

# Anregungen und Magnetisierung eines räumlich anisotropen Shastry-Sutherland Modells

Bachelorarbeit in der Physik

von  
Jan Hartmann

05.08.2025

Lehrstuhl für Theoretische Physik V  
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg



Betreuer: Prof. Dr. Kai Phillip Schmidt



**Kurzzusammenfassung:** In dieser Arbeit wird ein räumlich anisotropes Shastry-Sutherland-Modell mit Spin  $1/2$  untersucht, eine Erweiterung des regulären Shastry-Sutherland-Modells, bei dem die Heisenberg-Kopplungen zwischen den Dimeren mit einer bimodalen Anisotropie versehen werden. Ziel der Arbeit ist es, herauszufinden, welche Auswirkungen die Anisotropie bei  $T = 0$  auf die physikalischen Niederenergieeigenschaften dieses geometrisch frustrierten Quantenspin-Systems hat. Zuerst wird ausgehend von einem, im Limes starker Dimere, ungestörten Grundzustand aus Singulett-Dimeren die Einteilchendisersion mithilfe der Takahashi-Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung untersucht. Die angeregten Triplett-Zustände werden dabei als Hardcore-Bosonen im Rahmen eines Quasiteilchenmodells interpretiert. Die berechneten Dispersionsrelationen zeigen, dass durch die Anisotropie nicht nur die Bandstruktur verändert wird, sondern auch für große Anisotropien ein Quantenphasenübergang möglich ist, der einen Übergang von einer Dimer-Phase in eine antiferromagnetische Néel Ordnung beschreibt. Bereits kleine Abweichungen von einem vollständig isotropen Modell haben Auswirkungen auf die Dispersion. Im weiteren Verlauf der Arbeit wird der Einfluss eines externen homogenen Magnetfeldes untersucht. Dafür wird eine entartete Störungsrechnung bis zur ersten Ordnung in der zwischen-Dimer-Kopplung durchgeführt und eine effektive Spinbeschreibung mithilfe der Matsubara-Matsuda-Transformation eingeführt, die in einer klassischen Näherung gelöst wird. Die magnetischen Eigenschaften wurden in Abhängigkeit der Anisotropie des Systems und eines externen Magnetfeldes bestimmt. Dabei wurden schon bei jeder Abweichung vom isotropen Fall Unterschiede festgestellt.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Das anisotrope Shastry-Sutherland Modell</b>	<b>3</b>
2.1. Wirkung der Störung . . . . .	5
2.2. Einheitszellen . . . . .	7
2.3. Quasiteilchenmodell . . . . .	9
<b>3. Methoden</b>	<b>11</b>
3.1. Takahashi Störungstheorie . . . . .	11
3.2. Fourier-Transformation . . . . .	12
<b>4. Resultate</b>	<b>13</b>
4.1. Grundzustandsenergie . . . . .	13
4.2. Dispersion . . . . .	14
4.2.1. 1. Ordnung . . . . .	14
4.2.2. 2. Ordnung . . . . .	15
4.3. Externes Magnetfeld . . . . .	21
<b>5. Zusammenfassung</b>	<b>26</b>
<b>A. Störung</b>	<b>29</b>
<b>B. Hamiltonian Tensoren</b>	<b>29</b>

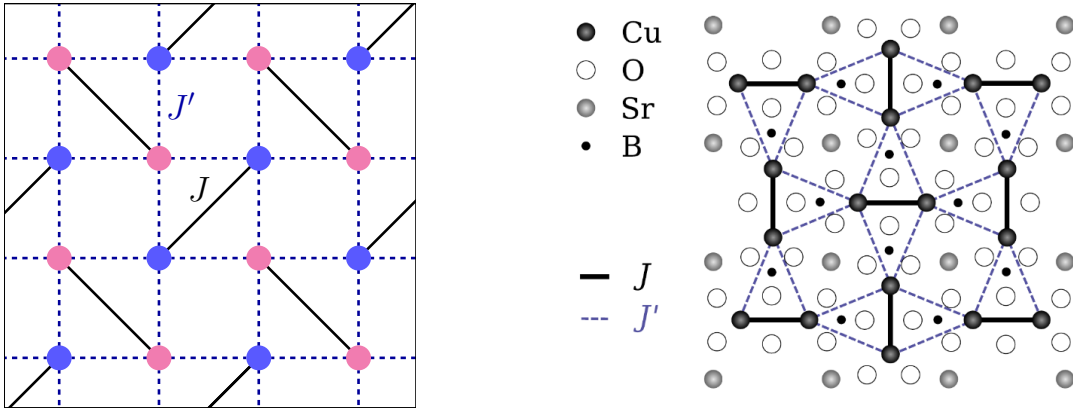


# 1. Einleitung

Das Shastry-Sutherland Modell wurde von Sriram Shastry und Bill Sutherland im Jahr 1981 entwickelt [1]. Das Modell beschreibt ein zweidimensionales Spin-1/2 Quadratgitter mit antiferromagnetischen Heisenberg-Wechselwirkungen wie in **Abbildung 1a** gezeigt. Der Hamiltonian des Systems lautet

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j + J' \sum_{[l,m]} \vec{S}_l \vec{S}_m, \quad (1)$$

mit  $\langle i, j \rangle$  der Summe über alle Spins, die in **Abbildung 1a** diagonal verbunden sind und  $[l, m]$  über alle im gestrichelten Quadratgitter verbundenen Spins in **Abbildung 1a**. Ursprünglich wurde nicht erwartet, dass es ein reales Material beschreiben würde [2], aber einige Jahre später wurde der frustrierte Quantenmagnet Strontiumkupferborat  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  entdeckt, dargestellt in **Abbildung 1b**, der sich bemerkenswert gut durch das zweidimensionale Spinmodell beschreiben lässt [3]. In dieser Arbeit wird das Gitter immer wie in **Abbildung 1b** skizziert.



(a) Shastry-Sutherland Modell mit den gestrichelten Wechselwirkungen  $J'$  und den diagonalen Wechselwirkungen  $J$ .

(b) Zweidimensionale Projektion von Strontiumkupferborat mit den relevanten Wechselwirkungen zwischen den Kupferatomen [4].

Abbildung 1: Shastry-Sutherland Gitter

Ähnlich wie es in diesem Material der Fall ist, interessiert uns der Limes, in dem die diagonalen Wechselwirkungen stärker sind als die des Quadratgitters,  $J \gg J'$ . Die Spin-Paare, die mit der starken Wechselwirkung verbunden sind und um jeweils  $90^\circ$  zueinander gedreht sind, bilden Dimere. Bemerkenswert ist, dass das Modell bei dominanter Intradimerkopplung also  $J \gg J'$  einen exakt lösbaren Grundzustand in Form eines Singulett-Produktzustands besitzt [1]. Des Weiteren führt das Anlegen eines äußeren Magnetfelds zu einer Vielzahl von interessanten Magnetisierungsplateaus [5], die eine Verbindung zwischen Theorie und Experimenten ermöglichen, was nicht bei vielen Materialien der Fall ist [6]. Ein Überblick und zusätzliche Referenzen zu den Magnetisierungsplateaus des Shastry-Sutherland Modells sind in [7] zu finden.

Eine zusätzlich interessante Eigenschaft des Gitters kommt von der Anordnung der Spins in vielen kleinen antiferromagnetischen Dreiecken. Durch die antiferromagnetische Kopplung versuchen sich die Spins immer entgegengesetzt auszurichten. Da in einem Dreieck aber nie

alle drei Spins entgegengesetzt ausrichten können, sind die Bindungen frustriert. Dieses Phänomen nennt man geometrische Frustration [8] und es tritt in jedem antiferromagnetischen Modell auf nicht bipartiten Gittern auf. Frustration hat viel interessante Eigenschaften zur Folge, welche in Referenz [9] zu finden sind.

Angesichts der umfangreichen Forschung zum regulären Shastry-Sutherland Modell [3, 7, 10, 11] widmet sich diese Arbeit einer anisotropen Form des Shastry-Sutherland Modells. Bei dieser bleibt die grundlegende Struktur der Spins und Wechselwirkungen gleich. Jedoch wird die ursprünglich gleich starke Wechselwirkung  $J'$  nun in zwei unterschiedliche Wechselwirkungen  $J_1$  und  $J_2$  aufgeteilt, sodass die beiden Verbindungen, über die ein Dimer in [Abbildung 1b](#) mit dem nächsten Dimer gekoppelt ist, unterschiedlich stark sind. Die aufgeteilten Wechselwirkungen sind dabei immer noch schwächer als die Intradimerkopplung  $J \gg J_{1,2}$ . Solche anisotropen Verbindungen zeigt zum Beispiel das Material  $\text{Er}_2\text{Be}_2\text{GeO}_2$ , dessen Eigenschaften in der Referenz [12] untersucht wurden. Auch Strontiumkupferborat zeigt unter Druck anisotrope Eigenschaften [10]. In dem anisotropen System herrscht aufgrund der grundlegenden Kopplungsstruktur immer noch geometrische Frustration.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, mit der Takahashi-Störungstheorie sich der Lösung für das System im thermodynamischen Limes perturbativ zu nähern. Zuerst wird dafür im zweiten Kapitel der Hamiltonian für den anisotropen Fall aufgestellt und das Modell mit einer Einheitszelle und Gittervektoren genau definiert. Dann werden im dritten Kapitel die Methoden für die Störungsrechnung erklärt, um dann im vierten Kapitel die Resultate der Berechnungen zu zeigen. Zuletzt wird die gesamte Arbeit im fünften Kapitel zusammengefasst und zukünftige Forschungsmöglichkeiten aufgeführt.

## 2. Das anisotrope Shastry-Sutherland Modell

Das Shastry-Sutherland-Modell stellt in der Festkörperphysik ein wichtiges Modell zur Untersuchung frustrierter Heisenberg-Quantenmagneten dar. In dieser Arbeit wird eine anisotrope Erweiterung betrachtet, die von der Form genau wie das reguläre Shastry-Sutherland Modell in [Abbildung 1a](#) aufgebaut ist, nur mit unterschiedlich starken Kopplungen zwischen den Dimeren, die schwächer als die Intradimerkopplung sind  $J \gg J_{1,2}$ . Eine Skizze des anisotropen Shastry-Sutherland Modells ist in [Abbildung 2](#) zu sehen. In diesem Gitter definieren wir zwei Basisvektoren  $\vec{e}_{x,y}$ , deren Betrag und Richtung den Abständen zwischen den Mittelpunkten der Dimere entsprechen.

