

Seminar: Anwendungen der statistischen Physik

Haldane- Zustände der Spin-1-Heisenbergkette

Anne Hemshorn

10.02.2005

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung	1
1.1 Spinketten	1
1.2 Die Vermutung von Haldane	2
2 Das Lieb-Schultz-Mattis-Theorem	2
2.1 Beweisskizze	2
2.2 Der Beweis	3
2.3 Ganzzahlige Spinketten	4
3 Valence Bond Solids	5
3.1 $S = 1/2$ -Ketten	5
3.2 Das AKLT-Modell und der bilineare-biquadratische Hamilton-Operator	6
4 Experimentelle Realisierung	8
4.1 Suszeptibilität	8
4.2 Neutronenstreuung	9
5 Zusammenfassung	10

1 Einführung

1.1 Spinketten

Einige Jahre nach den ersten Formulierungen der Quantenmechanik fanden Heisenberg und Dirac heraus, dass die Wechselwirkung zwischen Elektronenspins den Schlüssel für die jahrhundertealte Frage nach dem Magnetismus birgt. Die Gesetze der Quantenmechanik implizierten einen effektiven Hamiltonoperator, dessen Austauschwechselwirkung J_{ij} durch die Coulomb-Abstoßung und das Pauli-Prinzip verursacht wird (vgl. z.B. [1]) Die Abbildung verdeutlicht eine mögliche

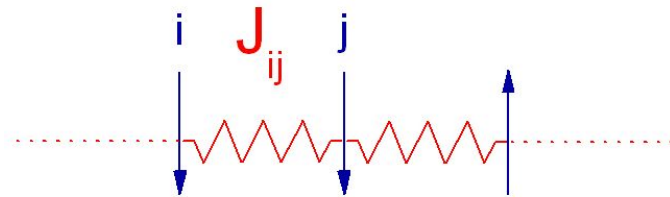


Abbildung 1: Veranschaulichung der Wechselwirkung zweier Spins

Spin-Konfiguration auf einem eindimensionalen Gitter mit der Austauschwechselwirkung J_{ij} zwischen den Gitterplätzen i und j . Zu beachten ist hierbei, dass jeder Spin alle möglichen Einstellmöglichkeiten annehmen kann, und nicht, wie z.B. beim Ising-Modell, auf zwei Möglichkeiten beschränkt ist. Der effektive Hamiltonian, auch *Heisenberg-Hamilton-Operator* genannt, ergibt sich aus der Summe über alle Wechselwirkungen :

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \tag{1}$$

Hierbei stehen die $\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j$ für die jeweiligen Quantenspins S am i -ten bzw. j -ten Platz. Im einfachsten Fall betrachtet man nur nächste-Nachbar-Wechselwirkungen und den

isotropen Fall $J_{ij} = J$:

$$\mathcal{H} = J \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} \quad (2)$$

Hans Bethe war 1931 der erste, der für die eindimensionale, antiferromagnetische Spin-1/2-Kette eine analytische Lösung lieferte. Mit Hilfe des Bethe-Ansatzes findet man ein kontinuierliches Anregungsspektrum und eine unendlich lange Korrelationslänge :

$$E(k) = \frac{J\pi}{2} |\sin k| \quad (3)$$

Die Spin-Spin-Korrelation ist quasi-langreichweitig und fällt nur mit einem Potenzgesetz ab:

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle \propto \frac{(-1)^j}{|j|} \sqrt{\ln |j|} \quad (4)$$

(vgl. [1])

