

Magnetische Moleküle, frustrierte Spingitter und lochdotierte Kuprate: faszinierende Eigenschaften durch starke Korrelationen

Jürgen Schnack

Fakultät für Physik – Universität Bielefeld
<http://obelix.physik.uni-bielefeld.de/~schnack/>

Antrittsvorlesung, 16. April 2007



文部科学省

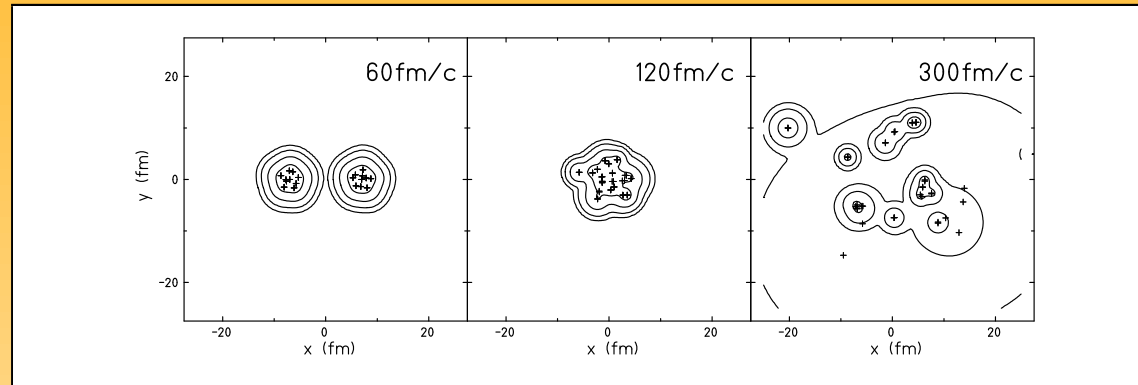
Inhalt

1. Darüber werde ich heute nicht sprechen.
2. Kurzportrait: Magnetische Moleküle
3. Werkzeugkiste: Heisenberg-Modell *et al.*
4. Rotationsbänder in Antiferromagneten
5. Magnetisierungssprünge in frustrierten Antiferromagneten
6. Erhöhter magnetokalorischer Effekt
7. Lochdotierte Kuprate
8. Hardware, Ausblick, Dank

Darüber werde ich heute
nicht sprechen.

Darüber rede ich heute nicht I

Struktur und Dynamik fermionischer Vielteilchensysteme



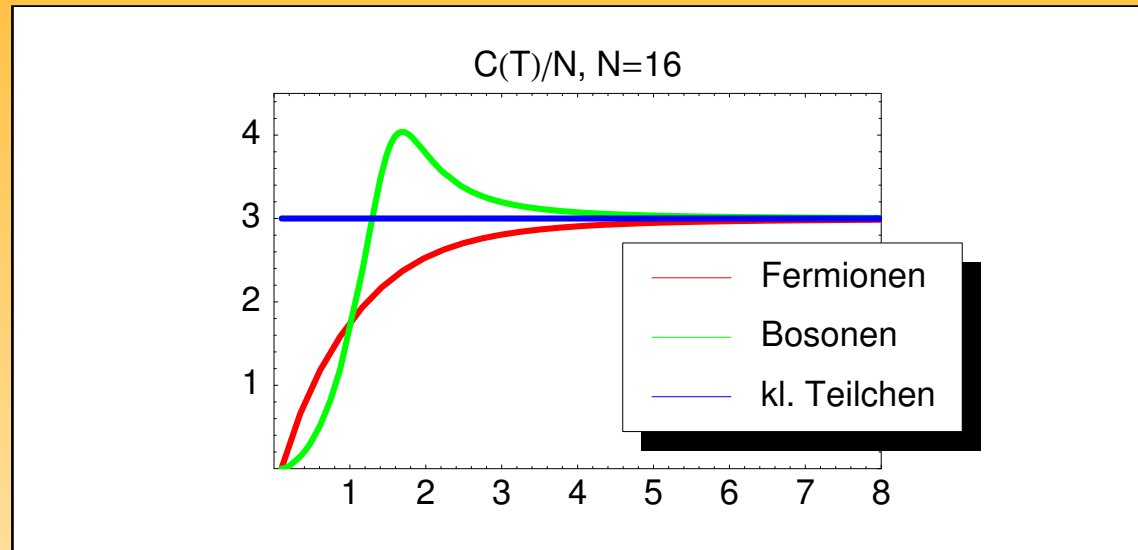
- Zeitabhängiges Variationsprinzip (1): $0 = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \langle Q(t) | i \frac{d}{dt} - \underline{H} | Q(t) \rangle .$
- Fermionische Molekulardynamik (FMD) zur Beschreibung nichtrelativistischer Kern-Kern-Stöße (2).
- Approximative Zeitentwicklung auch für andere Quantensysteme ableitbar, siehe z.B. Saalman/Schmidt (3) zu Stößen atomarer Cluster.

(1) P. Kramer, M. Saraceno, Lecture Notes in Physics **140**, Springer, Berlin (1981)

(2) H. Feldmeier, J. Schnack, Rev. Mod. Phys. **72** (2000) 655–688

(3) U. Saalman, R. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 3213–3216

Darüber rede ich heute nicht II Ideale Quantengase in magnetischen Fallen



- Wenn $Z_1(\beta) = -Z_1(-\beta)$, dann

$$Z_N^B(\beta) = (-1)^N Z_N^F(-\beta), \quad E_N^B(\beta) = -E_N^F(-\beta), \quad C_N^B(\beta) = C_N^F(-\beta)$$

- Fermion-Boson-Symmetrie in harm. Oszillatoren ungerader Raumdimension

H.-J. Schmidt, J. Schnack, Physica A **265**, 584 (1999)

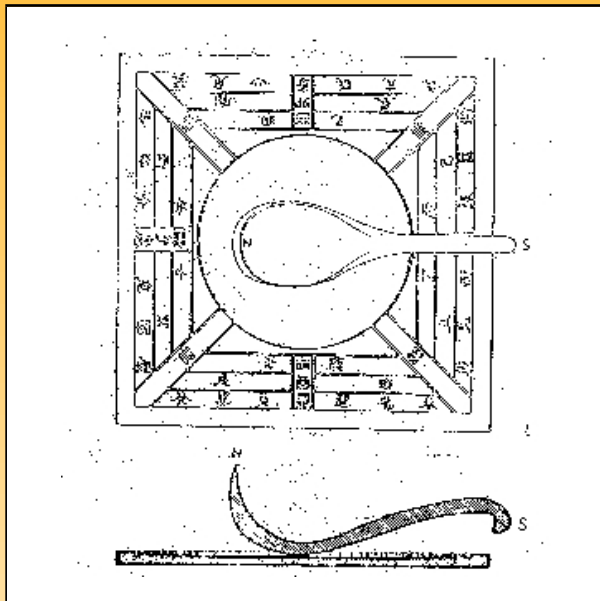
Darüber rede ich heute nicht III Varus-Schlacht



Wo die Varus-Schlacht stattgefunden hat,
kann nach dem Vortrag per Armdrücken entschieden werden.
(Es sind genügend Osnabrücker da.)