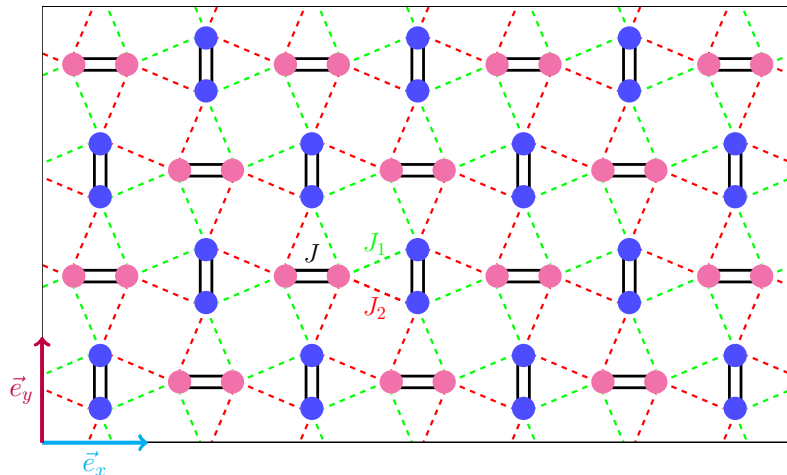


Abbildung 2: Anisotropes Shastry-Sutherland Modell. Die starken Wechselwirkungen auf den Dimeren sind durch schwarze Doppellinien gekennzeichnet. Die  $J_1$ -Wechselwirkungen sind grün und  $J_2$ -Wechselwirkungen rot eingezeichnet.

Die Einheitszelle des Gitters besteht aus zwei Dimeren mit den zwei Gittervektoren  $\vec{u}_1 = \vec{e}_y - \vec{e}_x$  und  $\vec{u}_2 = \vec{e}_y + \vec{e}_x$ , welche das Gitter aufspannen. Dies ist in [Abbildung 3](#) dargestellt.

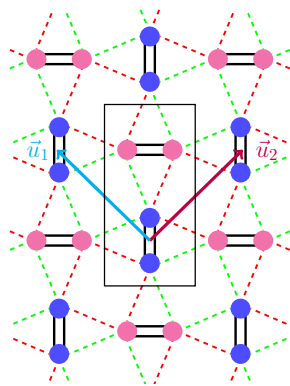


Abbildung 3: Darstellung der Einheitszelle des anisotropen Shastry-Sutherland Gitters mit Gittervektoren  $\vec{u}_1, \vec{u}_2$ .

Der Hamiltonian für das gesamte System ist gegeben als

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j + J_1 \sum_{[k,l]_1} \vec{S}_k \vec{S}_l + J_2 \sum_{[m,n]_2} \vec{S}_m \vec{S}_n \quad (2)$$

mit  $\langle i, j \rangle$  der Summe über alle Dimere,  $[k, l]_1$  der Summe über alle  $J_1$ -Verbindungen und  $[m, n]_2$  der Summe über alle  $J_2$ -Verbindungen. Dabei ist in unserem Limes die Wechselwirkung in den Dimeren um einiges stärker als die Wechselwirkung zwischen den Dimeren  $J \gg J_1, J_2$ . Wir teilen deshalb den Hamiltonian auf  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , wobei  $\hat{H}_0$  der ungestörte Teil ist und  $\hat{V}$  die Störung ist. Der Term  $\hat{V}$  soll „klein“ gegenüber dem ungestörten Teil sein. In unserem Fall definieren wir

$$\hat{H}_0 = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad \hat{V} = J_1 \sum_{[k,l]_1} \vec{S}_k \vec{S}_l + J_2 \sum_{[m,n]_2} \vec{S}_m \vec{S}_n. \quad (3)$$

Ohne den Störungsterm  $\hat{V}$  kann man alle Dimere einzeln betrachten, wobei sich für jeden Dimer die bekannte Singulett-Triplett-Lösung für eine Spin-1/2 Heisenberg-Wechselwirkung ergibt. In [Abbildung 4](#) sind die Eigenzustände sowie die zugehörigen Eigenwerte, die den Energien dieser Zustände entsprechen, dargestellt.

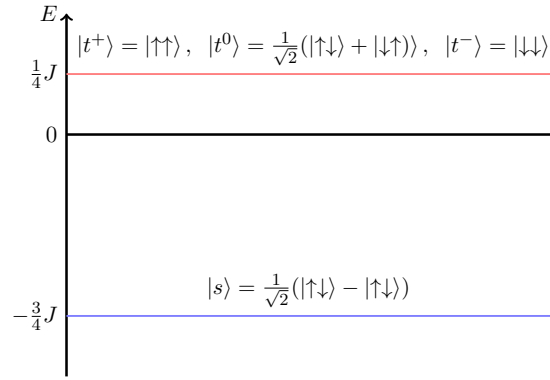


Abbildung 4: Singulett-Triplett Zustände und Eigenwerte eines Spin-1/2 Dimers mit antiferromagnetischer Heisenberg Wechselwirkung  $J$ .

Der Eigenwert  $-\frac{3}{4}J$  ist die Eigenenergie des Singulett-Grundzustands  $|s\rangle$  und  $\frac{1}{4}J$  ist die Eigenenergie des 3-fach entarteten angeregten Triplett-Zustands  $|t^\alpha\rangle$  mit  $\alpha = +1, 0, -1$ . Für das gesamte System aus  $N_d$  Dimeren ergibt sich ein  $4^{N_d}$  dimensionaler Zustandsraum aus den Tensorprodukten zwischen den jeweils vier möglichen Zuständen der Dimere pro Platz. Das System hat dann die Eigenenergien

$$E_n = -J\left(\frac{3}{4}N_d - n\right) \quad \text{mit } n = 0, 1, 2, \dots, N_d. \quad (4)$$

Zwei Eigenzustände sind zum Beispiel

$$\text{Grundzustand: } |s, s, \dots, s\rangle = |0\rangle \quad \text{Angeregt: } |s, t^+, s, t^0, s, \dots, s\rangle = |2^+, 4^0\rangle \quad (5)$$

wovon nur der Grundzustand mit Energieeigenwert  $-\frac{3}{4}J \cdot N_d$  nicht entartet ist. Der exemplarisch angeregte Zustand hat ein  $|t^+\rangle$  Triplett auf dem 2. Platz und ein  $|t^0\rangle$  Triplett auf dem 4. Platz. Die Nummerierung der Plätze ist dabei willkürlich gewählt.

## 2.1. Wirkung der Störung

Um Aussagen über den Effekt der Störung für das gesamte System machen zu können, wird ein Ausschnitt von zwei benachbarten Dimeren genommen, wie in [Abbildung 5](#) dargestellt.

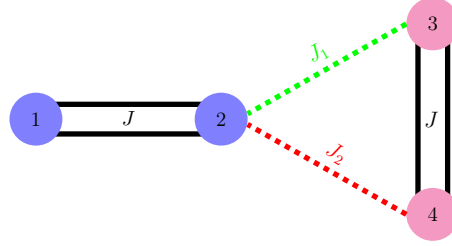


Abbildung 5: Ausschnitt der Kopplung zwischen zwei Dimeren aus dem anisotropen Shastry-Sutherland Model.

Der Hamiltonoperator für ein solches Zwei-Dimer-System  $\hat{H}_2 = \hat{H}_d + \hat{V}_2$  wird aufgeteilt in Intradimerwechselwirkungen  $\hat{H}_d$  und eine Störung  $\hat{V}_2$  genauso wie für das gesamte System in [Gleichung 3](#). Die beiden Operatoren  $\hat{H}_d$  und  $\hat{V}_2$  können wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \hat{H}_d &= J(\vec{S}_1\vec{S}_2 + \vec{S}_3\vec{S}_4) \\ &= J\left(\frac{1}{2}(S_1^+S_2^- + S_1^-S_2^+ + S_3^+S_4^- + S_3^-S_4^+) + S_1^zS_2^z + S_3^zS_4^z\right) \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \hat{V}_2 &= J_1\vec{S}_2\vec{S}_3 + J_2\vec{S}_2\vec{S}_4 \\ &= J_1\left(\frac{1}{2}(S_2^+S_3^- + S_2^-S_3^+) + S_2^zS_3^z\right) + J_2\left(\frac{1}{2}(S_2^+S_4^- + S_2^-S_4^+) + S_2^zS_4^z\right) \end{aligned} \quad (7)$$

mit  $\vec{S}_i$  dem Spinoperator,  $S_i^z$  dem Spinoperator in z-Richtung und  $S_i^\pm$  dem Auf- und Absteigeoperator der einzelnen Spins.  $V_2$  ist die Störung zwischen Spin 2 und 3 mit Kopplungsstärke  $J_1$  und zwischen Spin 2 und 4 mit Kopplungsstärke  $J_2$ .

Nun wollen wir die „Wirkung“ des  $\hat{V}_2$ -Terms zwischen den zwei Dimeren in der Singulett-Triplett-Basis anschauen, um diese später für das gesamte System anwenden zu können. Dazu wirken wir mit der Störung auf die ungestörte 16-dimensionale Singulett-Triplett-Produktbasis des Zwei-Dimer-Systems. Die Produktbasis hat die Form

$$\{|ss\rangle, |st^+\rangle, |st^0\rangle, |st^-\rangle, |t^+s\rangle, \dots, |t^-t^-\rangle\}. \quad (8)$$

Wir definieren, dass der Spin mit der niedrigeren Zahl in den Dimeren immer in einem Singulett-Zustand  $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$  der erste bzw. rot markierte Spin ist, um das Vorzeichen immer konsistent zu halten.