1.2 Die Vermutung von Haldane

Es läge nun nahe, den Ansatz von Bethe auf beliebigen Spin S zu verallgemeinern, was analytisch jedoch nicht möglich ist. Außerdem stellte Haldane 1983 die Vermutung auf, dass es einen fundamentalen Unterschied zwischen halb- und ganzzahligen Spins gibt [6]. Im Gegensatz zu den halbzahligen Spinketten sollten bei den ganzzahligen die Korrelationen exponentiell abfallen, wodurch eine Lücke im Anregungsspektrum entsteht. Das bedeutet, dass hier die Anregungen um einen endlichen Energiebetrag über der Grundzustandsenergie liegen, was natürlich wesentlich das physikalische Verhalten eines Systems bestimmt. In der vorliegenden Ausarbeitung wollen wir zunächst das Lieb-Schultz-Mattis-Theorem durchrechnen, das eindeutig zeigt, dass halbzahlige Spinketten keine Lücken besitzen, wobei der Beweis für ganzzahlige Spins aber scheitert [7]. Daraufhin werden wir auf das VBS- (Valence Bond Solid) oder auch AKLT- (Affleck, Kennedy, Lieb, Tasaki) Modell eingehen, das eine gute Beschreibung für $S > 1/2$ -Ketten liefert, aber ein ausschließlich quantenmechanisch beschreibbarer Zustand ist [8]. Schließlich werden wir, am Beispiel der Neutronenstreuung und der Suszeptibilität für $T \rightarrow 0$, auf die experimentellen Belege der hier dargestellten Rechnungen zu sprechen kommen [4], [5].

2 Das Lieb-Schultz-Mattis-Theorem

2.1 Beweisskizze

Der Beweis des Lieb-Schultz-Mattis-Theorems läuft wie folgt: Man betrachtet zunächst eine Spinkette einer definierten Grundzustandsenergie. Mithilfe eines sogenannten Twistoperators wird ein neuer Zustand $|\Psi_1\rangle$ erzeugt, von dem im weiteren gezeigt wird, dass er senkrecht auf dem Grundzustand steht und im thermodynamischen Limes dieselbe Anregungsenergie besitzt wie $|\Psi_0\rangle$. Die erste Aussage kann jedoch nur für halbzahlige Spins gezeigt werden. Der hier durchgeführte Beweis folgt in den wesentlichen Schritten [3] und [1].

2.2 Der Beweis

Wir betrachten eine Spinkette, die sich aus L Spins des Betrages S zusammensetzt. Der Hamiltonoperator summiert nur über nächste Nachbarn, d.h. die Wechselwirkung unter den Spins ist kurzreichweitig. Die Randbedingungen sollen periodisch sein, so dass der $L+1$ Spin wieder der erste ist. Außerdem setzen wir voraus, dass \mathcal{H} invariant

- unter Verschiebung um 1 Gitterkonstante und
- unter Drehung um die z-Achse im Spinraum ist.

Das LSM-Theorem macht dann folgende Aussagen:

- Das System ist für $L \rightarrow \infty$ für halbzahlige Spins **lückenlos** oder der Grundzustand ist entartet mit **spontaner Brechung der Translationsymmetrie**.
- Ganzzahlige Spinketten hingegen können eine Lücke aufweisen.

Sei $|\Psi_0\rangle$ der Grundzustand von \mathcal{H} mit der Grundzustandsenergie E_0 . Man kann einen neuen Zustand $|\Psi_1\rangle$ erzeugen, indem man auf den Grundzustand den Twistoperator anwendet. Dieser verdreht, anschaulich gesprochen, jeden Spin um eine bestimmte Phase gegenüber dem Grundzustand. Der Twistoperator wirkt gerade so, dass der j te Spin um $k \cdot j = \frac{2\pi}{L} \cdot j$ verdreht wird. Der letzte Spin ($j = L$) bleibt somit invariant.

$$|\Psi_1\rangle = \exp \left[ik \sum_j j S_j^z \right] |\Psi_0\rangle \equiv U |\Psi_0\rangle, \quad k = \frac{2\pi}{L} \quad (5)$$

Außerdem benutzen wir noch den Translationsoperator T , der eine Verschiebung des Systems um einen Gitterplatz bewirkt:

$$TS_j T^{-1} = S_{j+1} \quad (6)$$

$$TS_L T^{-1} = S_1 \quad (7)$$

Da man zeigen kann, dass T mit \mathcal{H} kommutiert ($[T, \mathcal{H}] = 0$), besitzen T und \mathcal{H} die gleichen Eigenwerte, so dass gilt

$$T |\Psi_0\rangle = e^{i\delta} |\Psi_0\rangle,$$

wobei δ eine konstante Phase ist.