Zum Thema

Vorwort zum Magnetismus I

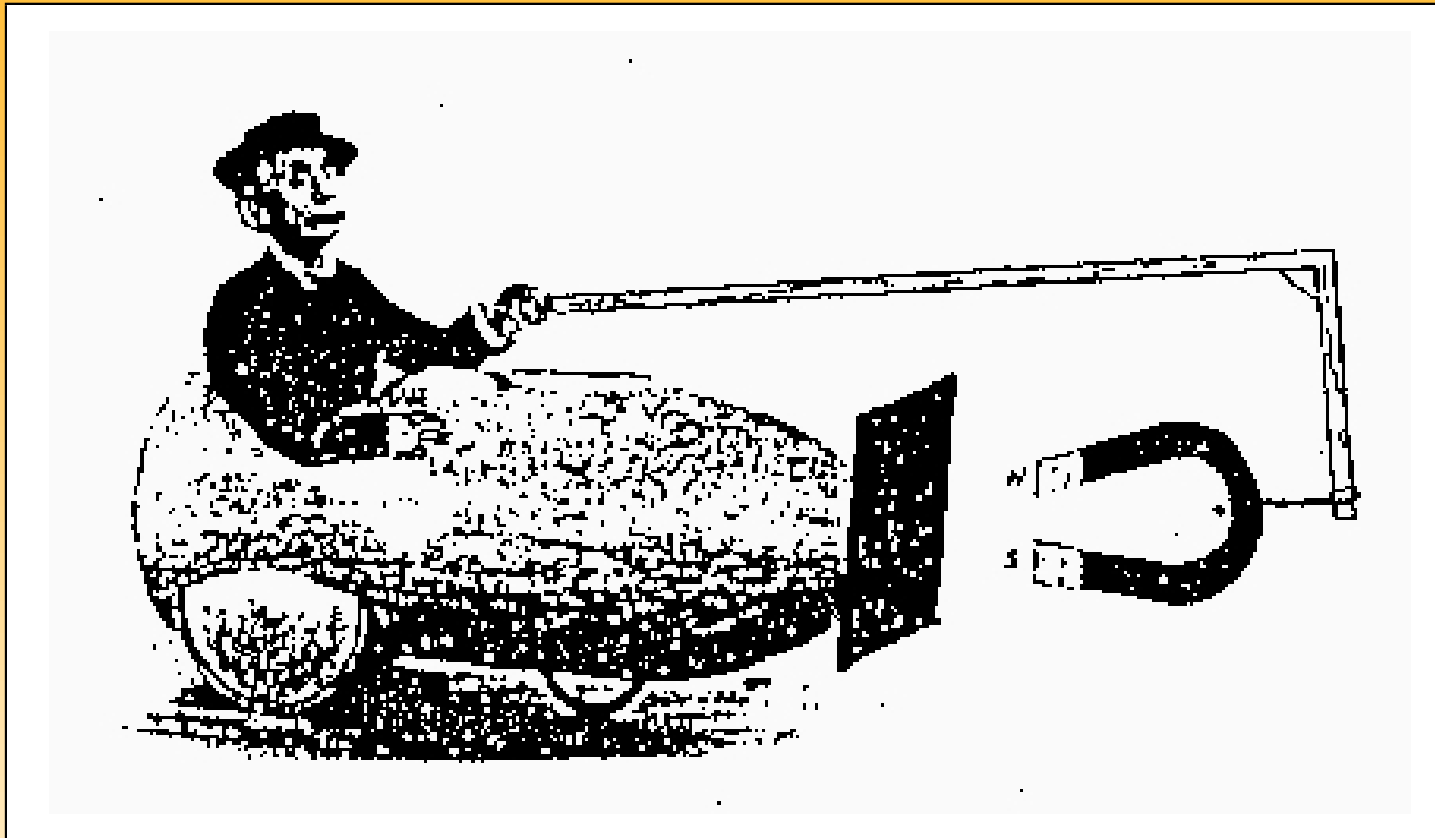


- Magnetisches Gestein in Ägypten, China und Europa lange vor Christi Geburt bekannt.
- 100 nach Christus kannten die Chinesen schon einen „Südzeiger“.
- Magneten wurden obskure Eigenschaften zugeschrieben; bis zur Entwicklung der Quantenmechanik waren magnetische Materialien praktisch unverstanden.

Placed on the pillow of a guilty wife, it would make her confess her iniquities as she slept. It could be used for the treatment of many ailments, and as a contraceptive. There were curious beliefs that its effects could be countered by garlic or onions. It was said that sailors should be forbidden to eat these vegetables, in case their breath should demagnetise the needles.

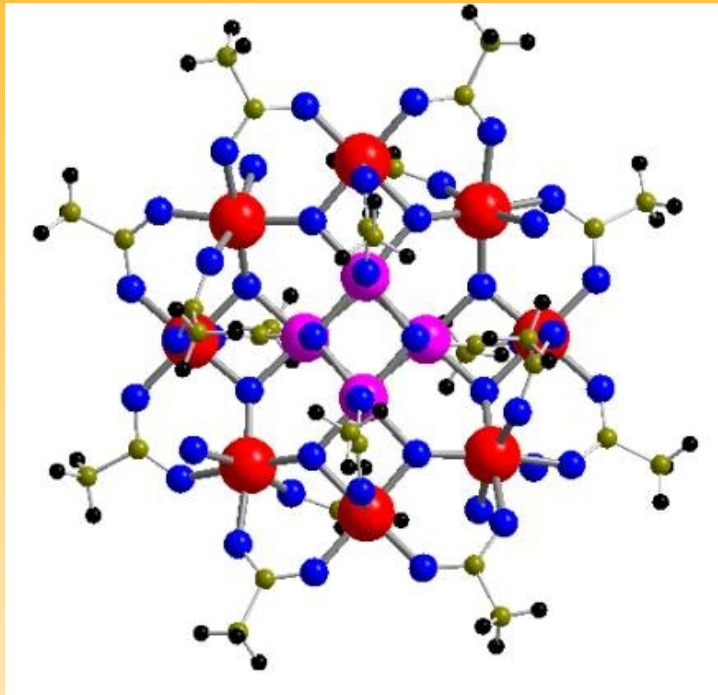
<http://www.tcd.ie/Physics/Schools/what/materials/magnetism>

Vorwort zum Magnetismus II



- Magnete mußten lange für haarsträubende Sachen herhalten und wurden auch gern zur Konstruktion des *perpetuum mobile* verwendet (Patente bis 1970), vgl. auch *Jim Knopf und die Wilde 13*.

Magnetische Moleküle I

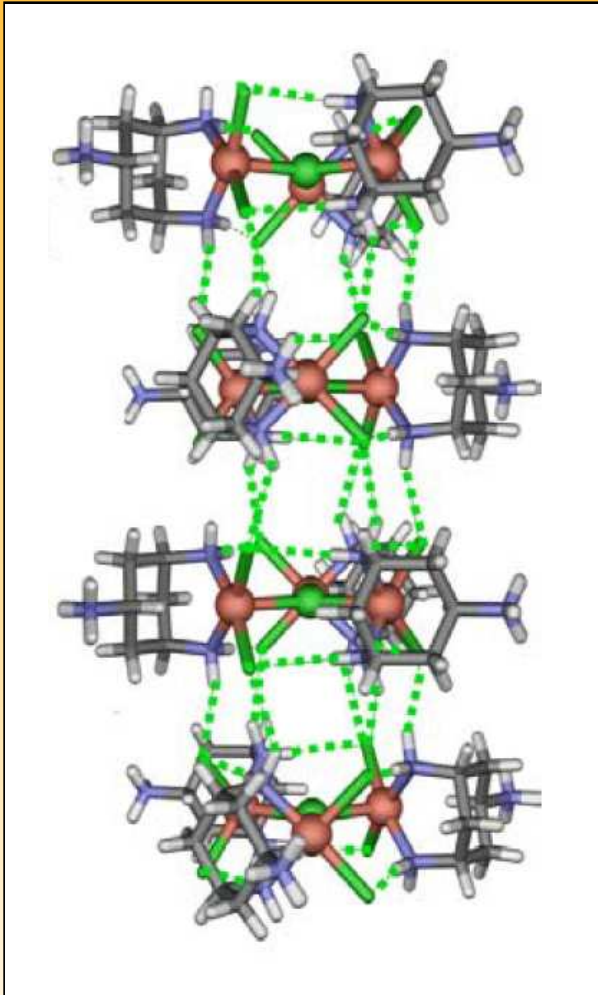


Mn₁₂

- Anorganische, organische oder metallorganische Verbindungen, z.B. Polyoxometallate. Magnetische Momente durch Radikale oder paramagnetische Ionen wie Eisen (Fe), Chrom (Cr), Kupfer (Cu), Nickel (Ni), Vanadium (V), Mangan (Mn), oder Seltene Erden.
- Spin der Einzelionen: $1/2 \leq s \leq 7/2$;
- Intermolekulare Wechselwirkungen sind klein, deshalb spiegeln Messungen am Kristall oder Pulver die thermischen Eigenschaften einzelner Moleküle wieder.

Sehr gute Einführung in das Thema: *Magnetism goes Nano*, Ed. Stefan Blügel, Thomas Brückel, and Claus M. Schneider, FZ Jülich, Institute of Solid State Research, Lecture Notes 36 Jülich 2005

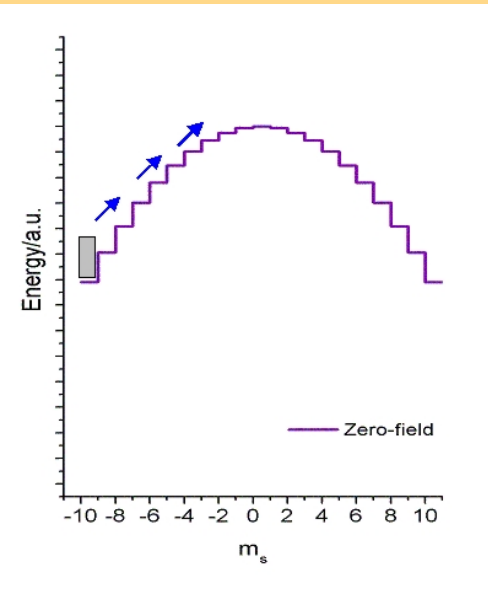
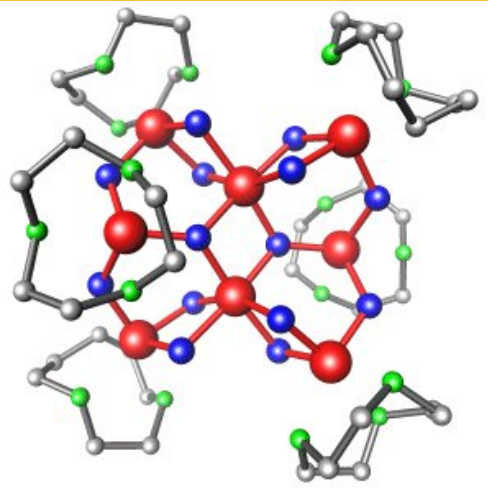
Magnetische Moleküle II