Als ein Beispiel betrachten wir den Zustand

$$|st^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle). \quad (9)$$

Wenn man die Störung auf diesen anwendet, ergibt sich

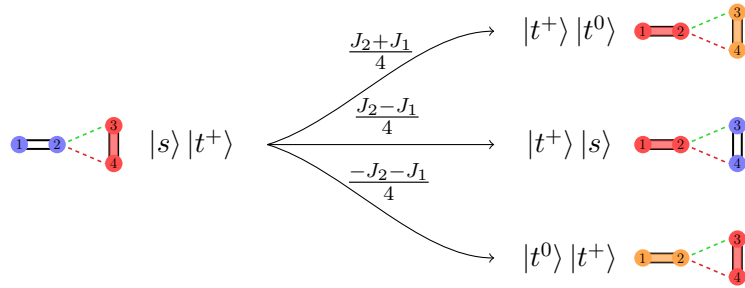
$$\hat{V}|st^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(J_1\left(\frac{1}{2}|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - \frac{1}{4}|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - \frac{1}{4}|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\right) + J_2\left(\frac{1}{2}|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{4}|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - \frac{1}{4}|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\right)\right) \quad (10)$$

Um die Anteile der resultierenden Zwei-Dimer-Zustände in der Singulett-Triplett-Basis herauszufinden, projiziert man  $\hat{V} |st^+\rangle$  auf die jeweiligen Zustände:

$$\langle t^+s | \hat{V} |st^+\rangle = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}J_2 - \frac{1}{2}J_1) \quad (11)$$

$$\langle t^0t^+ | \hat{V} |st^+\rangle = \frac{1}{2}(-\frac{1}{2}J_1 - \frac{1}{2}J_2) . \quad (12)$$

Daraus ergibt sich, dass Triplett-Anregungen durch die Störung von einem Dimer zu einem benachbarten Dimer „hüpfen“ und neue erzeugt werden können. Die gesamten Möglichkeiten für den Zustand  $|st^+\rangle$  sind:



Die Amplitude für das Springen und Erzeugen von neuen Anregungen ist für die anderen zwei Triplett-Zustände immer die gleiche. Für alle möglichen Interaktionen ergibt sich eine 16-dimensionale Matrix, die Einträge aller Amplituden, die die Störung beitragen kann, beinhaltet. Diese Matrix kann man aufgrund ihrer Größe in [Anhang A](#) finden.

An dem Beispiel in [Abbildung 6](#) sieht man, dass nicht für alle Richtungen, in die das Triplett springen kann, das Vorzeichen der Amplitude gleich ist, sondern davon abhängt, in welcher Reihenfolge die Singulett-Zustände auf den Dimeren definiert sind und wie  $J_1$  und  $J_2$  angeordnet sind.

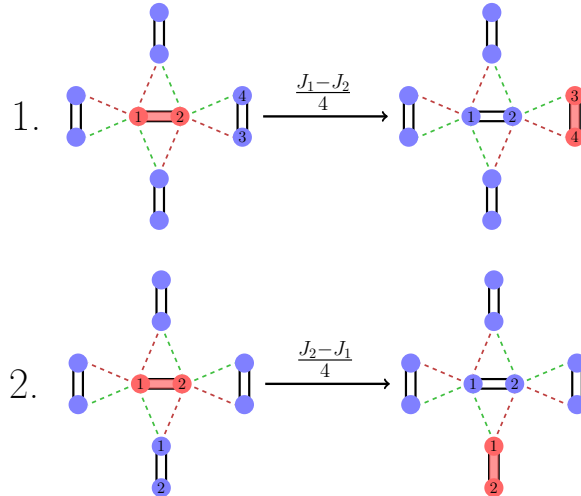


Abbildung 6: Zwei Möglichkeiten für einen beliebigen Triplettzustand, markiert als roter Dimer, in dem anisotropen Shastry-Sutherland Modell zu springen. Über den Pfeilen sind die entsprechenden Amplituden eingezeichnet.

Im ersten Fall des Beispiels ist der zweite Spin mit dem ersten eines anderen Dimers über  $J_1$  verbunden, wodurch in der Amplitude der Störung  $J_2$  positiv und  $J_1$  negativ ist. Tauscht man eine dieser drei Komponenten, wie zum Beispiel im zweiten Fall, bei dem der erste Spin mit dem ersten eines anderen Dimers über  $J_1$  verbunden ist, tauschen sich auch die  $J_{1,2}$  in der Amplitude der Störung und wenn diese aus der Differenz von  $J_{1,2}$  besteht, dreht sich das Vorzeichen.

## 2.2. Einheitszellen

Dies motiviert die Reihenfolge der Spins in den Dimeren fest zu definieren, da der Singulettzustand sich antisymmetrisch unter Vertauschung der Spins verhält  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle)$  und sich damit das Vorzeichen der Amplitude der Störung ändern kann, wie in [Abbildung 6](#) gezeigt. Dafür gibt es zwei für uns relevante Möglichkeiten.

Zum Einen kann man die Reihenfolge immer konsistent auf jedem Dimer halten, sodass alle ersten und zweiten Spins auf den Dimeren gleich ausgerichtet sind – wie in [Abbildung 8a](#) gezeigt. Mit dieser Konvention besteht die kleinste mögliche Einheitszelle, mit der sich das gesamte Gitter eindeutig rekonstruieren lässt, nämlich aus zwei Dimeren. Allerdings ist dabei von den waagerechten zu den senkrechten Zwei-Dimer-Systemen  $J_1$  und  $J_2$  in der Amplitude der Störung vertauscht. Wenn man eine globale Eichfreiheit  $\Psi \rightarrow \Psi \cdot e^{i\pi}$  auf beiden Dimeren berücksichtigt, unter der sich die Amplitude nicht verändert, ergeben sich daraus zwei verschiedene Konfigurationen, die in [Abbildung 7](#) dargestellt sind.

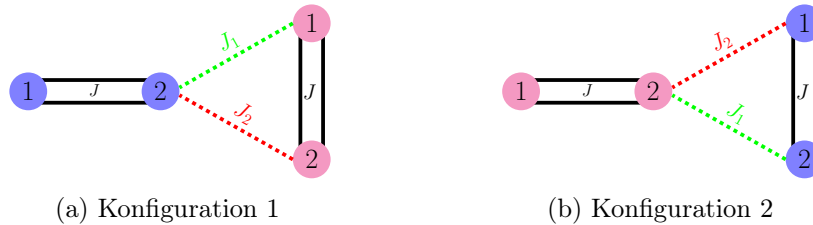


Abbildung 7: Darstellung der zwei verschiedenen Zwei-Dimer-Systeme, die bei einer 1x2 Einheitszelle entstehen.

Durch das Vertauschen von  $J_1$  und  $J_2$  zwischen den waagerechten und senkrechten Systemen führt bei bestimmten Störungstermen zu einer Vorzeichenänderung, wodurch das Teilchenspringen richtungsabhängig wird – siehe [Abbildung 6](#).

Die zweite relevante Konfiguration besteht darin, dass die Reihenfolge in jeder zweiten Spalte getauscht wird, wie in [Abbildung 8b](#) dargestellt. Dadurch sind alle Zwei-Dimer-Systeme, die man aus diesem Gitter erhält, wenn man wieder die für die Störung invariante globale Phase  $e^{i\pi}$  auf beiden Dimeren berücksichtigt, gleich aufgebaut. Die kleinste mögliche Einheitszelle besteht dann aus 4 Dimeren.

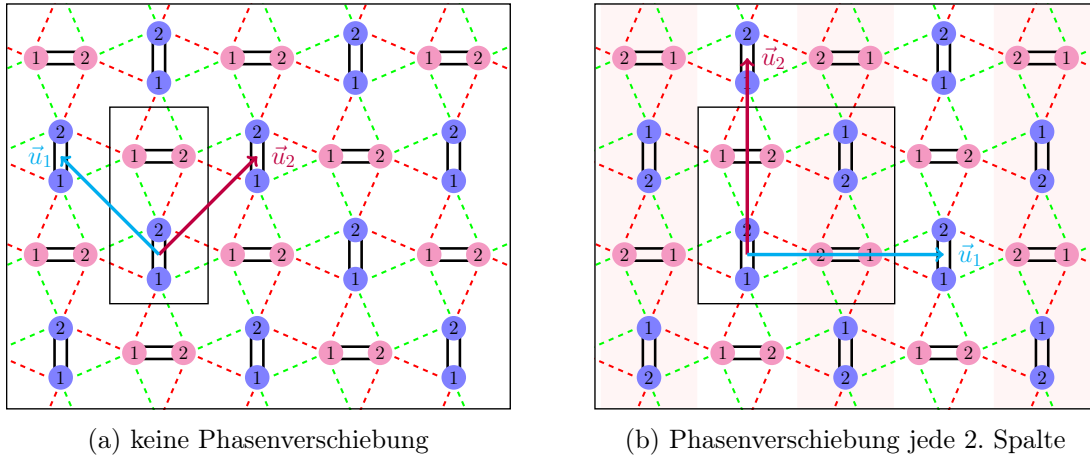


Abbildung 8: Anisotropes Shastry-Sutherland Modell mit zwei Möglichkeiten die Singlettzustände zu orientieren mit den zugehörigen Einheitszellen und Einheitsvektoren. In (a) ist die Rheinflolge der Spins gleich ausgerichtet. In (b) ist in jeder zweiten rot markierten Spalte die Rheinflolge vertauscht

Physikalisch ist die Wahl der Einheitszelle irrelevant. Sie spiegelt nur eine Eichfreiheit  $\Psi \rightarrow \Psi \cdot e^{i\pi}$  auf den spezifischen Dimeren wider. Zur Reduzierung der Komplexität der Berechnungen wird im Folgenden die  $1 \times 2$ -Einheitszelle verwendet.

Wir wollen für die Störungsrechnung das System in der Produktbasis aus einzelnen Dimeren beschreiben. Dafür benötigen wir eine genaue Bezeichnung der einzelnen Dimere, die wir ab jetzt auch als Sites bezeichnen. Dazu benennen wir das waagerechte Dimer innerhalb einer Einheitszelle als Site  $a$  und das senkrechte Dimer als Site  $b$ . Dies ist in [Abbildung 9](#) veranschaulicht. Zum Aufspannen des Gitters benutzen wir die zwei Gittervektoren  $\vec{u}_1$  und  $\vec{u}_2$ .

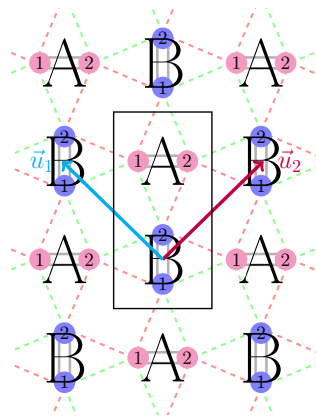


Abbildung 9: Darstellung der  $1 \times 2$  Einheitszelle mit den Gittervektoren  $\vec{u}_{1,2}$  und den zwei Dimeren  $a, b$  innerhalb der Einheitszelle. Die Sites  $a$  und  $b$  sind nur für eine bessere Sichtbarkeit groß geschrieben.