Um uns zu überzeugen, dass wir es tatsächlich mit zwei *unterschiedlichen* Zuständen zu tun haben, versuchen wir die Orthogonalität zwischen beiden Zuständen zu beweisen. Das Skalarprodukt des Grundzustandes mit dem angeregten Zustand lässt sich mit den oben eingeführten Operatoren schreiben als:

$$\langle \Psi_0 | \Psi_1 \rangle = \langle \Psi_0 | \exp(ik \sum_j j S_j^z) | \Psi_0 \rangle \quad (8)$$

$$= \langle \Psi_0 | T \exp(ik \sum_j j S_j^z) T^{-1} | \Psi_0 \rangle \quad (9)$$

$$= \langle \Psi_0 | T U T^{-1} | \Psi_0 \rangle \quad (10)$$

Im mittleren Ausdruck wirkt der Translationsoperator auf den Twistoperator U , so dass die Summe aus Gleichung (5) sich verschiebt:

$$T U T^{-1} = \exp(ik \sum_j j S_{j+1}^z) \quad (11)$$

$$= \exp\left(i\frac{2\pi}{L} \sum_{j=1}^L ((j-1)S_j^z) + i2\pi S_1^z\right) \quad (12)$$

$$= \exp\left(i\frac{2\pi}{L} \sum_{j=1}^L jS_j^z\right) \cdot \exp\left(i\frac{2\pi}{L} \sum_{j=1}^L -S_j^z + i2\pi S_1^z\right) \quad (13)$$

$$= U \cdot \exp(i2\pi(-S_{tot}^z)) \cdot \exp(i2\pi S_1^z) \quad (14)$$

$$= U \cdot \exp(i2\pi S_1^z) \quad (15)$$

$$(16)$$

In (12) haben wir die periodische Randbedingung ($S_{L+1}^z = S_1^z$) ausgenutzt, so dass wir den Index schieben konnten. Dann kann man nämlich im ersten Teil der Exponentialfunktion wieder den Twistoperator finden und kurz als U schreiben. Dieser macht aus $|\Psi_0\rangle$ im folgenden wieder ein $|\Psi_1\rangle$. Weiterhin geht in (16) ein, dass der Grundzustand einer AFM Spinkette einen Gesamtspin von 0 hat (vgl z.B. [7]). Nun kommen wir schon zum springeneden Punkt im Unterschied zwischen halb- und ganzzahligen Spins: Der noch verbleibende Faktor $e^{i2\pi S}$ liefert lediglich ± 1 , je nachdem, ob S ganz- oder halbzahlig ist. Gleichung (10) schreibt sich damit schließlich zu:

$$\langle \Psi_0 | \Psi_1 \rangle = e^{i2\pi S} \langle \Psi_0 | \Psi_1 \rangle \quad (17)$$

Ist S halbzahlig, so folgt sofort:

$$\langle \Psi_0 | \Psi_1 \rangle = - \langle \Psi_0 | \Psi_1 \rangle, \quad (18)$$

so dass das Skalarprodukt null sein muss und die Zustände senkrecht aufeinander stehen. Für ganzzahliges S endet der Beweis hier.

Wir müssen nun nur noch für die halbzahligen Spins zeigen, dass im thermodynamischen Limes die Anregungsenergie der Grundzustandsenergie entspricht. Da benachbarte Spins um den Winkel $2\pi/L$ gegen einander ausgelenkt wurden, muss die Anregungsenergie von der Größenordnung $L[1 - \cos(2\pi/L)]$ sein. Eine genauere Betrachtung mit Hilfe der Variationsrechnung und Entwicklung des Cosinus (vgl. [3]) liefert:

$$\langle \Psi_1 | \mathcal{H} | \Psi_1 \rangle \leq E_0 + \frac{2\pi^2 JS^2}{L} + \mathcal{O}(1/L^3) \quad (19)$$

Diese Energie entspricht für $L \rightarrow \infty$ ganz offensichtlich der Energie des Grundzustandes, so dass halbzahlige Spinketten ein lückenloses Anregungsspektrum besitzen; natürlich gesetzt dem Fall, dass die Annahme $T|\Psi_0\rangle = |\Psi_0\rangle$ gilt, also die Kette translationsinvariant und die Symmetrie nicht gebrochen ist.