- Dimere (Fe_2), Tetraeder (Cr_4), Würfel (Cr_8);
- Ringe, insbesondere Eisenringe (Fe_6 , Fe_{10} , ...);
- Komplexe Strukturen wie Mn_{12} – „Drosophila“ des molekularen Magnetismus;
- „Fußbälle“, d.h. Ikosidodekaeder wie Fe_{30} & V_{30} und viele weitere Makromoleküle;
- Ketten und planare Strukturen aus vernetzten molekularen Einheiten, z.B. Cu_3 -Spinröhre:

J. Schnack, H. Nojiri, P. Kögerler, G. J. T. Cooper, L. Cronin, Phys. Rev. B 70, 174420 (2004)

Magnetische Moleküle III



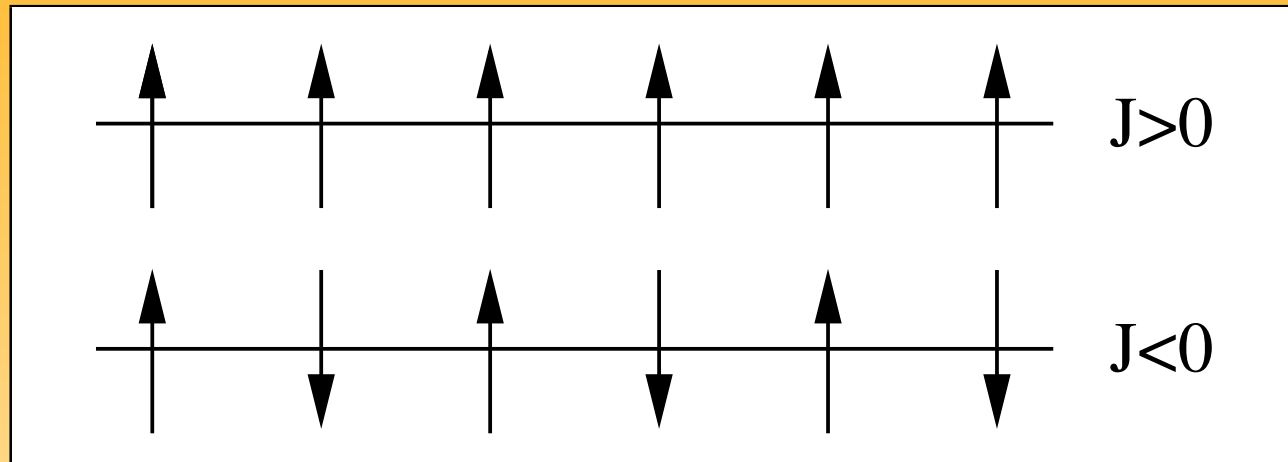
- Single Molecule Magnets (SMM): magnetische Moleküle mit großem Grundzustandsspin sowie Anisotropie: z.B. $S = 10$ für Mn_{12} oder Fe_8 ;
- Approximativer Einzelspin-Hamiltonian durch Anisotropie dominiert:

$$\tilde{H} = -D\tilde{S}_z^2 + \tilde{H}', \quad [\tilde{S}_z, \tilde{H}'] \neq 0$$

- Einzelne Moleküle zeigen metastabile Magnetisierung, Hysterese, Magnetisierungstunneln aus dem $-D\tilde{S}_z^2$ -Grundzustand sowie thermisch oder durch Phononen aktiviert;
- Aktuelle Forschungsbemühungen: Stabilität der Magnetisierung verbessern, auf Oberflächen oder in „break junctions“ untersuchen. \Rightarrow AG Glaser, UBI

Hamiltonian und Methoden

Magnetische Wechselwirkungen



- **Heisenberg-Modell:** $\underline{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}(i) \cdot \vec{s}(j)$
- **Ferromagnet:** möglichst gleichgerichtete Momente, $J > 0$.
- **Antiferromagnet:** möglichst entgegengesetzt gerichtete Momente, $J < 0$.
- **Interessante Korrelationen** sind die, die nicht so trivial aussehen wie in der Abbildung!

Modell-Hamiltonian

$$\underline{H} = \sum_{i,j} \vec{s}(i) \cdot \mathbf{J}_{ij} \cdot \vec{s}(j) + \sum_{i,j} \vec{D}_{ij} \cdot [\vec{s}(i) \times \vec{s}(j)] + \mu_B B \sum_i^N g_i s_z(i)$$

Austausch/Anisotropie
Dzyaloshinskii-Moriya
Zeeman

Für viele Substanzen sind die anisotropen Terme vernachlässigbar, dann ...

$$\underline{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{s}(i) \cdot \vec{s}(j) + g \mu_B B \sum_i^N s_z(i)$$

Heisenberg
Zeeman

Im folgenden wird lediglich der Heisenberg-Hamiltonoperator mit isotroper antiferromagnetischer Wechselwirkung ($J < 0$) zusammen mit dem Zeeman-Term verwendet.

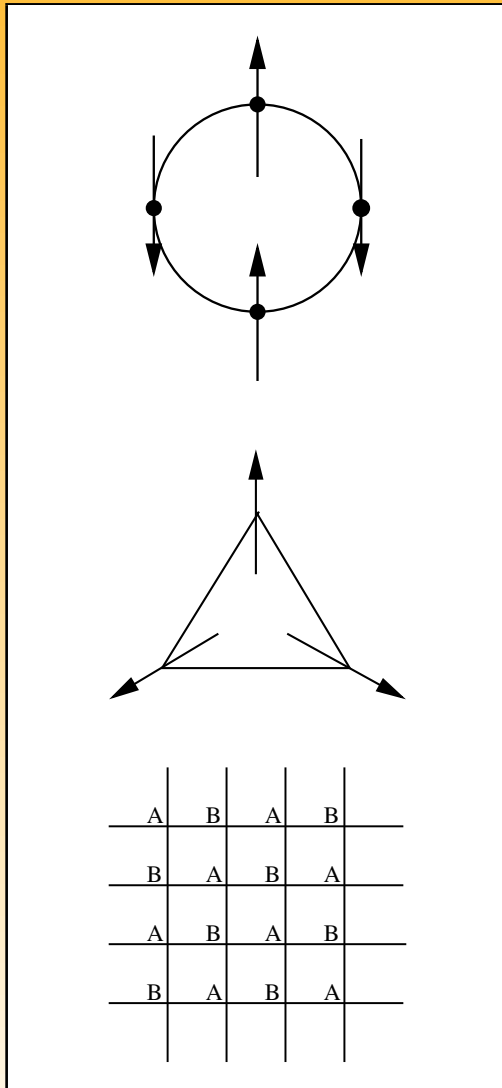
Meine Methoden

- Analytische oder numerisch exakte und vollständige Diagonalisierung des Hamiltonoperators: Methode der Wahl, das thermodynamische Verhalten kann vollständig modelliert werden;
- Lanczos-Diagonalisierung: einige tiefliegende Eigenzustände in orthogonalen Unterräumen können berechnet werden;
- Dichtematrixrenormierungsgruppentechnik (DMRG): ergibt oft nur einen Zielzustand für den avisierten Unterraum;
- Approximative Hamiltonoperatoren: ermöglichen gutes Verständnis für bestimmte Systeme;
- Spinkohärente Zustände: haben bisher keine echten Verbesserungen im Vergleich zu rein klassischer Spindynamik erbracht.