### 2.3. Quasiteilchenmodell

Angesichts der Struktur der Produktzustände in [Gleichung 5](#) bietet es sich an, das System als Quasiteilchenmodell zu beschreiben. In diesem Quasiteilchenmodell wird der Zustand, in dem alle Dimere im Singulett-Zustand sind, als Vakuum interpretiert. Die drei Triplett-Zustände entsprechen dann drei verschiedenen Teilchentypen, die sich auf dem Gitter aus Dimeren wie Hardcore-Bosonen verhalten – das heißt, es können nicht zwei Teilchen gleichzeitig denselben Dimer besetzen. Die Quasiteilchen können mit dem Erzeugungsoperator  $t^\dagger$  erzeugt werden und mit  $t$  dem Vernichtungsoperator vernichtet werden. Für die drei verschiedenen Teilchensorten schreiben wir  $(t^\alpha)^\dagger$  und  $(t^\alpha)$  mit  $\alpha \in \{-1, 0, +1\}$ . Für die Beschreibung, auf welchem Dimer bzw. Site der Operator wirkt, verwenden wir den Vektor  $\vec{v}$

$$\vec{v} = n_1 \vec{u}_1 + n_2 \vec{u}_2 \quad \text{mit } n_1, n_2 \in \mathbb{Z}, \quad (13)$$

der beschreibt, in welcher Einheitszelle sich das Teilchen befindet und einen Buchstaben  $s \in \{a, b\}$  für die zwei Sites innerhalb einer Einheitszelle wie in [Abbildung 9](#).

Aus diesen Operatoren kann man einen Zähleroperator bilden  $\hat{n}_{\vec{v},a}^\alpha = (t_{\vec{v},a}^\alpha)^\dagger t_{\vec{v},a}^\alpha$ , der einem Vernichtungs- und Erzeugungsoperator einer Teilchensorte angewendet auf dem gleichen Site entspricht. Das Springen von einer Site zu einem anderen kann durch einen Vernichtungs- und Erzeugungsoperator einer Teilchensorte ausgedrückt werden, die nicht auf dem gleichen Site wirken  $\hat{h}_{\vec{v},a}^\alpha \vec{v},b = (t_{\vec{v},b}^\alpha)^\dagger t_{\vec{v},a}^\alpha$ . In diesem Fall wird ein Springen von Site  $a$  nach  $b$  innerhalb einer Einheitszelle beschrieben.

Den Hamiltonian  $\hat{H}$  in der Singulett-Triplett-Basis kann man dann als

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V} \\ &= -J \left( \frac{3}{4} N_d - \sum_{\vec{v},s} \sum_{\alpha} \hat{n}_{\vec{v},s}^\alpha \right) \\ &+ \sum_{\langle \vec{v},s; \vec{v}',s' \rangle_y} \sum_{\alpha,\beta} \left( A_{\alpha\beta} t_{\vec{v},s}^\alpha t_{\vec{v}',s'}^\beta + B_{\alpha\beta} (t_{\vec{v},s}^\alpha)^\dagger t_{\vec{v}',s'}^\alpha \right) \\ &+ \sum_{\langle \vec{v},s; \vec{v}',s' \rangle} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta} (t_{\vec{v},s}^\alpha)^\dagger t_{\vec{v},s}^\beta (t_{\vec{v}',s'}^\gamma)^\dagger t_{\vec{v}',s'}^\delta \\ &- \sum_{\langle \vec{v},s; \vec{v}',s' \rangle_x} \sum_{\alpha,\beta} \left( A_{\alpha\beta} t_{\vec{v},s}^\alpha t_{\vec{v}',s'}^\beta + B_{\alpha\beta} (t_{\vec{v},s}^\alpha)^\dagger t_{\vec{v}',s'}^\alpha \right) \\ &+ \sum_{\langle \vec{v},s < \vec{v}',s' \rangle_y} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} D_{\alpha\beta\gamma} (t_{\vec{v},s}^\alpha)^\dagger t_{\vec{v},s}^\beta (t_{\vec{v}',s'}^\gamma)^\dagger + \sum_{\langle \vec{v},s > \vec{v}',s' \rangle_y} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} E_{\alpha\beta\gamma} (t_{\vec{v},s}^\alpha)^\dagger t_{\vec{v},s}^\beta (t_{\vec{v}',s'}^\gamma)^\dagger \\ &- \sum_{\langle \vec{v},s < \vec{v}',s' \rangle_x} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} D_{\alpha\beta\gamma} (t_{\vec{v},s}^\alpha)^\dagger t_{\vec{v},s}^\beta (t_{\vec{v}',s'}^\gamma)^\dagger + \sum_{\langle \vec{v},s > \vec{v}',s' \rangle_x} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} E_{\alpha\beta\gamma} (t_{\vec{v},s}^\alpha)^\dagger t_{\vec{v},s}^\beta (t_{\vec{v}',s'}^\gamma)^\dagger \\ &+ \text{h.c.} \end{aligned} \quad (14)$$

schreiben, wobei  $\sum_{\vec{v},s}$  die Summe über alle Einheitszellen  $\vec{v}$  sowie Plätze  $s = a, b$  innerhalb der Einheitszelle ist und  $\sum_{\alpha}$  die Summe für über alle drei Teilchensorten bzw. Triplettzustände  $\alpha = +1, 0, -1$ .

Die Summe mit  $\langle \vec{v},s; \vec{v}',s' \rangle$  geht über alle benachbarten Sites  $(\vec{v},s)$  und  $(\vec{v}',s')$  wobei aber jede Verbindung aus zwei Dimeren nur einmal vorkommt.  $\langle \vec{v},s; \vec{v}',s' \rangle_x$  und  $\langle \vec{v},s; \vec{v}',s' \rangle_y$  sind

Einschränkungen auf nur horizontal (entlang der  $\vec{e}_x$ -Richtung) benachbarten Sites und nur vertikal (entlang der  $\vec{e}_y$ -Richtung) benachbarten Sites. Dabei ist  $2\vec{e}_x = \vec{u}_2 - \vec{u}_1$  und  $2\vec{e}_y = \vec{u}_2 + \vec{u}_1$ .

$\langle \vec{\nu}, s < \vec{\nu}', s' \rangle_x$  und  $\langle \vec{\nu}, s > \vec{\nu}', s' \rangle_x$  sind noch weitere Einschränkungen mit  $<$ , wo das erste Dimer  $(\nu, s)$  mit nur einem der beiden Spins mit dem nächsten Dimer  $(\nu', s')$  koppelt oder  $>$ , wo das erste Dimer  $(\nu, s)$  mit beiden Spins mit dem nächsten Dimer  $(\nu', s')$  koppelt. Die Beschränkung auf nur  $\vec{e}_x$  oder  $\vec{e}_y$ -Richtung gilt dabei auch.

$\sum_{\alpha, \beta, \dots}$  ist die Summe über alle Kombinationen der jeweils drei Teilchensorten.

Die Tensoren  $A_{\alpha\beta}$ ;  $B_{\alpha\beta}$ ;  $C_{\alpha\beta\gamma}$ ;  $D_{\alpha\beta\gamma\delta}$  befinden sich aufgrund ihres Umfangs in [Anhang B](#).

Der Hamiltonian lässt sich nicht ohne Weiteres diagonalisieren. Daher führen wir nun eine Störungsrechnung ein, um eine approximative Lösung zu erhalten.

### 3. Methoden

#### 3.1. Takahashi Störungstheorie

Für einen Großteil der Berechnungen in dieser Arbeit wird die Takahashi-Störungstheorie verwendet. Diese ist ein störungstheoretisches Näherungsverfahren, um sich approximativ ein analytisch nicht lösbares Problem in der Quantenmechanik zu nähern. Sie wurde 1976 von Yasushi Takahashi entwickelt [13]. Dafür wird das System in einem Hamiltonian der Form

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \quad (15)$$

gebracht. Dabei ist  $\hat{V}$  eine Störung, die in der Summe mit  $\hat{H}_0$  nicht analytisch lösbar ist,  $0 < \lambda \in \mathbb{R}$  eine kleine Zahl und  $\hat{H}_0$  ein analytisch lösbarer Teil:

$$(\hat{H}_0 - E_0) v_0 = 0 \quad (16)$$

$E_0$  sind Eigenenergien und  $v_0$  die Eigenzustände von  $\hat{H}_0$ . Wir definieren einen Unterraum  $U_0$  aller Eigenzustände eines Eigenwertes  $E_0$ , auf den der Projektor  $P_0$  abbildet.

Von dem ungestörten auf den Unterraum der Eigenzustände mit Störungsterm  $U$  mit Projektor  $P$  können wir mit der linearen Transformation  $\Gamma$  abbilden:

$$v = \Gamma v_0 \quad \Gamma = P P_0 (P_0 P P_0)^{-1/2} \quad (17)$$

$$\text{mit } (P_0 P P_0)^{1/2} = P_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} (P_0 (P_0 - P) P_0)^n. \quad (18)$$

Damit kann man die Eigenwertgleichung des gesamten Hamiltonians

$$(\hat{H} - E)v = 0 \quad (19)$$

als

$$(\Gamma^\dagger \hat{H} \Gamma - E)v_0 = 0 \quad (20)$$

schreiben. Wenn man jetzt die Transformation  $\Gamma$  in Abhängigkeit von bekannten  $P_0$ ,  $\hat{H}_0$  und  $\hat{V}$  schreibt, kann man die Eigenwerte bis zu einer bestimmten Ordnung in  $\lambda$  ausdrücken. Dies gelingt mit dem Ausdruck für  $P$ :

$$P = P_0 - \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \sum_{k_1 + \dots + k_{n+1} = n; k \geq 0} S^{k_1} V S^{k_2} V \dots V S^{k_n} \quad S^k = \begin{cases} -P_0 & k = 0 \\ \left(\frac{1-P_0}{E_0 - \hat{H}_0}\right)^k & k \geq 1 \end{cases} \quad (21)$$

Setzt man diesen Ausdruck in  $\Gamma$  und ordnet die Summen nach der Ordnung in  $\lambda$ , ergibt sich:

$$\Gamma(\lambda) = P_0 + \lambda S V P_0 + \lambda^2 (-S S V P_0 V P_0 + S V S V P_0 - \frac{1}{2} P_0 V S S V P_0) + O(\lambda^3) \quad (22)$$

Daraus können, mit dem transformierten Eigenwertproblem

$$(\Gamma^\dagger \hat{H}_0 \Gamma + \lambda \Gamma^\dagger \hat{V} \Gamma - E)v_0 = 0, \quad (23)$$

die Potenzreihenentwicklung für die Eigenenergien berechnet werden. Für eine Matrix der Beiträge zu den Eigenenergien bis zur zweiten Ordnung ergibt sich:

$$E_{ij}(\lambda) = E_0 \delta_{ij} + \lambda \langle i | P_0 \hat{V} P_0 | j \rangle + \lambda^2 \langle i | P_0 \hat{V} S \hat{V} P_0 | j \rangle + O(\lambda^3) \quad (24)$$

mit den Eigenzuständen  $|i\rangle, |j\rangle \in U_0$ . Wird die Matrix diagonalisiert, ergeben sich die Eigenenergien in der Form:

$$E_n(\lambda) \approx \sum_{i=0}^N e_n^{(i)} \lambda^i \quad (25)$$

In dieser Arbeit werden die Grundzustandsenergie und die 1-Triplett-Energie bis zur zweiten Ordnung berechnet.