2.3 Ganzzahlige Spinketten

Oben haben wir gezeigt, dass lediglich für halbzahlige Spins ein Lücke im Spektrum ausgeschlossen ist, was natürlich nicht bedeutet, dass ganzzahlige Spinketten, wie es die Vermutung von Haldane besagt, eine Lücke haben müssen. Ganzzahligkeit ist notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung. Eine Lücke im Anregungsspektrum bedeutet für die Spins, dass die Wechselwirkungen zwischen ihnen stärker abfallen - nämlich nach [2] für ganzzahlige Spins exponentiell im Gegensatz zu dem Potenzgesetz der halbzahligen:

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle \propto \frac{(-1)^j}{\sqrt{|j|}} \exp(-|j|/\xi) \quad (20)$$

Hierbei ist ξ die Korrelationslänge, also die Entfernung, nach der die Korrelation auf den $1/e$ ten Teil abgefallen ist. Es soll noch bemerkt werden, dass ξ mit wachsendem ganzzahligem S ebenfalls ansteigt. Auf eine genauere Betrachtung der Korrelation soll hier aber nicht eingegangen werden.

3 Valence Bond Solids

Weiterhin besteht das Problem, exakte Lösungen für Grundzustände der Heisenbergkette verschiedener Spingrößen zu finden. Um das Verhalten dieser Spinketten besser zu verstehen, führen wir das so genannte *Valence bond solid* (VBS)-Modell ein, das von großem Interesse für die Zustände der Spin-1-Heisenbergkette sein wird. Der Prototyp dieses Modells wurde 1983 von Affleck, Kennedy, Lieb und Tasaki eingeführt, so dass es auch als *AKLT*-Modell bezeichnet wird ([8]). Wir werden am Ende dieses Abschnitts sehen, dass das VBS-Modell zwar nicht die Lösung der Spin-1-Heisenbergkette darstellt, jedoch mit dieser in einer gemeinsamen Phase des bilinear-biquadratischen Hamiltonians liegt. Um den VBS-Zustand zu konstruieren müssen wir jedoch auf quantenmechanisch zu bildende Singletts zurückgreifen - wir erhalten also einen reinen Quantenzustand der Materie, zu dem es kein klassisches Analogon gibt. Dieses ganze Kapitel folgt im Wesentlichen der Darstellung in [2].

3.1 $S = 1/2$ -Ketten

Betrachten wir zunächst die $S = 1/2$ isotrope Heisenbergkette, nun aber mit Wechselwirkungen zwischen nächsten und übernächsten Nachbarn:

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + J_2 \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+2} \quad (21)$$

Dies stellt ein ungleich schwierigeres Problem dar als die lediglich nächste Nachbar Wechselwirkung. Wenn wir jedoch annehmen, dass $J_2 = J_1/2$, lässt sich \mathcal{H} schreiben als:

$$\mathcal{H} = J \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + (J/2) \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+2} \quad (22)$$

$$= (J/4) \sum_j \mathcal{P}_j + const, \quad (23)$$

wobei

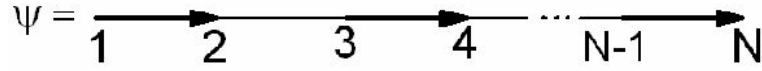
$$\mathcal{P}_j = (\mathbf{S}_{j-1} + \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_{j+1})^2 \quad (24)$$

\mathcal{P}_j ist ein Operator, der sich jeweils aus den Spinoperatoren dreier benachbarter Spins zusammensetzt und, lax gesagt, ihren gemeinsamen Gesamtspin misst. Die Eigenwerte von \mathcal{P}_j sind genau dann am kleinsten, wenn $|\mathbf{S}_{j-1} + \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_{j+1}|$ klein also gleich $1/2$ wird. Um den Zustand minimaler Energie zu bilden, dürfen drei aufeinanderfolgende Spins somit nie einen Gesamtspin von $3/2$ haben. Das kann man erreichen, indem man jeweils zwei benachbarte Spins zu Singletts zusammenfügt:

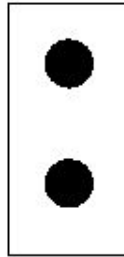
$$[ij] = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle) \quad (25)$$

Diesen Zustand nennt man dimerisierten Zustand und man kann ihn sich mit Abb.2 gut veranschaulichen: Wichtig dabei ist, dass dieser Grundzustand für eine geschlossene Kette entartet ist, denn er lässt sich sowohl als

$$\psi = [12][34] \cdots [N-1, N] \quad \text{als auch als} \quad \psi = [23][45] \cdots [N, 1] \quad (26)$$

Abbildung 2: Dimerisierter Zustand der $S = 1/2$ -Kette

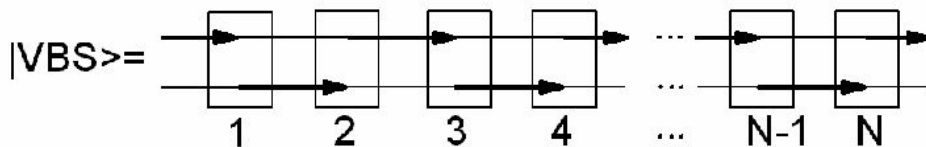
schreiben. Hier begegnet uns auch das *LSM*-Theorem wieder: Wir haben es mit einer halbzahligen Spinkette zu tun, bei der im Grundzustand augenscheinlich die Translationssymmetrie gebrochen ist, wie man in (26) gut erkennt.

Abbildung 3: Die Punkte veranschaulichen die beiden erzeugenden $S = 1/2$ Spins, die Box deutet die Symmetrisierung an: $S = 0$ -Anteile werden herausprojiziert.

3.2 Das AKLT-Modell und der bilineare-biquadratische Hamilton-Operator

Ursprünglich wollten wir uns aber mit Spin-1-Ketten beschäftigen. Physikalisch sind die $S = 1$ Spins von z.B. wie Ni^{2+} Ionen zusammengesetzt aus den $S = 1/2$ Spins der $3d$ -Elektronen. Was immer also $S = 1$ Spins tun - wir sind in der Lage, es als einen Zustand doppelt so vieler $S = 1/2$ Spins zu interpretieren, d.h. wir beschreiben ein $S = 1$ System, indem wir auf jeden Gitterplatz zwei stark gekoppelte $S = 1/2$ Spins setzen. Das bedeutet, dass wir durch Symmetrisierung die $S = 0$ -Anteile herausprojizieren, vgl. Abb. (refbox). Jeder der beiden erzeugenden Spins kann eine Singlett-Bindung mit einem anderen Nachbarn eingehen, und dieser Zustand kann auf die ganze Kette ausgeweitet werden. Der so gebildete Zustand heißt VBS-Zustand der $S = 1$ Heisenbergkette und lässt sich wie in Abb. 4 darstellen. Das besondere hieran ist, dass dieser Zustand **nur** quantenmechanisch erzeugt und erklärt werden kann; klassisch betrachtet existiert er also gar nicht.

Die Singlett-Bindungen nur durch Pfeile darzustellen würde nicht ausreichen: Die

Abbildung 4: VBS-Zustand der $S=1$ Heisenbergkette

beiden Spins an einem Platz könnten sowohl ein Singlett als auch ein Triplet bilden. Da wir aber auf jeden Fall eine $S = 1$ -Kette konstruieren wollen, müssen wir