J. Schnack, *Molecular Magnetism*, in Lecture Notes in Physics 645, Springer, Berlin, Heidelberg (2004) 155-194

Allgemeingültige Ergebnisse zu unfrustrierten und frustrierten Spinsystemen

Definition von Frustration

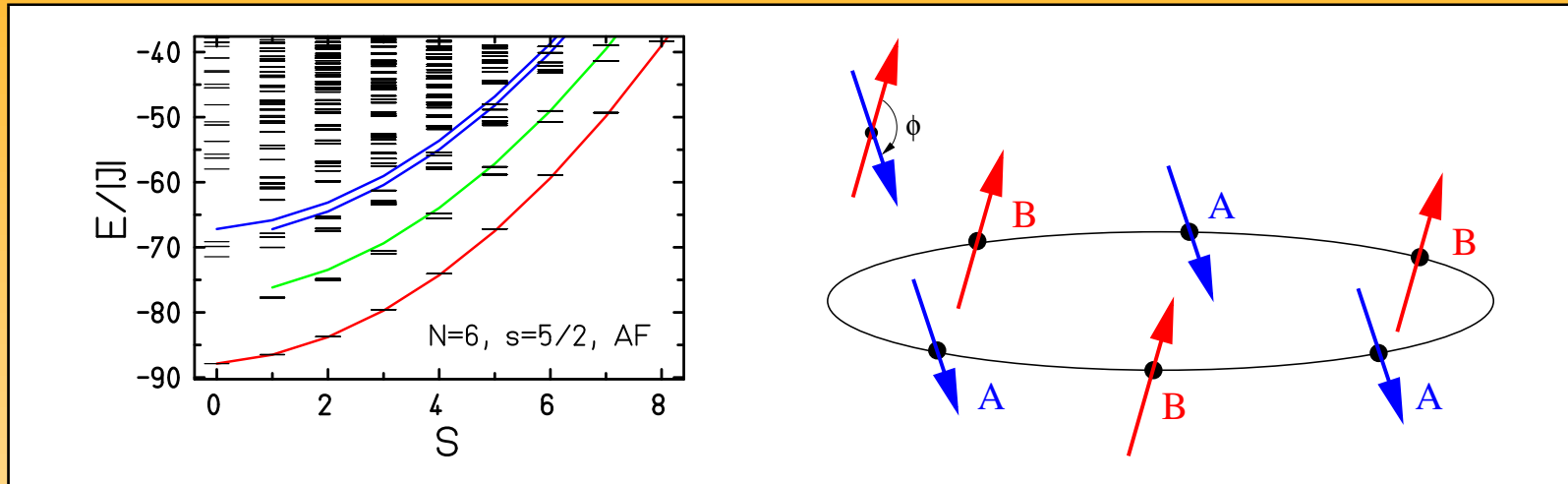


- Anschauliche Definition: Ein antiferromagnetisches Spinsystem ist frustriert, wenn im Grundzustand des entsprechenden klassischen Systems benachbarte Spins nicht antiparallel ausgerichtet sind.
- Mathematische Definition: Ein Spinsystem, das nicht bipartit ist, ist frustriert. Ein bipartites Spinsystem kann in zwei Untergitter A und B zerlegt werden, wobei für die Wechselwirkungen gilt: $J(x_A, y_B) \leq g^2$, $J(x_A, y_A) \geq g^2$, $J(x_B, y_B) \geq g^2$, vgl. (1,2).

(1) E.H. Lieb, T.D. Schultz, and D.C. Mattis, Ann. Phys. (N.Y.) **16**, 407 (1961)

(2) E.H. Lieb and D.C. Mattis, J. Math. Phys. **3**, 749 (1962)

Rotationsbänder in Antiferromagneten I

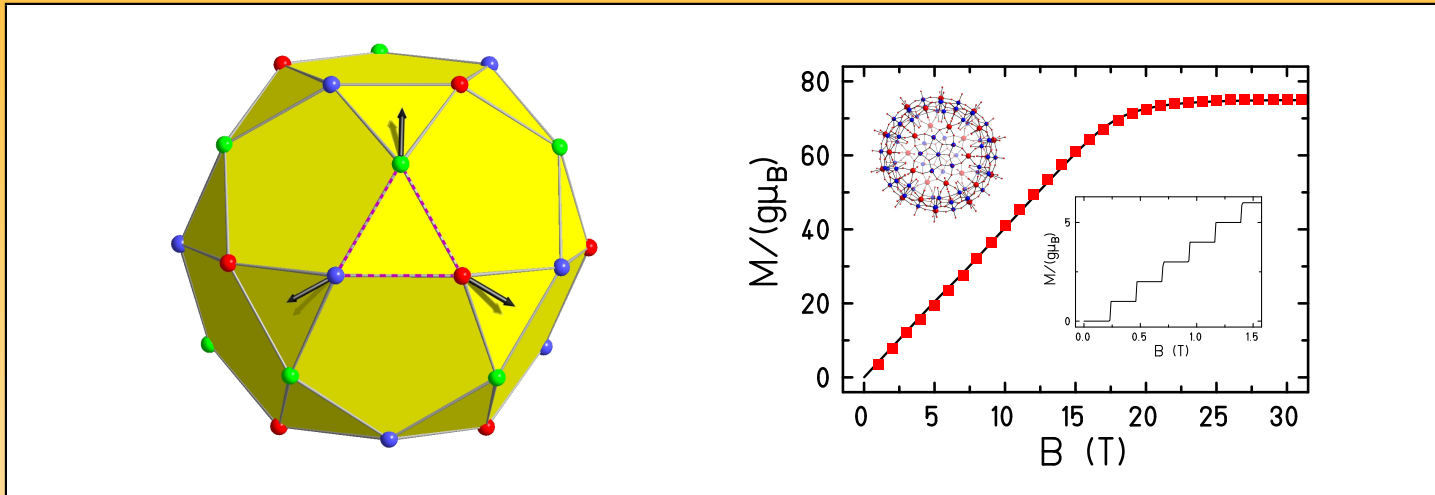


- Minimale Energien $E_{min}(S)$ bilden oft ein Rotationsband: Landé-Regel (1,2,3);
- Für bipartite Systeme: $\underline{H}^{eff} = -2 J_{eff} \vec{S}_A \cdot \vec{S}_B$, gitterunabhängig;
- Grundzustandsanregung zum 1. Triplett – Rotation des Néel-Vektors, zum zweiten Band (E-Band) – Spinwellen (4).

(1) A. Caneschi *et al.*, Chem. Eur. J. **2**, 1379 (1996), G. L. Abbati *et al.*, Inorg. Chim. Acta **297**, 291 (2000)
 (2) J. Schnack and M. Luban, Phys. Rev. B **63**, 014418 (2001)
 (3) O. Waldmann, Phys. Rev. B **65**, 024424 (2002)
 (4) P.W. Anderson, Phys. Rev. B **86**, 694 (1952), O. Waldmann *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 237202 (2003).

Rotationsbänder in Antiferromagneten II

Approximativer Hamiltonian für $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\}$



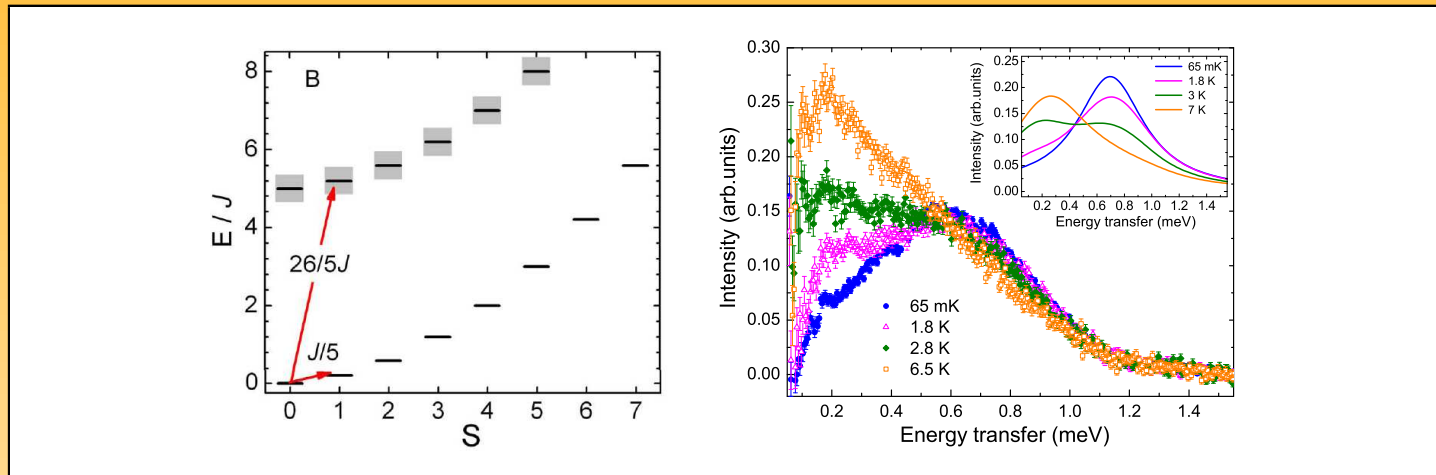
$$\underline{H} = -2J \sum_{(u < v)} \underline{\tilde{s}}(u) \cdot \underline{\tilde{s}}(v) \approx -2J_{\text{eff}} \left[\underline{\tilde{S}}_A \cdot \underline{\tilde{S}}_B + \underline{\tilde{S}}_B \cdot \underline{\tilde{S}}_C + \underline{\tilde{S}}_C \cdot \underline{\tilde{S}}_A \right] = \underline{H}^{\text{eff}}$$

System aus 3 Untergittern, klassischer 120° -Grundzustand („QCD weiß“);
 Tieftemperaturverhalten der Magnetisierung gut beschrieben.