### 3.2. Fourier-Transformation

Mit Hilfe der Störungsrechnung erhalten wir einen effektiven 1-Triplett-Hamiltonian der Form:

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{1T} = -\frac{3}{4} J \cdot N_d + \sum_{\alpha} \sum_{\langle \vec{v}, s; \vec{v}', s' \rangle} a_{\alpha(\vec{v}, s)(\vec{v}', s')} (t_{\vec{v}, s}^{\alpha})^{\dagger} t_{\vec{v}', s'}^{\alpha} \quad (26)$$

Da die Heisenberg-Wechselwirkung SU(2) invariant ist, sind die Teilchensorten der Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren immer die gleichen. Wenn man aus dem Ausdruck auf die Energien des Systems schließen möchte, ergibt sich das Problem, dass  $a_{\alpha(\vec{v}, s)(\vec{v}', s')}$  von den Sites  $(\vec{v}, s)$  und  $(\vec{v}', s')$  abhängt. Um diese Abhängigkeit aufzuheben, wechseln wir vom Ortsraum in den Impulsraum des Quasiteilchenmodells. Diese Transformation ermöglicht es, die Translations-symmetrie des Systems auszunutzen und den Hamiltonian unabhängig von den Gitterplätzen auszudrücken. Dafür führen wir die fouriertransformierten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $(t_{\vec{v}, s}^{\alpha})^{\dagger}, t_{\vec{v}, s}^{\alpha}$  ein:

$$(t_{\vec{k}, s}^{\alpha})^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N_d}} \sum_{\vec{v}} e^{i\vec{k}\vec{v}} (t_{\vec{v}, s}^{\alpha})^{\dagger} \quad t_{\vec{k}, s}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N_d}} \sum_{\vec{v}} e^{-i\vec{k}\vec{v}} t_{\vec{v}, s}^{\alpha} \quad (27)$$

mit  $\vec{v}$  definiert wie in [Gleichung 13](#) und die Summe  $\sum_{\vec{v}}$  über alle Einheitszellen. Mit Hilfe der Fourier-Transformation können wir den Hamiltonian in die Form

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{1T} = -\frac{3}{4} J \cdot N_d + \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}, s} \sum_{\vec{k}', s'} \Omega_{s, s'}(\vec{k}) (t_{\vec{k}, s}^{\alpha})^{\dagger} t_{\vec{k}', s'}^{\alpha} \quad (28)$$

bringen und durch das Diagonalisieren von  $\Omega(\vec{k})_{s, s'}$  die Energien des Systems bekommen.

## 4. Resultate

Um zuerst die Dispersion eines einzelnen angeregten Zustandes zu berechnen, bestimmen wir zuerst die Grundzustandsenergie bis zur zweiten Ordnung und die Energie mit einem Teilchen im System bis zur zweiten Ordnung. Aus der Differenz der beiden fouriertransformierten Energien erhalten wir dann die Dispersionsrelation für ein Quasiteilchen.

### 4.1. Grundzustandsenergie

Als Erstes wollen wir den Effekt der Störung auf die Grundzustandsenergie  $E_0$  bestimmen. Dies ist unter anderem wichtig für die späteren Berechnungen mit einer Anregung im System. Die Grundzustandsenergie ohne Störung ist:

$$E_0 = \langle 0 | \hat{H}_0 | 0 \rangle = - \langle 0 | J \left( \frac{3}{4} N_d - \sum_{\nu, s} \sum_{\alpha} \hat{n}_{\vec{\nu}, s}^{\alpha} \right) | 0 \rangle = -\frac{3}{4} J \cdot N_d$$

mit  $\sum_{\nu, s} \sum_{\alpha} \hat{n}_{\vec{\nu}, s}^{\alpha}$  dem Zähleroperator auf allen Sites angewendet und  $N_d$  der Anzahl an Dimeren. Die Terme der Störung aus [Gleichung 24](#) der ersten beiden Ordnungen haben jeweils den Term  $\hat{V} P_0 | 0 \rangle$ , den wir mit der [Gleichung 14](#) berechnen können als:

$$\begin{aligned} \hat{V} P_0 | 0 \rangle = \frac{J_2 - J_1}{4} & \left( \sum_{\langle \vec{\nu}, s; \vec{\nu}', s' \rangle_y} ( |(\vec{\nu} s)^+, (\vec{\nu}' s')^- \rangle - |(\vec{\nu} s)^0, (\vec{\nu}' s')^0 \rangle + |(\vec{\nu} s)^-, (\vec{\nu}' s')^+ \rangle ) \right. \\ & \left. - \sum_{\langle \vec{\nu}, s; \vec{\nu}' s' \rangle_x} ( |(\vec{\nu} s)^+, (\vec{\nu}' s')^- \rangle - |(\vec{\nu} s)^0, (\vec{\nu}' s')^0 \rangle + |(\vec{\nu} s)^-, (\vec{\nu}' s')^+ \rangle ) \right). \end{aligned} \quad (29)$$

Die Summen sind wie für [Gleichung 14](#) definiert und  $|(\vec{\nu} s)^{\alpha}, (\vec{\nu}' s')^{\beta} \rangle$  ist der Zustand, bei dem ein  $|t^{\alpha}\rangle$ -Tripletts auf Site  $(\vec{\nu} s)$  sitzt und ein  $|t^{\beta}\rangle$ -Tripletts auf Site  $(\vec{\nu}' s')$ .

Die Störung erzeugt also im Grundzustand auf allen benachbarten Sites eine Superposition aus drei möglichen Konfigurationen von Triplets. Diese drei entstandenen Konfigurationen besitzen alle den Gesamtspin Null, wie es bei Heisenberg-Wechselwirkungen zu erwarten ist. In erster Ordnung wird der Zustand  $|v\rangle = \hat{V} P_0 | 0 \rangle$  wieder auf den Grundzustand projiziert  $P_0 | v \rangle$ , was Null ergibt, da  $|v\rangle$  orthogonal zum Grundzustand steht. Die erste Ordnung  $e_0^{(1)} = 0$  hat also keinen Beitrag.

In zweiter Ordnung wird  $|v\rangle$  auf S angewendet:

$$S | v \rangle = \frac{1 - P_0}{E_0 - \hat{H}_0} | v \rangle = \frac{1}{E_0 - (E_0 + J \cdot \sum_{\nu, s} \sum_{\alpha} \hat{n}_{\vec{\nu}, s}^{\alpha})} | v \rangle = \frac{1}{-2J} | v \rangle. \quad (30)$$

$S$  projiziert dabei senkrecht zum Grundzustand, was alle drei Teile des Zustandes  $|v\rangle$  sind und führt das Inverse der Energiedifferenz von der Grundzustandsenergie zur Energie von  $|v\rangle$  als Faktor ein. Für die Energiedifferenz zwischen Grundzustand und  $|v\rangle$  erhält man  $-2J$ . Insgesamt ergibt sich für den Störungsterm in zweiter Ordnung

$$\begin{aligned} e_0^{(2)} &= \langle 0 | P_0 \hat{V} S \hat{V} P_0 | 0 \rangle = \langle v | S | v \rangle = \langle v | \frac{1}{-2J} | v \rangle \\ &= -\frac{1}{2J} \left( \frac{J_2 - J_1}{4} \right)^2 \left( \sum_{\langle \vec{\nu}, s; \vec{\nu}', s' \rangle_y} 3 + \sum_{\langle \vec{\nu}, s; \vec{\nu}' s' \rangle_x} 3 \right) = -3 \frac{(J_2 - J_1)^2}{16J} N_d. \end{aligned} \quad (31)$$



Nach Anwendung der Fouriertransformation ergibt sich:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\vec{v}} \sum_{\alpha} \frac{J_2 - J_1}{4} \frac{1}{N_d} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}\vec{v}} e^{-i\vec{k}'\vec{v}} (e^{i\vec{k}'0} - e^{i\vec{k}'\vec{u}_1} - e^{i\vec{k}'\vec{u}_2} + e^{i\vec{k}'(\vec{u}_1+\vec{u}_2)}) (t_{b,\vec{k}}^{\alpha})^{\dagger} (t_{a,\vec{k}'}^{\alpha}) + \text{h.c.} \\
&= \frac{J_2 - J_1}{4} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} (1 - e^{-i\vec{k}'\vec{u}_1} - e^{-i\vec{k}'\vec{u}_2} + e^{-i\vec{k}'(\vec{u}_1+\vec{u}_2)}) (t_{b,\vec{k}}^{\alpha})^{\dagger} (t_{a,\vec{k}'}^{\alpha}) + \text{h.c.} \\
&= \frac{J_2 - J_1}{4} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} (1 - e^{-i\vec{k}'\vec{u}_1} - e^{-i\vec{k}'\vec{u}_2} + e^{-i\vec{k}'(\vec{u}_1+\vec{u}_2)}) (t_{b,\vec{k}}^{\alpha})^{\dagger} (t_{a,\vec{k}}^{\alpha}) + \text{h.c.}
\end{aligned} \tag{34}$$