einen Projektor hinzuziehen, der nur die lokalen $|\mathbf{S}_j| = 1$ Komponenten überleben lässt, was durch die vertikalen Boxen zum Ausdruck gebracht werden soll, vgl. Abb. 3. Da der $|VBS\rangle$ -Zustand nur durch nächste Nachbar-Bindungen gebildet worden ist, ist sofort klar dass er nur kurzreichweitige Wechselwirkungen hat und sein Spektrum Lücken aufweist. Man erkennt aus Abbildung 4 ebenfalls, dass der Grundzustand bei periodischen Randbedingungen nicht entartet ist: Verschiebt man die Platznummer um 1, so erhält man wieder den gleichen Zustand, da ja zwischen jeder Box eine einfache Bindung auftritt. Die $S = \frac{3}{2}$ -Kette hingegen weist, dem *LSM*-Theorem entsprechend, wieder einen entarteten Grundzustand auf: doppelte wechseln sich mit einfachen Bindungen ab, ein Index-Shift um 1 würde, wie beim dimerisierten Zustand, wieder einen neuen Zustand ergeben. Analog überlegt man sich, dass für eine $S = 2$ -Kette wiederum die Translationssymmetrie nicht gebrochen ist, vgl. Abb. 5.

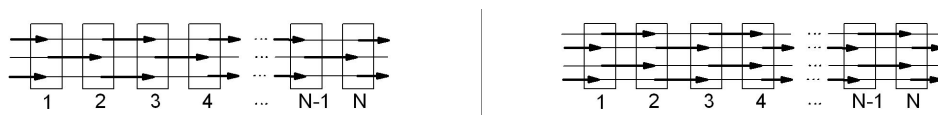


Abbildung 5: VBS-Zustände für Ketten mit (a) $S = \frac{3}{2}$ und (b) $S = 2$

Eine genauere Analyse des VBS-Zustandes der $S=1$ -Kette zeigt jedoch, dass diese keinen Eigenzustand des eingangs beschriebenen Heisenberghamiltonoperators

$$\mathcal{H} = J \sum_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} \quad (27)$$

darstellt. Da man aber nun soviel Arbeit in die Konstruktion des VBS-Modells gesteckt hat, ist man natürlich nicht gewillt, diesen einfach zur Seite zu legen. Vielmehr findet man, dass er den Eigenzustand eines anderen Operators liefert - nämlich den des Operators

$$\mathcal{P}_{ij} = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{1}{3}(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 + \frac{2}{3} \quad (28)$$

Ähnlich wie beim dimerisierten Zustand aus Kapitel 3.1 kann man nun den zugehörigen Hamiltonoperator definieren:

$$\mathcal{H}_{VBS} = \sum_j \mathcal{P}_j + const \quad (29)$$

$$= \sum_j \left\{ \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} + \frac{1}{3}(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1})^2 \right\} \quad (30)$$

Diesen kann man zum bilinearen-biquadratischen Hamiltonian verallgemeinern:

$$\mathcal{H} = \sum_j \left\{ J \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} + Q (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1})^2 \right\}, \quad (31)$$

wobei das Intervall $-J < Q < J$ gerade die sogenannte Haldane-Phase auszeichnet. Innerhalb dieses Bereichs liegen also alle Lösungen in der gleichen Phase vor, man findet keinen Phasenübergang, während an den Rändern $Q = -J$ und $Q = J$ das Problem mit dem Bethe Ansatz lösbar wird (siehe [2]). In dieser Ausarbeitung haben wir zwei Spezialfälle kennengelernt:

- $Q = 0$: Das reine Heisenbergmodell

- $Q = \frac{1}{3}$: Das AKLT-Modell

Zwar haben beide unterschiedliche Eigenzustände, beschreiben aber im wesentlichen die gleiche Physik und ergeben somit wiederum ähnliche Energien.

4 Experimentelle Realisierung

Nach der Formulierung der Vermutung von Haldane sind seit Mitte der 1980er antiferromagnetische Spin-1-Ketten auch in den Blickwinkel des Experimentalphysikers geraten. Hier sollen zwei Methoden angegeben werden, die das Auftreten von Energielücken in Spin-1-Ketten experimentell belegen.