J. Schnack, M. Luban, R. Modler, Europhys. Lett. **56**, 863 (2001)

Rotationsbänder in Antiferromagneten III

Neutronenstreuung an $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\}$



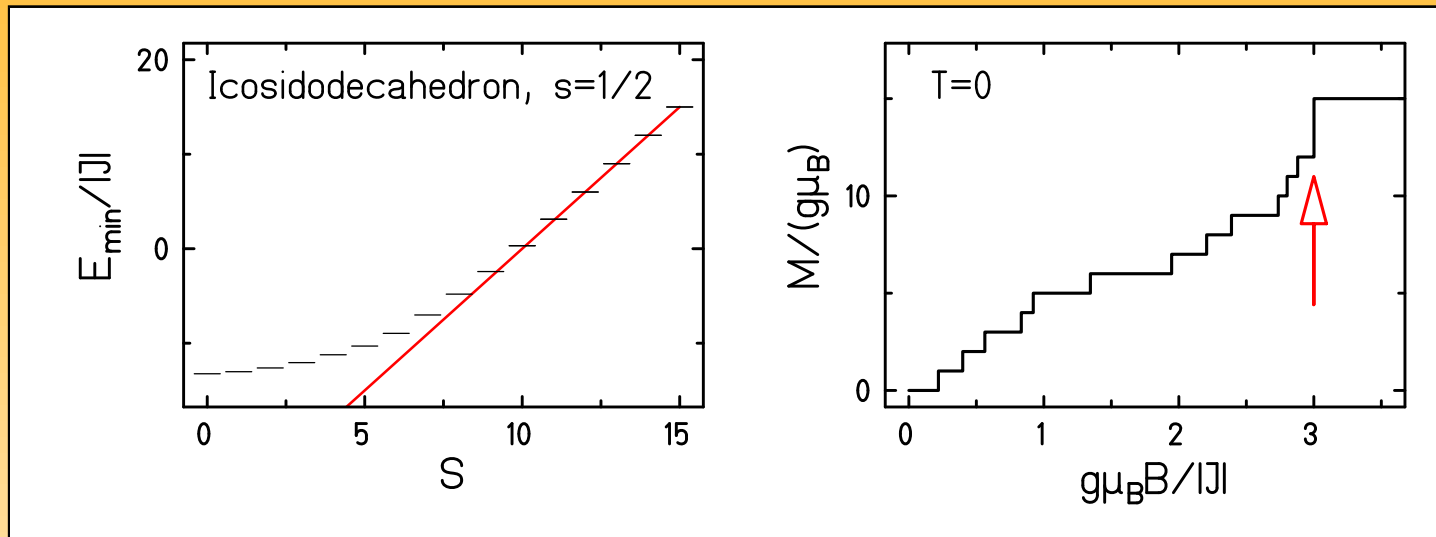
- Approximativer Hamiltonoperator sagt Bandseparation voraus (1);
- INS zeigt breiten Absorptionspeak bei der korrekten Energie;
- Breite der Verteilung ist Anzeichen für Frustrationseffekte (2).

(1) V. O. Garlea, S. E. Nagler, J. L. Zarestky, C. Stassis, D. Vaknin, P. Kögerler, D. F. McMorrow, C. Niedermayer, D. A. Tennant, B. Lake, Y. Qiu, M. Exler, J. Schnack, M. Luban, Phys. Rev. B **73**, 024414 (2006);

(2) O. Waldmann, Phys. Rev. B **75**, 012415 (2007).

Magnetisierungssprünge in frustrierten Antiferromagneten I

{Mo₇₂Fe₃₀}



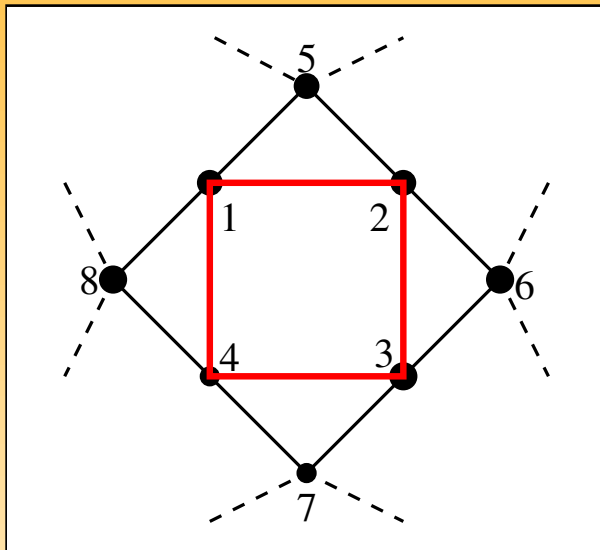
- Trotz aller Erfolge: Die Parabel ist gerade! Zumindest oben.
- $E_{\min}(S)$ ist linear in S für große S (1);
- Eigenschaft gilt für Heisenberg- und XXZ-Modelle unabhängig von s (2);

(1) J. Schnack, H.-J. Schmidt, J. Richter, J. Schulenburg, Eur. Phys. J. B **24**, 475 (2001)

(2) H.-J. Schmidt, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 6545 (2002)

Magnetisierungssprünge in frustrierten Antiferromagneten II

Konzept der lokalisierten Magnonen



- $|\text{lok. Magnon}\rangle = \frac{1}{2} (|1\rangle - |2\rangle + |3\rangle - |4\rangle)$
- $|1\rangle = \tilde{s}^-(1) |\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle$ etc.
- $\tilde{H} |\text{lok. Magnon}\rangle \propto |\text{lok. Magnon}\rangle$
- **Lokalisiertes Magnon ist Eigenzustand niedrigster Energie im Ein-Magnonen-Raum (1,2).**

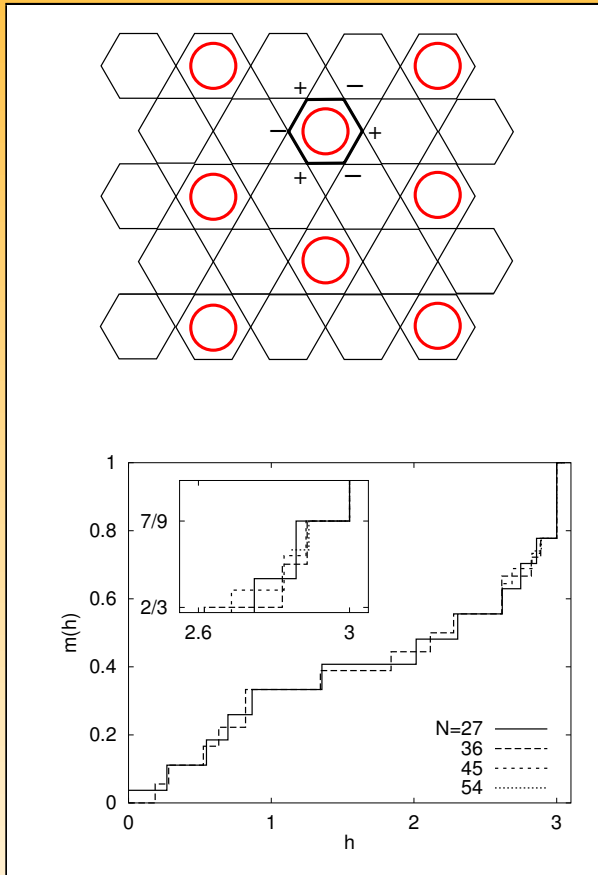
- Anschaulich: Dreiecksstrukturen sperren lokalisierte Magnonen ein.

(1) J. Schnack, H.-J. Schmidt, J. Richter, J. Schulenburg, Eur. Phys. J. B **24**, 475 (2001)

(2) J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, H.-J. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **88**, 167207 (2002)

Magnetisierungssprünge in frustrierten Antiferromagneten III

Makroskopischer Quanteneffekt bei Gittern



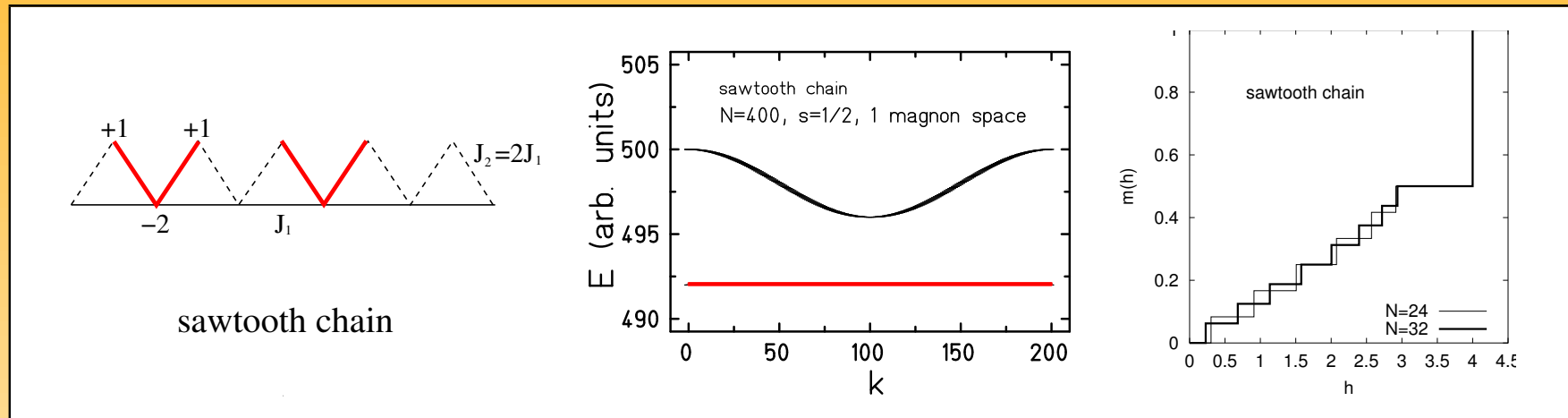
- Nichtwechselwirkende lokalisierte 1-Magnon-Zustände können auf Gittern angeordnet werden, z. B. Kagome, Pyrochlore, ...;
- Jeder Zustand aus n unabhängigen Magnonen ist Grundzustand im Hilbertraum zu $M = Ns - n$; Maximale Anzahl: z.B. Kagome – $n = N/9$;
- $E_{\min}(M)$ linear \Rightarrow Magnetisierungssprung;
- Sprung ist makroskopischer Quanteneffekt!
- Selten: analytisch bekannte Vielteilchenzustände