Die fouriertransformierten Ergebnisse werden im Folgenden als Matrix dargestellt. Diese Matrix ist wegen der zwei Sites pro Einheitszelle zweidimensional. Für die erste Ordnung ist die Matrix  $\Omega^{(1)}(\vec{k})$

$$P_1 \hat{V} P_1 = \sum_{\vec{k}} \sum_{\alpha} \begin{pmatrix} (t_{a,\vec{k}}^{\alpha})^{\dagger} \\ (t_{b,\vec{k}}^{\alpha})^{\dagger} \end{pmatrix}^{\top} \Omega^{(1)}(\vec{k}) \begin{pmatrix} t_{a,\vec{k}}^{\alpha} \\ t_{b,\vec{k}}^{\alpha} \end{pmatrix} \tag{35}$$

mit

$$\Omega^{(1)}(\vec{k}) = \frac{J_2 - J_1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 - e^{i\vec{k}\vec{u}_1} - e^{i\vec{k}\vec{u}_2} + e^{i\vec{k}(\vec{u}_1+\vec{u}_2)} \\ 1 - e^{-i\vec{k}\vec{u}_1} - e^{-i\vec{k}\vec{u}_2} + e^{-i\vec{k}(\vec{u}_1+\vec{u}_2)} & 0 \end{pmatrix}.$$

#### 4.2.2. 2. Ordnung

Für die zweite Ordnung betrachten wir den Term

$$P_1 \hat{V} \frac{1 - P_1}{E_1 - \hat{H}_0} \hat{V} P_1 \tag{36}$$


aus [Gleichung 24](#). Der mittlere Term hat zwei Anteile. Zum einen projiziert er auf den Raum, der orthogonal zu den Ein-Quasiteilchenzuständen ist. Zum anderen kommt durch ihn die inverse Energiedifferenz von darauf angewendeten Zuständen zum Ein-Quasiteilchenzustand als Faktor hinzu. Da alle von  $\hat{V}P_1$  erzeugten Terme, die einen Ein-Quasiteilchenzustand beschreiben, wegfallen, betrachten wir nur Terme, die Teilchen zusätzlich erzeugen. Davon gibt es zwei Prozesse:

1. Als Erstes kann um das schon existierende Quasiteilchen ein Weiteres auf einem benachbarten Dimer erzeugt werden. Dabei kann sich die Sorte des ursprünglichen Teilchens auch ändern.


2. Die andere Möglichkeit ist, dass auf zwei leeren, benachbarten Plätzen zwei Teilchen erzeugt werden. Dies passiert überall im System, außer bei den Sites, die benachbart mit dem Quasiteilchen sind.

Die Zustände mit zwei oder drei Quasiteilchen werden durch  $P_1 \hat{V}$  wieder auf den Ein-Teilchen-Zustand abgebildet. Bei der ersten Möglichkeit kann hier das zusätzliche Teilchen oder das ursprüngliche Teilchen vernichtet werden. Wodurch das Teilchen entweder da bleiben kann,

wo es war, oder um einen Site weiter hüpfen kann, und es dafür jeweils zwei Möglichkeiten gibt. Die sich daraus ergebenden Terme in Fourier-transformierter Form mit Skizzen sind dann



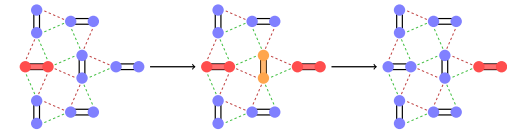
$$\frac{J_2^2 - J_1^2}{16J} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} (2 + 2e^{i\vec{k}(\vec{u}_1 + \vec{u}_2)} - 2e^{i\vec{k}\vec{u}_1} - 2e^{i\vec{k}\vec{u}_2}) t_{\vec{k},a}^{\alpha} (t_{\vec{k}',b}^{\alpha})^{\dagger} + h.c. ,$$



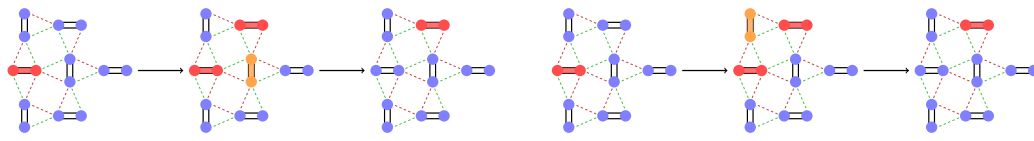
$$\frac{(J_2 - J_1)^2}{16J} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} 2 \cdot 4 ((t_{\vec{k},a}^{\alpha})^{\dagger} t_{\vec{k},a}^{\alpha} + (t_{\vec{k},b}^{\alpha})^{\dagger} t_{\vec{k},b}^{\alpha}) .$$

Die skizzierten Interaktionen sind jeweils nur für eine der beiden vertikalen oder horizontalen Richtungen gezeichnet. Die rot markierten Dimere können die drei Triplet-Anregungen sein. Die orange markierten Dimere illustrieren, dass zwei Teilchen verschiedenen auf den Dimeren sitzen können. Für  $|t^+\rangle$ ,  $|t^0\rangle$  und  $|t^-\rangle$  als ursprüngliches Triplet sind das jeweils  $|t^0\rangle |t^+\rangle$ ,  $|t^-\rangle |t^+\rangle$  und  $|t^0\rangle |t^-\rangle$ . Somit kann jeder Prozess auf zwei verschiedene Arten mit dem gleichen Energiebeitrag stattfinden, wodurch der Faktor zwei zustande kommt.

In der zweiten Möglichkeit kann das Teilchen springen, wenn zwei Teilchen neben dem ursprünglichen Teilchen erzeugt werden. Dann kann aus der entstandenen Kette aus drei Teilchen das ursprüngliche und das mittlere vernichtet werden, wodurch das Teilchen effektiv zwei Sites weiter springt. Die sich daraus ergebenden Terme in fouriertransformierter Form mit Skizzen, die jeweils nur eine der vier möglichen Richtungen zeigen, sind dann



$$\frac{(J_2 - J_1)^2}{32J} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} (e^{i\vec{k}(\vec{u}_1 + \vec{u}_2)} + e^{i\vec{k}(\vec{u}_1 - \vec{u}_2)} + e^{-i\vec{k}(\vec{u}_1 + \vec{u}_2)} + e^{-i\vec{k}(\vec{u}_1 - \vec{u}_2)}) \cdot t_{\vec{k},a}^{\alpha} (t_{\vec{k}',a}^{\alpha})^{\dagger} ,$$



$$-\frac{(J_2 - J_1)^2}{32J} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} (2 \cdot e^{i\vec{k}\vec{u}_1} + 2 \cdot e^{i\vec{k}\vec{u}_2} + 2 \cdot e^{-i\vec{k}\vec{u}_1} + 2 \cdot e^{-i\vec{k}\vec{u}_2}) \cdot t_{\vec{k},a}^{\alpha} (t_{\vec{k}',a}^{\alpha})^{\dagger} .$$

Dabei entspricht ein rotes Dimer immer der ursprünglichen Teilchensorte und ein orangenes einer anderen. Diese ist abhängig von der ursprünglichen Sorte, für  $|t^+\rangle$ ,  $|t^0\rangle$  und  $|t^-\rangle$  sind es jeweils  $|t^-\rangle$ ,  $|t^0\rangle$  und  $|t^+\rangle$ .

Ein letzter möglicher Prozess ist, dass die zwei Teilchen nebeneinander erzeugt und wieder vernichtet werden, analog zum Prozess im gestörten Grundzustand. Um aber die Dispersion des einen Teilchens zu erhalten, interessiert uns noch die Energiedifferenz zu der Grundzustandsenergie bis zur zweiten Ordnung. Zieht man den Beitrag des Grundzustands ab, verbleibt nur von dem zusätzlichen Triplet im ein-Quasiteilchenzustand ein Energiebeitrag  $J$  und viermal der negative Energiebeitrag  $\epsilon_0$  – von den vier Dimer-Paaren um das ursprüngliche Quasiteilchen, bei denen dieser Prozess nicht stattfinden konnte.

Damit folgt also für den gesamten Anteil der Grundzustandsdifferenz:

$$\sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left( J - 4 \cdot 3 \frac{(J_2 - J_1)^2}{32J} \right) \left( (t_{\vec{k},a}^{\alpha})^{\dagger} t_{\vec{k},a}^{\alpha} + (t_{\vec{k},b}^{\alpha})^{\dagger} t_{\vec{k},b}^{\alpha} \right)$$

Die gesamten Matrixelemente von  $\Omega(\vec{k})$  sehen dann wie folgt aus:

$$\Omega_{aa}(\vec{k}) = J + \frac{1}{32J} \left( 16(J_2 - J_1)^2 - 12(J_2 - J_1)^2 + (J_2 - J_1)^2 (e^{i\vec{k}(\vec{u}_1 + \vec{u}_2)} + e^{i\vec{k}(\vec{u}_1 - \vec{u}_2)} + e^{i\vec{k}(\vec{u}_2 - \vec{u}_1)} + e^{-i\vec{k}(\vec{u}_1 + \vec{u}_2)} - 2e^{i\vec{k}\vec{u}_1} - 2e^{i\vec{k}\vec{u}_2} - 2e^{-i\vec{k}\vec{u}_1} - 2e^{-i\vec{k}\vec{u}_2}) \right) \quad (37)$$

$$\Omega_{ab}(\vec{k}) = \frac{1}{16J} (4J(J_2 - J_1) + 2(J_2^2 - J_1^2)) (1 - e^{i\vec{k}\vec{u}_1} - e^{i\vec{k}\vec{u}_2} + e^{i\vec{k}(\vec{u}_1 + \vec{u}_2)}) \quad (38)$$

Da  $\Omega(\vec{k})$  hermitisch ist, gilt

$$\Omega_{aa}(\vec{k}) = \Omega_{bb}(\vec{k}) \quad \text{und} \quad \Omega_{ab}(\vec{k}) = \Omega_{ba}^*(\vec{k}). \quad (39)$$

Die Komponenten des Impulsvektors werden durch  $k_1 = \vec{k} \cdot \vec{u}_1$  und  $k_2 = \vec{k} \cdot \vec{u}_2$  ausgedrückt. Durch Anwendung der Eulergleichung in Kombination mit trigonometrischen Umformungen können die Einträge wie folgt formuliert werden:

$$\Omega_{aa}(k) = J + \frac{1}{8J} (J_2 - J_1)^2 (1 - \cos k_1)(1 - \cos k_2) \quad (40)$$

$$\Omega_{ab}(k) = \frac{1}{8J} (2J(J_2 - J_1) + (J_2^2 - J_1^2)) (1 - e^{ik_2})(1 - e^{ik_1}) \quad (41)$$

Nach dem Diagonalisieren erhält man zwei Energieeigenwerte

$$\omega_1(k_1, k_2) = J + \frac{1}{8J} (J_2 - J_1)^2 (1 - \cos k_1)(1 - \cos k_2) + \left| \frac{1}{2}(J_2 - J_1) + \frac{1}{4J} (J_2^2 - J_1^2) \right| \sqrt{1 - \cos k_1} \sqrt{1 - \cos k_2} \quad (42)$$

$$\omega_2(k_1, k_2) = J + \frac{1}{8J} (J_2 - J_1)^2 (1 - \cos k_1)(1 - \cos k_2) - \left| \frac{1}{2}(J_2 - J_1) + \frac{1}{4J} (J_2^2 - J_1^2) \right| \sqrt{1 - \cos k_1} \sqrt{1 - \cos k_2} \quad (43)$$

Um einen ungefähren Überblick über die Charakteristik der Energien zu bekommen, schauen wir uns eine Heatmap von den  $\omega_1$  und  $\omega_2$  Eigenwerten in [Abbildung 11](#) an für die Beispielwerte  $J_1 = 0.1$ ;  $J_2 = 0.2$  und  $J = 1$ .