4.1 Suszeptibilität

Die Messung der magnetischen Suszeptibilität $\chi(T)$ in Abhängigkeit von der Temperatur erlaubt eine Bestimmung der unterschiedlichen magnetischen Phasen. Die Suszeptibilität berechnet sich thermodynamisch zu

$$\chi = \frac{\beta}{ZN} \sum_n (S_{tot}^z)^2 e^{-\beta E_n} \quad (32)$$

Liegt eine Energielücke Δ oberhalb der Grundzustandsenergie E_0 vor, so geht die Suszeptibilität für $T \rightarrow 0$ exponentiell gegen Null. Bei lückenloser Anregung hingegen nimmt sie für tiefe Temperaturen einen endlichen Wert an. Wir betrachten hier eine Messung aus [4] an NENP ($Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$), einem kristallinen Festkörper, der in guter Näherung als eindimensionaler Heisenberg Antiferromagnet angesehen werden kann, da die Kopplung zwischen den einzelnen Ketten bei NENP um vier Größenordnungen kleiner ist als die innerhalb einer Kette. In Abb. 6 ist

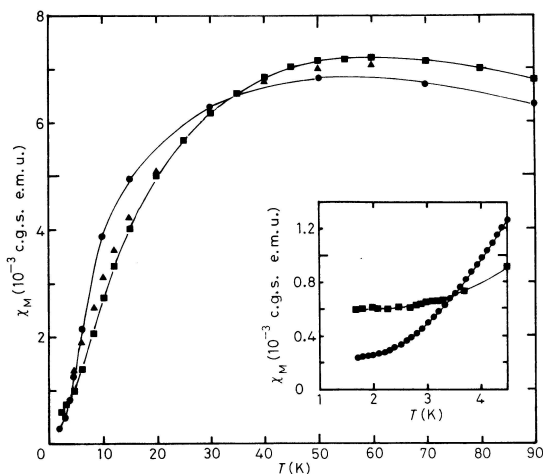


Abbildung 6: Magnetische Suszeptibilität von NENP über der Temperatur, aus [4]

die Suszeptibilität über der Temperatur aufgetragen. Man erkennt deutlich, dass die Suszeptibilität ein Maximum durchläuft, dann jedoch nicht auf die halbe Höhe des Maximums abfällt, wie es bei einem Festkörper mit lückenloser Anregung zu erwarten wäre, sondern stark gegen Null abfällt. Der vergrößerte Ausschnitt zeigt zwar ein Abflachen der Kurve, was aber lediglich auf Verunreinigungen des Materials zurückzuführen ist.

4.2 Neutronenstreuung

Eine andere Möglichkeit, die magnetische Anregungen in einem Festkörper direkt zu messen, stellt die inelastische Neutronenstreuung dar. Neutronen tragen ein magnetisches Moment, weshalb die Neutronenstreuung nicht nur Auskunft über die Struktur sondern auch über den Magnetismus der Probe gibt. Für Neutronenstreuung gelten die selben Begrifflichkeiten wie z.B. in der Röntgenstreuung.

Das hier angeführte Beispiel aus [5] zeigt eine Messung an $CsNiCl_3$. Ähnlich wie bei NENP ist auch in $CsNiCl_3$ die Kopplung innerhalb einer Kette, das heißt entlang der c -Achse des Kristalls (vgl. Abb. 7), um den Faktor 50 kleiner als senkrecht zur c -Achse, so dass auch hier in guter Näherung eindimensionale Ketten betrachtet werden. Abbildung 8 zeigt die gemessene Energie über dem relativen Wellenvektor Q_c . Für halbzahlige Spinketten müsste bei $Q_c = 1$, also bei einer ganzen Wellenlänge die Energie auf 0 abfallen, hier erreicht sie aber bei $1,595 \text{ meV}$ ihren Tiefpunkt. Die Energielücke Δ_{CsNiCl_3} ist somit direkt ablesbar und angebbar.