J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, H.-J. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **88**, 167207 (2002)

J. Richter, J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, H.-J. Schmidt, J. Phys.: Condens. Matter **16**, S779 (2004)

Magnetisierungssprünge in frustrierten Antiferromagneten V

Alternative Betrachtung: Flache Bänder



- Flaches Band minimaler Energie im 1-Magnon-Raum, d. h. hohe Entartung;
- Lokalisierte Magnonen sind Superpositionen aus Zuständen des flachen Bandes.
- Analogie zum „Flachbandferromagnetismus“ (H. Tasaki & A. Mielke), vgl. (1).

(1) A. Honecker, J. Richter, *Condens. Matter Phys.* **8**, 813 (2005)

Erhöhter magnetokalorischer Effekt I

Grundlagen

$$\left(\frac{\partial T}{\partial B}\right)_S = -\frac{T}{C} \left(\frac{\partial S}{\partial B}\right)_T$$

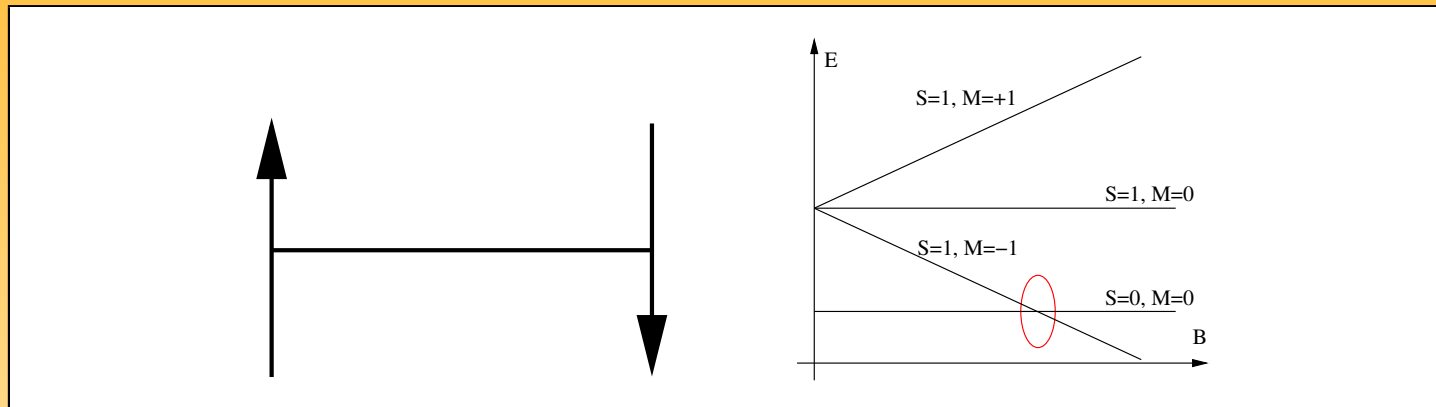
adiabatische
Temperaturänderung

- Aufheizen oder Abkühlen in einem veränderlichen Magnetfeld.
1881 von Emil Warburg bei Eisen entdeckt.
 - Typische Raten: 0.5 ... 2 K/T.
 - 3 ... 4 K/T z. B. in $\text{Gd}_5(\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x})_4$ -Verbindungen ($x \leq 0.5$) werden in der Literatur bereits als „Giant Magnetocaloric Effect“ bezeichnet.
- Der magnetokalorische Effekt ist bei großen isothermen Entropieänderungen, z. B. bei Phasenübergängen, ebenfalls besonders groß (1-3).

- (1) V.K. Pecharsky, K.A. Gschneidner, Jr., A. O. Pecharsky, and A. M. Tishin, Phys. Rev. B **64**, 144406 (2001)
 (2) Lijun Zhu, M. Garst, A. Rosch, and Qimiao Si, Phys. Rev. Lett. **91**, 066404 (2003)
 (3) M.E. Zhitomirsky, A. Honecker, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. **2004**, P07012 (2004)

Erhöhter magnetokalorischer Effekt II

Das AF-($s = 1/2$)-Dimer als didaktisches Beispiel

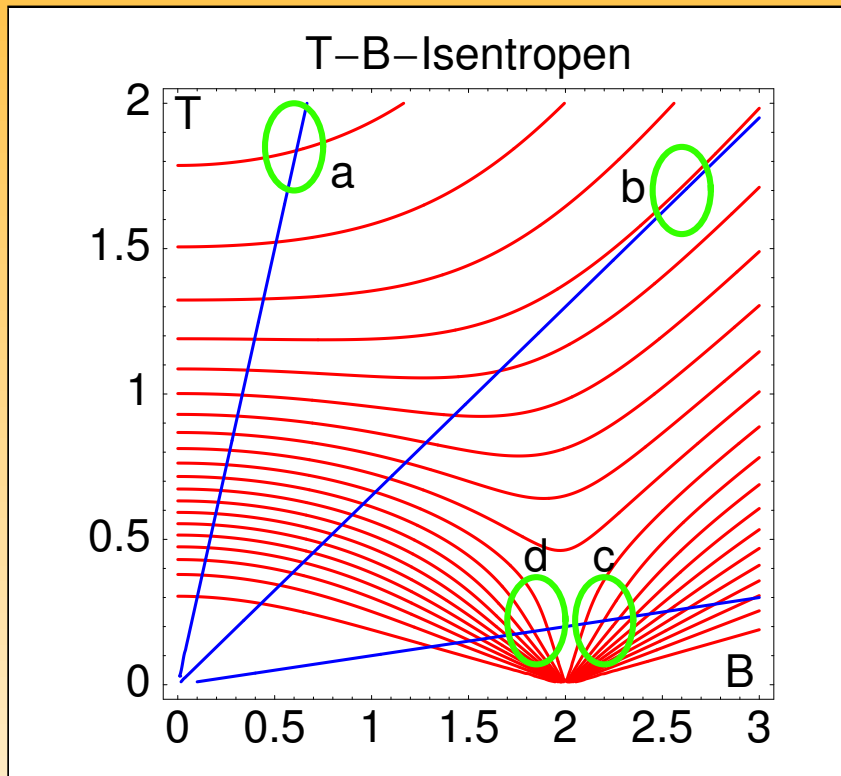


- Singlett-Triplett-Niveaureuzung bewirkt einen sog. Quantenphasenübergang (1) bei $T = 0$ als Funktion von B .
- $M(T = 0, B)$ und $S(T = 0, B)$ nicht analytisch als Funktion von B ,
- $M(T = 0, B)$ zeigt Sprung bei B_c ; $S(T = 0, B_c) = k_B \ln 2$, sonst Null.

(1) An dieser Stelle wurde ich schon mehrfach zum Rededuell gefordert!