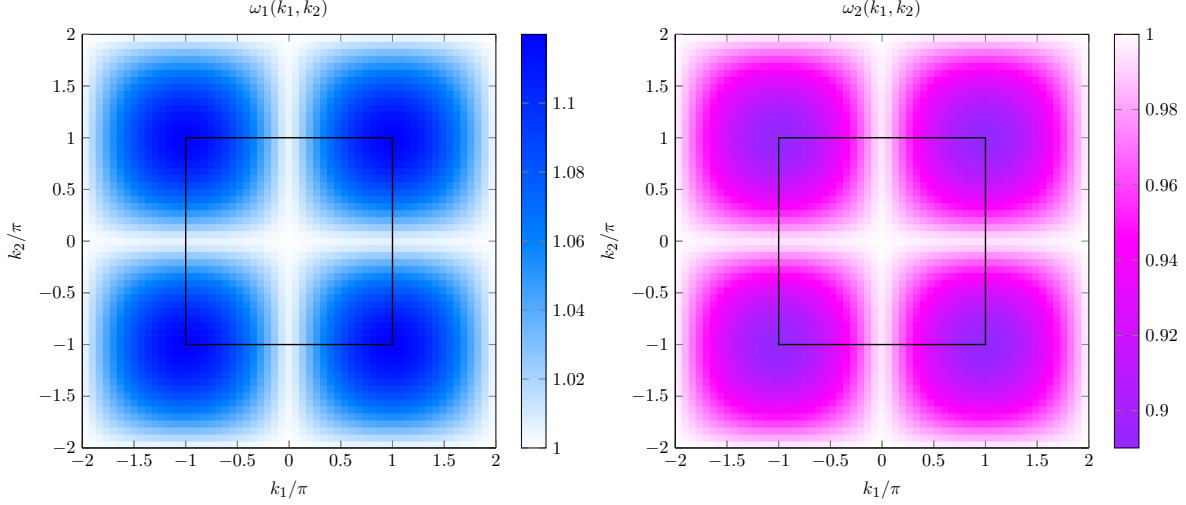


Abbildung 11: Heatmap der Dispersion eines Quasiteilchen bis zur 2. Ordnung im anisotropen Shastry-Sutherland Modell geplottet über  $k_1$  und  $k_2$  mit eingezeichneten Einheitszellen und Wechselwirkungen  $J_1 = 0.1$ ;  $J_2 = 0.2$  und  $J = 1$ .

Die Dispersion ist symmetrisch in alle vier Impulsrichtungen ( $\pm k_1, \pm k_2$ ). Dies macht Sinn, da im thermodynamischen Limes die Bewegungsrichtungen äquivalent sein sollten. Die Brillouinzone in den Plots zeigt die Größe der Periodizität der Dispersion. Dabei gilt  $\pi^2 = A_e A_k$  mit  $A_k$  der Fläche der Einheitszelle im Impulsraum und  $A_e$  der Einheitszelle im Ortsraum. Man sieht auch, dass es zum Untersuchen der Extremwerte der Dispersion genügt, die Diagonale  $k_1 = k_2$  zu untersuchen. Diese Diagonale schauen wir uns mit den zwei Beispielwerten  $J = 1$ ;  $J_1 = 0.2$ ;  $J_2 = 0.1$  und  $J = 1$ ;  $J_1 = 0.5$ ;  $J_2 = 0$  in [Abbildung 12](#) an.

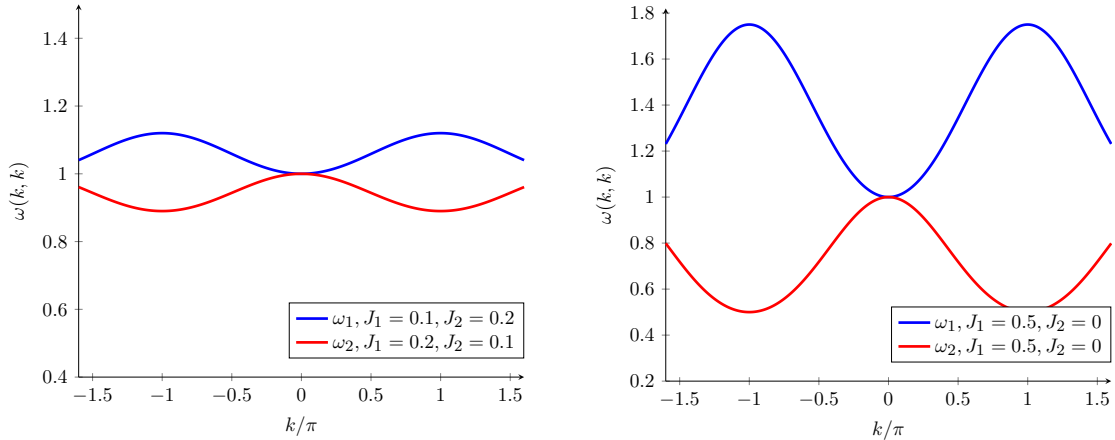


Abbildung 12: Plot der beiden Eigenenergien des ein-Quasiteilchen in 2. Ordnung mit dem selben Impuls in  $\vec{u}_1$  und  $\vec{u}_2$ -Richtung und den Werten  $J = 1$ ;  $J_1 = 0, 2$ ;  $J_2 = 0, 1$  für den ersten Plot und  $J = 1$ ;  $J_1 = 0, 5$ ;  $J_2 = 0$  für den zweiten.

Von besonderem Interesse ist der Punkt, an dem die Lücke zwischen dem Minimum der Bandstruktur ( $\min w(k_1, k_2)$ ) und dem Nullpunkt schließt. Dieser Punkt beschreibt einen potentiellen Quantenphasenübergang 2. Ordnung.

Um diesen zu ermitteln, untersuchen wir von  $\omega_2$  für verschiedene  $J_{1,2}$  das Minimum, welches für alle  $J_{1,2}$  bei  $\vec{k}_c = (\pi, \pi)$  liegt.

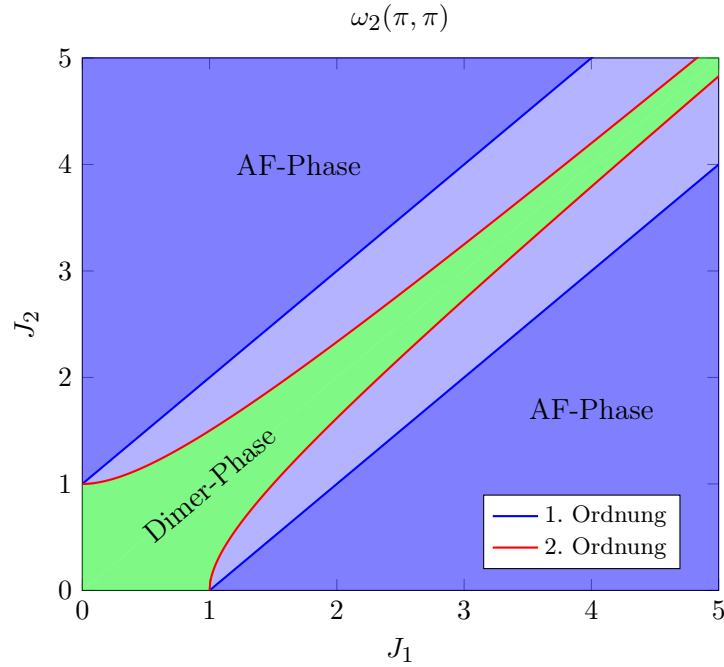


Abbildung 13: Zweidimensionaler Plot von  $\omega_2(\pi, \pi)$  über  $J_1$  und  $J_2$ . Bei der grünen Fläche ist  $\omega_2$  größer als Null und bei den blauen Teilen, die je nach betrachteter Ordnung verschieden groß sind, kleiner Null und in der Antiferromagnetischen-Phase. Die Nullstelle der Erster und Zweiter Ordnung wurde in blau und in rot eingezeichnet um eine Tendenz sichtbar zu illustrieren.

Man sieht in [Abbildung 13](#), dass es bei  $J_1 = 1, J_2 = 0$  oder  $J_1 = 0, J_2 = 1$  zum ersten Mal zu einem Phasenübergang kommt und der Phasenübergang später eintritt, wenn  $J_{1,2} \neq 0$ . Dabei ist zu berücksichtigen, dass das Phasendiagramm nur ein sehr approximatives Ergebnis ist, da man sehr große Störungen nur in zweiter Ordnung betrachtet und man somit den Phasenübergang nicht sehr genau beschreiben kann.

Eine Möglichkeit, diesen Phasenübergang in der Realität vorzufinden, für den sich die Stärke der Wechselwirkungen in einem Material verändern, wäre beispielsweise eine Änderung des auf das Material ausgeübten Drucks [\[10\]](#).

Um sich ein Bild darüber machen zu können, was nach dem Quantenphasenübergang passiert, kann man sich eine Néel Ordnung des anisotropen Shastry-Sutherland Modells anschauen. Dieser tritt genau für den Fall, dass  $J = 1$  und  $J_1 = 1, J_2 = 0$  oder  $J_1 = 0, J_2 = 1$  ist, ein. In diesen Fällen ergibt sich ein bipartites Gitter ohne Frustration, wie in [Abbildung 14](#) gezeigt.