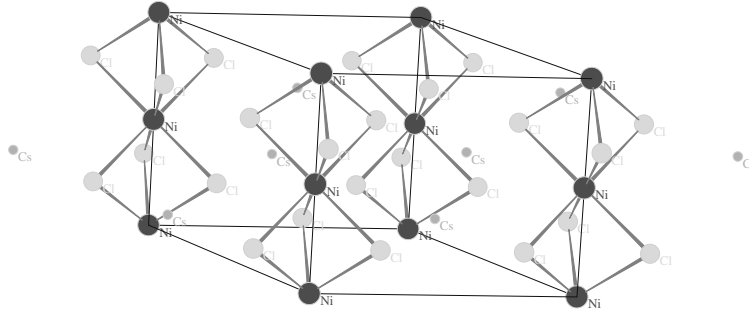


Abbildung 7: Gitterstruktur von $CsNiCl_3$ aus [5]

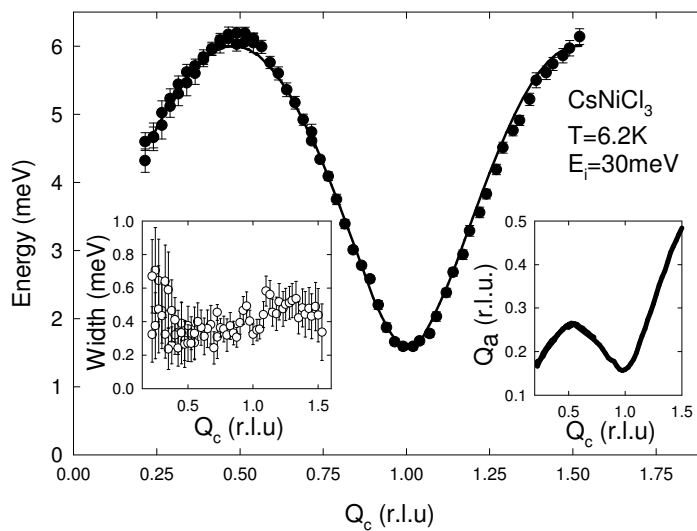


Abbildung 8: Anregungsenergie als Funktion des Wellenvektors Q_c entlang der Kette aus [5]

5 Zusammenfassung

In den zurückliegenden Kapiteln haben wir einiges über Spin-S-Ketten gelernt. Wir haben die Vermutung von Haldane kennengelernt, die eine fundamentale Unterscheidung zwischen halb- und ganzzahligen Spins macht. Demnach haben halbzahlige Spinketten lückenlose Anregungsenergie, ganzzahlige hingegen weisen eine Lücke auf. Diese Aussage konnten wir untermauern mit dem Lieb-Schultz-Mattis-Theorem, das Lücken für ganzzahlige Spinketten zulässt, für halbzahlige aber ausschließt. Desweiteren haben wir uns am VBS-Modell den Unterschied in der Translationssymmetrie ganz- und halbzahliger Spinketten verdeutlicht und außerdem gesehen, dass dieser VBS-Zustand ein reiner Quantenzustand, klassisch also nicht erklärbar ist. Die Neutronenstreuung und die Suszeptibilitätsmessung bei tiefen Temperaturen haben uns schließlich experimentell die vorgestellte Theorie bestätigt.

Literatur

- [1] H.-J. Mikeska, A.K. Kolezhuk
One dimensional Magnetism
Lecture Notes Phys. 645, 1-83 (2004)
S. 28-32
- [2] P. Fazekas
Lecture Notes on Electron correlation and Magnetism
S. 280-283, S.299-303 und S. 315-326
- [3] A.G. Rojo
Absence of Gap for Infinite Half-Integer Spin Ladders with an Odd Number of Legs
Phys. Rev. B 53, S. 9172-9174 (1996)
- [4] Renard et al.
Presumption for a quantum energy gap in the quasi-one-dimensional $S = 1$ Heisenberg antiferromagnet ($Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$)
Europhysics Letters vol. 3, no. 8, S. 945-952 (1987)
- [5] M. Kenzelmann et al.
Properties of Haldane excitations and multiparticle states in the antiferromagnetic spin-1 chain compound $CsNiCl_3$
Phys. Rev. B 66, 024407 (2002)
- [6] F.D.M. Haldane
Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Neel State
Phys. Rev. Lett. 50, S. 1153-1156 (1983)
- [7] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis
Two soluble models of an Antiferromagnetic chain
Annals of physics 16, S. 407-466 (1961)
- [8] I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb, H. Tasaki
Rigorous Results on Valence-Bond Ground States in Antiferromagnets
Phys. Rev. Lett. 59, S. 799-802 (1987)