Erhöhter magnetokalorischer Effekt III

Isentropen des AF-($s = 1/2$)-Dimers



blau: idealer Paramagnet, rot: AF-Dimer

Magnetokalorischer Effekt:

(a) vermindert,

(b) gleich,

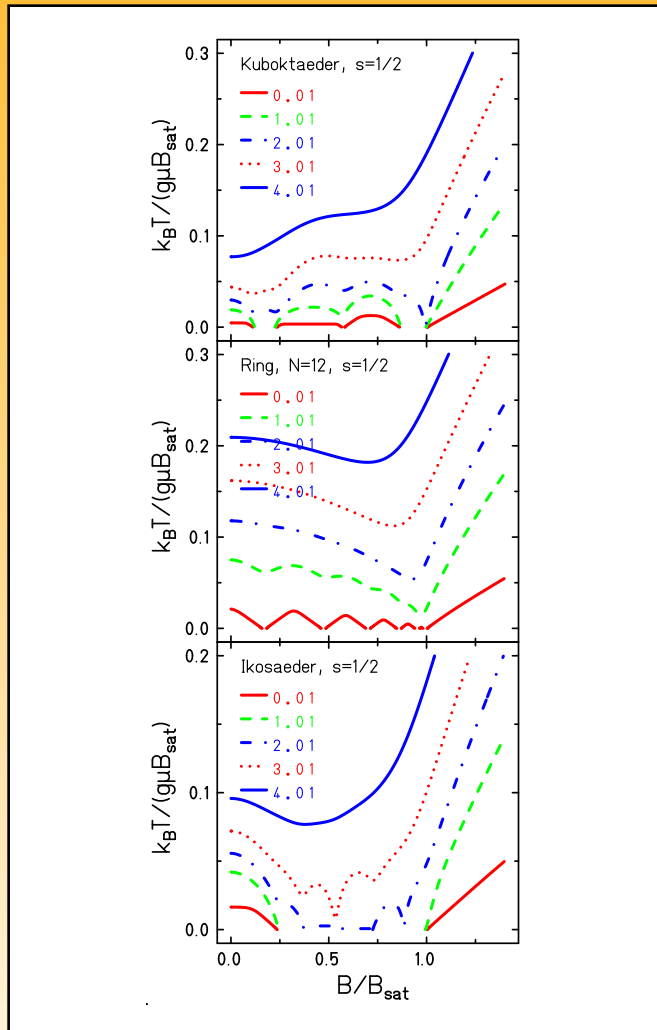
(c) erhöht,

(d) entgegengesetzt

verglichen mit einem idealen Paramagneten.

Der Fall (d) tritt beim Paramagneten nicht auf.

Erhöhter magnetokalorischer Effekt IV



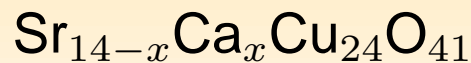
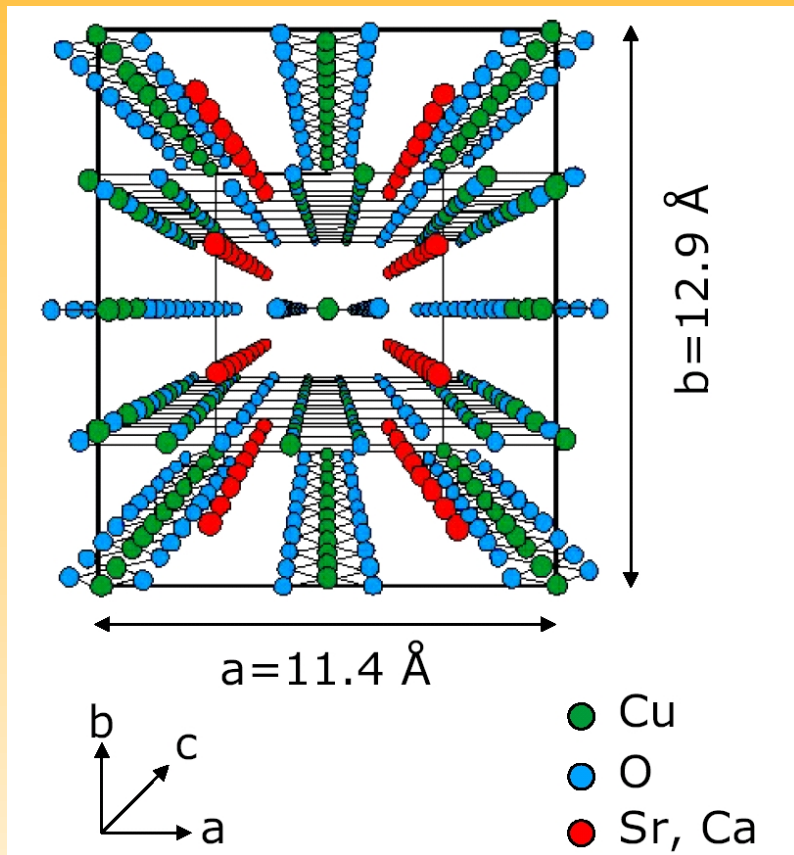
- Graphik zeigt Isentropen des frustrierten Kuboktaeders, des nicht frustrierten Spinrings ($N = 12$) und des frustrierten Ikosaeders (chemisch realistische Strukturen);
- Kuboktaeder zeigt wegen unabhängiger Magnonen einen außergewöhnlich großen Magnetisierungssprung;
- Bipartiter antiferromagnetischer Spinring weist nur gewöhnliche Niveaufkreuzung am Sättigungsfeld auf \Rightarrow geringere Kühlrate;
- Ikosaeder zeigt ungewöhnliches Verhalten wegen hochgradiger Entartung fast aller Energieniveaus (1); wird weiter untersucht.

(1) J. Schnack, R. Schmidt, J. Richter, submitted, cond-mat/0703480

Die Telephonnummerverbindung



$\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ – Struktur

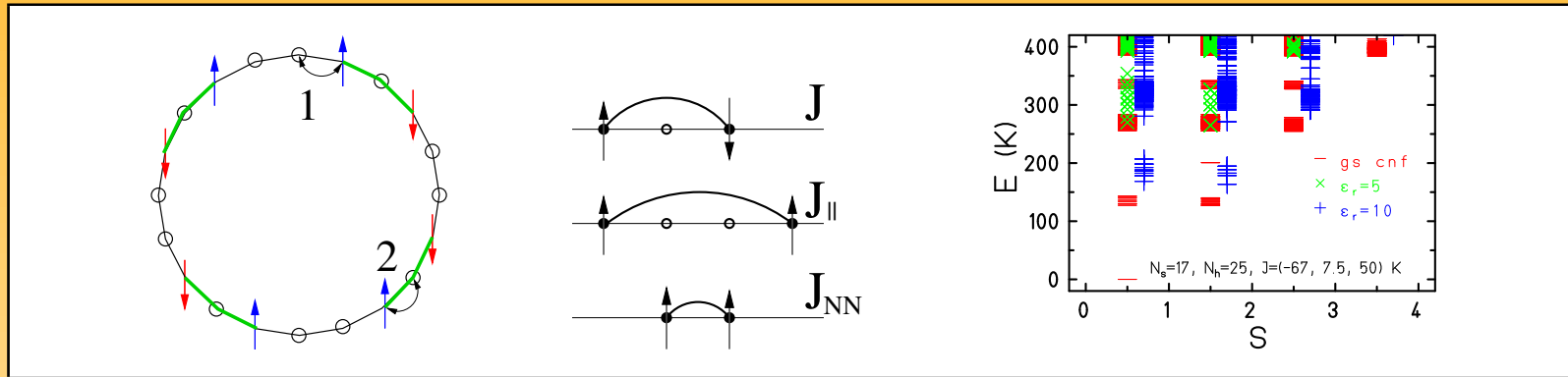


- Enthält schwach gekoppelte Ketten und Leitern; intrinsisch mit 6 Löchern pro Formeleinheit dotiert.
Bei Raumtemperatur sind alle (?) Löcher auf den Ketten (1).
- Leiter hat große Singlett-Triplett-Energielücke: unter $\approx 200 \text{ K}$ tragen nur die Ketten zum Magnetismus bei (1).
- 60 % Löcher suggerieren Konfiguration aus Dimeren; DFT-Rechnungen favorisieren irreguläre Struktur (2).

(1) N. Nücker *et al.*, Phys. Rev. B **62**, 14384 (2000)

(2) A. Gelle & M.B. Lepeitit, Phys. Rev. Lett. **92**, 236402 (2004)

Sr₁₄Cu₂₄O₄₁ – Effektives Heisenberg-Model



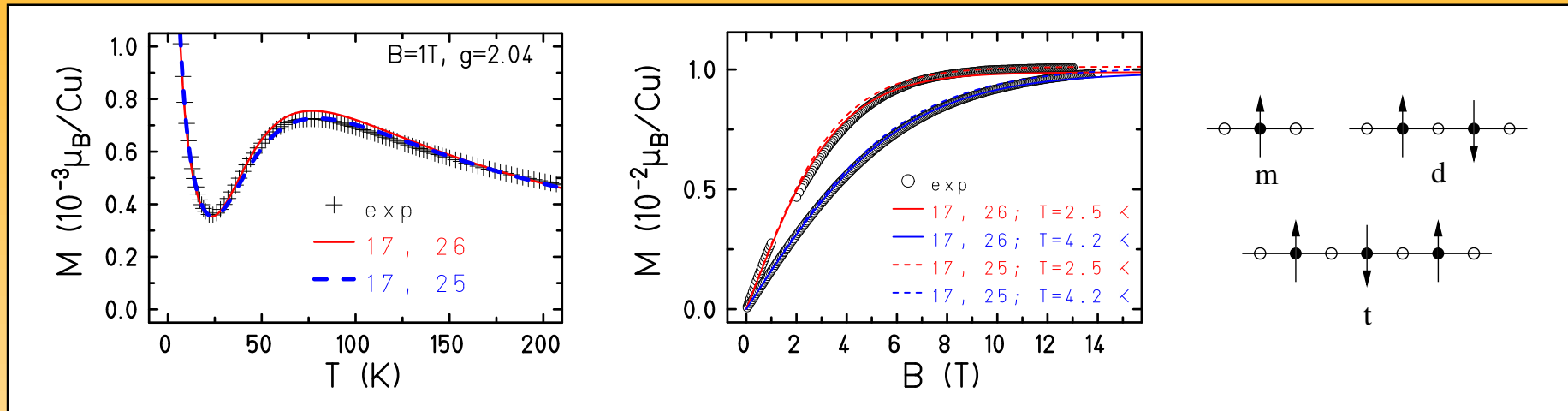
Ansatz: Hamiltonoperator hängt von Spin-Loch-Konfiguration \vec{c} und abgeschirmter Coulomb-Wechselwirkung $V(\vec{c})$ ab (1)

$$\tilde{H} = \sum_{\vec{c}} \left(\tilde{H}(\vec{c}) + V(\vec{c}) \right), \tilde{H}(\vec{c}) = - \sum_{u,v} J_{uv}(\vec{c}) \vec{s}(u) \cdot \vec{s}(v), V(\vec{c}) = \frac{V_0}{2} \sum_{u \neq v} \frac{1}{|u-v|}$$

$$J_{uv}(\vec{c}) : J = -67 \text{ K}, J_{||} = 7.5 \text{ K}, J_{NN} = 50 \text{ K}, V_0 = e^2 / (4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r_0)$$

