group and Critical Phenomena. II. Phase-Space Cell Analysis of Critical Behavior. In: Physical Review B (1971), 4, S. 3184–3205
- [Wilson 1975] Wilson, K. G.: The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. In: Reviews of Modern Physics 47 (1975), S. 773–840
- [Wu 1971] Wu, F. W.: Ising Model with Four-Spin Interactions. In: Physical Review B (1971), 4, S. 2312–2314
- [Wu 1982] Wu, F. Y.: The Potts model. In: Reviews of Modern Physics 54 (1982), Januar, S. 235–268

- [Young 1975] Young, A. P.: Quantum effects in the renormalization group approach to phase transitions . In: Journal of Physics C Solid State Physics (1975), 8, S. L309–L313
- [Zheng und Zhang 1998] Zheng, G. P. ; Zhang, J. X.: Thermal hysteresis scaling for first-order phase transitions. In: Journal of the Physics of Condensed Matter (1998), 10, S. 275–284



# Abstract

The present work deals with optimum ground states and their realization in terms of vertex state models for many particle systems in dimensions  $D \geq 2$ . This concept can be adapted to quantum spin systems with spins  $S$  on arbitrary lattices as long the coordination number  $z$  satisfies the inequality  $S \geq nz/2$ . The optimum ground states of the models are exact and the ground state properties can be investigated. The models which are subject to this work show a huge variety of interesting physical behaviour. Vertex ground states with antiferromagnetic, weak antiferromagnetic and weak ferromagnetic order are introduced. For these models quantum phase transitions can be observed which are first or second order. In case of a second order phase transition different critical exponents are determined. For some of the models they are within the universality class of a classical 2D-Ising model. The dependence of the physical properties on the magnitude of the spin, dimensionality of the model as on the underlying lattice is investigated.

# Kurzzusammenfassung

Die vorliegende Arbeit gibt eine Einführung in die Theorie der Optimum-Grundzustände und ihrer Realisation in Vertex-Zustands-Modellen in Dimensionen  $D \geq 2$ . Mit Hilfe einer Verallgemeinerung der Vertex-Zustands-Modelle können Quanten-Spin-Systeme mit Spins der Größe  $S$  auf beliebigen Gittern mit beliebiger Koordinationszahl  $z$  für  $S \geq nz/2$  realisiert werden. Die Grundzustände dieser Modelle können exakt angegeben werden und bieten so Zugang zum Tieftemperaturverhalten dieser Modelle. Mit dieser Methode konstruierte Grundzustände zeigen reichhaltiges physikalisches Verhalten. Es werden Modelle mit antiferromagnetischer, schwach antiferromagnetischer und mit schwach ferromagnetischer/ ferrimagnetischer Ordnung vorgestellt, deren Grundzustände niedrig entartet sind. Bei vielen Modellen lassen sich Quantenphasenübergänge sehen, die erster oder zweiter Ordnung sein können. Im Fall der Phasenübergänge zweiter Ordnung lassen sich diverse kritische Exponenten bestimmen. Die Abhängigkeiten der unterschiedlichen Eigenschaften von der Größe der Spins, von der Dimensionalität sowie von der Koordinationszahl werden untersucht.



## **Erklärung**

Ich versichere, dass ich die von mir vorgelegte Dissertation selbständig angefertigt, die benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben und die Stellen der Arbeit – einschliesslich Tabellen, Karten, und Abbildungen –, die anderen Werken im Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, in jedem Einzelfall als Entlehnung kenntlich gemacht habe; dass diese Dissertation noch keiner anderen Fakultät oder Universität zur Prüfung vorgelegen hat; dass sie – abgesehen von unten angegegebenen Teilpublikationen – noch nicht veröffentlicht worden ist sowie, dass ich eine solche Veröffentlichung vor Abschluss des Promotionsverfahrens nicht vornehmen werde. Die Bestimmungen der Promotionsordnung sind mir bekannt. Die von mir vorgelegte Dissertation ist von Herrn Prof. Dr. J. Zittartz betreut worden.

Köln, den 24. Oktober 2005

## **Teilpublikationen**

Exact ground states of quantum spin-2 models on the hexagonal lattice  
Marc André Ahrens, Andreas Schadschneider, and Johannes Zittartz  
PHYSICAL REVIEW B 71, 174432 (2005)