(1) J. Schnack, Eur. Phys. J. B **45**, 311 (2005)

Sr₁₄Cu₂₄O₄₁ – Magnetisierung



- Sehr gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment (1).
- Für $\epsilon_r \lesssim 5$ trägt nur eine Konfiguration \vec{c} bei:
 $\vec{c}_{17,26} = m d d d d d d d d$ ($\rho_h = 60.4\%$), $\vec{c}_{17,25} = t d d d d d d d$ ($\rho_h = 59.5\%$).
- Magnetisierung von Sr_{14-x}Ca_xCu₂₄O₄₁ wird gegenwärtig untersucht.

(1) R. Klingeler, B. Büchner, K.-Y. Choi, V. Kataev, U. Ammerahl, A. Revcolevschi, J. Schnack, Phys. Rev. B **73**, 014426 (2006)

Meine Hardware

Meine Hardware I



1.
(braucht als Treibstoff ...)

Meine Hardware II



2.

Hardware III



- BULL NovaScale Server:
- **Schon bald:**
8 ITANIUM TUKWILA (a 4 cores),
256 GB RAM
(eine unvorstellbare Rechenleistung)
- **Schon jetzt:**
4 ITANIUM MONTECITO (a 2 cores),
64 GB RAM
(eigentlich auch schon unvorstellbar)

Hardware IV

```

schnack@singlet:~/hpc
File Edit View Terminal Tabs Help
top - 15:50:00 up 35 min, 1 user, load average: 7.72, 7.82, 6.41
Tasks: 132 total, 9 running, 123 sleeping, 0 stopped, 0 zombie
Cpu0  : 100.0% us,  0.0% sy,  0.0% ni,  0.0% id,  0.0% wa,  0.0% hi,  0.0% si
Cpu1  : 100.0% us,  0.0% sy,  0.0% ni,  0.0% id,  0.0% wa,  0.0% hi,  0.0% si
Cpu2  : 100.0% us,  0.0% sy,  0.0% ni,  0.0% id,  0.0% wa,  0.0% hi,  0.0% si
Cpu3  : 100.0% us,  0.0% sy,  0.0% ni,  0.0% id,  0.0% wa,  0.0% hi,  0.0% si
Cpu4  : 100.0% us,  0.0% sy,  0.0% ni,  0.0% id,  0.0% wa,  0.0% hi,  0.0% si
Cpu5  : 100.0% us,  0.0% sy,  0.0% ni,  0.0% id,  0.0% wa,  0.0% hi,  0.0% si
Cpu6  : 100.0% us,  0.0% sy,  0.0% ni,  0.0% id,  0.0% wa,  0.0% hi,  0.0% si
Cpu7  : 100.0% us,  0.0% sy,  0.0% ni,  0.0% id,  0.0% wa,  0.0% hi,  0.0% si
Mem:  66751936k total,  9873792k used,  56878144k free,  142656k buffers
Swap: 2047872k total,    0k used,  2047872k free,  359040k cached

  PID USER   PR  NI  VIRT  RES  SHR  S  %CPU  %MEM    TIME+  COMMAND
 5390 schnack 25   0 15.6g  8.5g 5952  R  99.9  13.4   24:53.33 glanczoshm-dode
 5396 schnack 25   0 15.6g  8.5g 5952  R  99.9  13.4   24:37.46 glanczoshm-dode
 5397 schnack 25   0 15.6g  8.5g 5952  R  99.9  13.4   24:52.95 glanczoshm-dode
 5398 schnack 25   0 15.6g  8.5g 5952  R  99.9  13.4   24:57.60 glanczoshm-dode
 5399 schnack 25   0 15.6g  8.5g 5952  R  99.9  13.4   25:39.64 glanczoshm-dode
 5400 schnack 25   0 15.6g  8.5g 5952  R  99.9  13.4   25:10.02 glanczoshm-dode
 5401 schnack 25   0 15.6g  8.5g 5952  R  99.9  13.4   25:39.93 glanczoshm-dode
 5402 schnack 25   0 15.6g  8.5g 5952  R  99.9  13.4   25:09.29 glanczoshm-dode
     1 root    15   0  5184  2880 2048  S   0.0   0.0    0:14.44 init
     2 root    RT   0     0     0     0  S   0.0   0.0    0:00.00 migration/0
    
```

Hardware V



- **Ziel:**
Numerisch exakte Behandlung kleiner Quantensysteme;
Grundzustände,
Spektroskopische Daten,
Thermodynamik,
Zeitentwicklung.
- **Methodische Probleme:**
Parallele Verarbeitung großer Probleme der linearen Algebra;
Parallelisierung exakter Diagonalisierungsroutinen,
Parallelisierung approximativer Diagonalisierungsroutinen (Lanczos, DMRG),
Numerische Genauigkeit bei Vektoren mit mehr als 10^8 Einträgen sicherstellen.

Ausblick & offene Probleme

Ausblick & offene Probleme

- Detailliertes Verständnis der magnetischen Eigenschaften von in der AG Prof. Glaser synthetisierten Einzelmolekülmagneten (Antrag Forschergruppe).
- Untersuchung der grundlegenden Eigenschaften frustrierter Antiferromagnete, z.B. Magnetokalorik des Ikosaeders.
- Weitere Erforschung von Kupraten, jetzt allerdings im Hubbard-Modell.
- Entwicklung/Anpassung/Nutzung numerischer Hochleistungsroutinen der linearen Algebra (openMP).
- Spinwellentheorie für magnetische Moleküle (Promotion Roman Schnalle).
- Molekulare Magnetostriktion am $\{\text{Ni}_4\text{Mo}_{12}\}$ (Promotion Mirko Brüger)
- ...

Dank

Vielen Dank an meine Mitstreiter weltweit

- K. Bärwinkel, H.-J. Schmidt, M. Allalen, M. Brüger, D. Mentrup, D. Müter, M. Exler, P. Hage, F. Hesmer, K. Jahns, F. Ouchni, R. Schnalle, P. Shchelokovskyy, S. Torbrügge & M. Neumann, K. Küpper, M. Prinz (UOS);
- M. Luban, D. Vaknin (Ames Lab, USA); P. Kögerler (RWTH, Jülich, Ames)
J. Musfeld (U. of Tennessee, USA); N. Dalal (Florida State, USA);
- R.E.P. Winpenny (Man U, UK); L. Cronin (U. of Glasgow, UK);
H. Nojiri (Tohoku University, Japan); A. Postnikov (U. Metz)
- A. Müller (U. Bielefeld) & Chr. Schröder (FH Bielefeld);
J. Richter, J. Schulenburg, R. Schmidt (U. Magdeburg);
S. Blügel (FZ Jülich); A. Honecker (U. Göttingen);
E. Rentschler (U. Mainz); U. Kortz (IUB); A. Tennant, B. Lake (HMI Berlin);
- B. Büchner, V. Kataev, R. Klingeler (IFW Dresden)

Mein besonderer Dank gilt ...



H. Feldmeier



K. Bärwinkel



H.-J. Schmidt



Chr. Schröder



M. Luban



meinem Vater



meiner Familie

... und für die freundliche Aufnahme



F. Schmid



P. Reimann



H. Litschewsky



B. West

- O. Kaczmarek & G. Ahlers für die Computerunterstützung,
- der ganzen Fakultät für die offene und freundliche Atmosphäre,
- T. Glaser für seinen Einsatz für eine DFG-Forschergruppe.

Und Ihnen allen:
Vielen Dank für Ihre
Aufmerksamkeit

(Sie haben's geschafft!)

Im übrigen war die Varus-Schlacht in . . .

... Werther!



Da ziehen wir nämlich bald hin.

(Ausgrabungen ab Juli 2007)