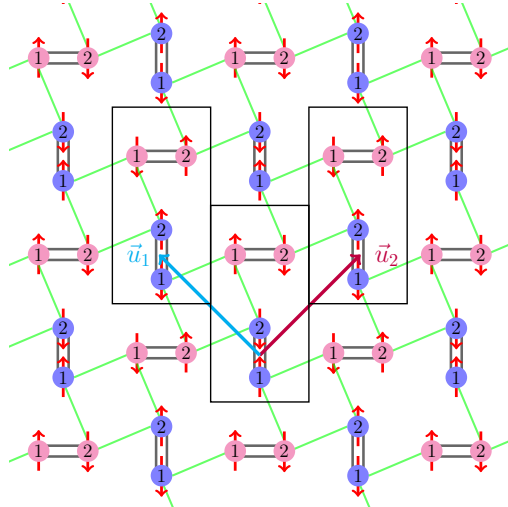


Abbildung 14: Darstellung der Néel Phase des anisotropen Shastry-Sutherland Modell mit  $J = 1$ ,  $J_1 = 1$  und  $J_2 = 0$ .

In dieser Phase kann man sehen, dass jedes Dimer, welches um einen  $\vec{u}_1$  oder  $\vec{u}_2$  verschoben ist, um  $180^\circ$  bzw. um  $\pi$  phasenverschobene Spins hat. Diese Verschiebung kann man auch in den Dispersionsrelationen von [Abbildung 11](#) finden. Bei diesen liegt das Minimum sowohl in der  $u_1$ - als auch in der  $u_2$ -Richtung genau bei  $\pi$ , was in der Néel Phase genau der Phasenverschiebung der Spins in  $u_1$ - und  $u_2$ -Richtung entspricht.

### 4.3. Externes Magnetfeld

Zuletzt wollen wir noch den Effekt eines äußeren Magnetfeldes auf das anisotrope Shastry-Sutherland Modell betrachten. Dafür fügen wir dem Hamiltonian aus [Gleichung 2](#) noch einen zusätzlichen Term für das Magnetfeld hinzu. Dieses Magnetfeld soll in die positive  $z$ -Richtung ausgerichtet sein.

$$\hat{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - B \sum_i \hat{S}_i^z + \hat{V} \quad (44)$$

$\hat{V}$  ist die ursprüngliche Störung zwischen benachbarten Dimeren.

Der energetisch begünstigte Triplett-Zustand mit der Definition des Magnetfeldes ist  $|t^+\rangle$ , da die Spins parallel in Richtung des Magnetfeldes ausgerichtet sind. Die Eigenenergien der Dimere in Abhängigkeit von der Stärke des Magnetfeldes sind in [Abbildung 15](#) zu sehen.

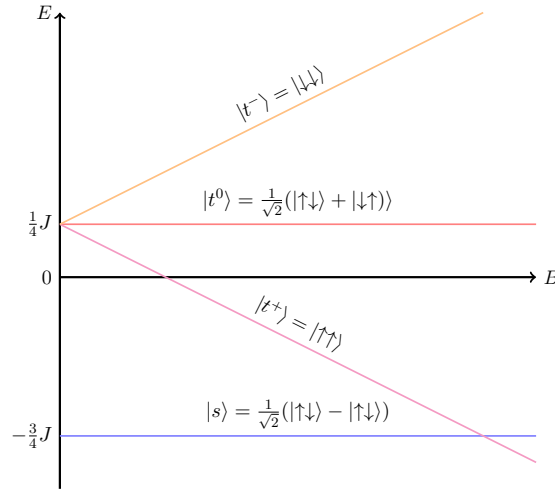


Abbildung 15: Eigenenergien eines antiferromagnetischen Heisenberg Dimers mit einem zunehmenden externen Magnetfeld  $B$ .

Um das System mit dem Magnetfeld beschreiben zu können, werden wir den Fall betrachten, in dem die Eigenenergien des Singulett-Zustands und des  $|t^+\rangle$  Triplett-Zustands gleich sind und der Grundzustand eines ungekoppelten Dimers somit entartet ist. Die Rechnung ändert sich dadurch zu einer entarteten Störungstheorie und wir schreiben dafür den ungestörten Hamiltonian  $\hat{H}_B$  und die Störung  $\hat{V}_B$  Term explizit um:

$$\hat{H}_B = J \left( \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - \sum_i \hat{S}_i^z \right)$$

$$\hat{V}_B = \hat{V} - (B - J) \sum_i \hat{S}_i^z .$$

$\hat{H}_B$  beschreibt dabei wieder ein System aus Dimeren und wird nur einen konstanten Energiebeitrag  $E_0$  liefern. Um einen effektiven Hamiltonian erster Ordnung im Grundzustandsraum für diesen Fall zu berechnen, betrachten wir den Term

$$\langle i | P_B \hat{V}_B P_B | j \rangle \quad (45)$$

an, mit  $P_B$  den Projektor auf den entarteten Grundzustand. Zum Beschreiben der Wirkung gehen wir wieder in ein System aus zwei Dimeren über, die sich in den beiden entarteten Zuständen  $|t^+\rangle, |s\rangle$  befinden können.

Die Matrix, die daraus folgt, ist

$$\begin{pmatrix} \langle ss| \\ \langle st^+| \\ \langle t^+s| \\ \langle t^+t^+| \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (J-B) & \frac{J_2-J_1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{J_2-J_1}{4} & (J-B) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2(J-B) + \frac{J_2+J_1}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |ss\rangle \\ |st^+\rangle \\ |t^+s\rangle \\ |t^+t^+\rangle \end{pmatrix}.$$

Wir beziehen uns nun auf die Dimere mit  $i$  und  $j$ , ohne in die Einheitszellenbeschreibung zu gehen, da wir diese hier nicht berücksichtigen müssen. Zusätzlich schreiben wir die Variablen um in  $t = \frac{J_2-J_1}{4}$ ,  $\mu = (B-J)$ ,  $V = \frac{J_2+J_1}{4}$ ,  $\hat{n}_i = (t_i^+)^\dagger t_i^+$ . Damit kann man dann den effektiven Hamiltonian ausdrücken als

$$\hat{H}_{B,\text{eff}} = -J\left(\frac{3}{4}N_d - \sum_i \hat{n}_i + \sum_i \hat{n}_i\right) \quad (46)$$

$$\hat{V}_{B,\text{eff}} = -\mu \sum_i \hat{n}_i + t\left(\sum_{\langle ij \rangle_y} - \sum_{\langle ij \rangle_x}\right)(\hat{t}_i^\dagger \hat{t}_j + h.c.) + V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j. \quad (47)$$

Dabei ist  $\sum_i$  die Summe über alle Dimere,  $\sum_{\langle ij \rangle_x}$  die Summe über alle horizontal benachbarten Dimere und  $\langle ij \rangle_y$  die Summe über alle vertikal benachbarten Dimere, wobei sich das Vorzeichen wieder für die verschiedenen Richtungen beim Springen des Triplets ändert. Der gesamte effektive Hamiltonian für die erste Ordnung ist dann gegeben als

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)} = E_0 - \mu \sum_i \hat{n}_i + t\left(\sum_{\langle ij \rangle_y} + \sum_{\langle ij \rangle_x}\right)(\hat{t}_i^\dagger \hat{t}_j + h.c.) + V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j \quad (48)$$

mit  $E_0 = -\frac{3}{4}J \cdot N_d$ .

Wir führen nun die Matsubara-Matsuda-Transformation [14] ein. Mit dieser können Hardcore-Bosonen bijektiv auf Spin-1/2-Operatoren abgebildet werden.

$$\hat{n}_i = \frac{1}{2} - \hat{S}_i^z, \quad \hat{t}_i^\dagger = \hat{S}_i^-, \quad \hat{t}_i = \hat{S}_i^+. \quad (49)$$

Angewandt auf den effektiven Hamiltonian ergibt sich

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= E_0 - \mu \sum_i \left(\frac{1}{2} - \hat{S}_i^z\right) + t\left(\sum_{\langle ij \rangle_y} - \sum_{\langle ij \rangle_x}\right)(\hat{S}_i^- \hat{S}_i^+ + h.c.) + V \sum_{\langle ij \rangle} \left(\frac{1}{2} - \hat{S}_i^z\right)\left(\frac{1}{2} - \hat{S}_j^z\right) \\ &= E_0 - \sum_i \frac{\mu}{2} + \mu \sum_i S_i^z + 2t\left(\sum_{\langle ij \rangle_y} - \sum_{\langle ij \rangle_x}\right)(\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y) + \frac{V}{4} \sum_{\langle ij \rangle} 1 \\ &\quad - V \sum_{\langle ij \rangle} \left(\frac{1}{2} \hat{S}_i^z + \frac{1}{2} \hat{S}_j^z\right) + V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z. \end{aligned} \quad (50)$$

Dabei sind die Summen  $\sum_i = N_d$  und  $\sum_{\langle ij \rangle} = 2N_d$ .

$$H_{\text{eff}} = E_0 - (\mu - V) \frac{N_d}{2} + (\mu - 2V) \sum_i S_i^z + 2t \left( \sum_{\langle ij \rangle_y} - \sum_{\langle ij \rangle_x} \right) (\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y) + V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \quad (51)$$

Im Rahmen dieser Bachelorarbeit untersuchen wir diesen Hamiltonian mit der sogenannten klassischen Spin-Approximation. In dieser werden Spins als klassische Vektoren auf einer dreidimensionalen Sphäre mit Radius  $1/2$  parametrisiert:

$$\vec{S}_i = \begin{pmatrix} \hat{S}_i^x \\ \hat{S}_i^y \\ \hat{S}_i^z \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sin \theta_i \cos \phi_i \\ \sin \theta_i \sin \phi_i \\ \cos \theta_i \end{pmatrix}. \quad (52)$$

Mit  $\phi \in [0, 2\pi)$  und  $\theta \in [0, \pi]$ .

Angewendet auf den effektiven Hamiltonian ergibt sich

$$\begin{aligned} E_{\text{eff}}(\theta_1, \phi_1, \dots, \phi_{N_d}) = & E_0 - (\mu - V) \frac{N_d}{2} + (\mu - 2V) \frac{1}{2} \sum_i \cos \theta_i + \frac{V}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \cos \theta_i \cos \theta_j \\ & + \frac{t}{2} \left( \sum_{\langle ij \rangle_y} - \sum_{\langle ij \rangle_x} \right) \sin \theta_i \sin \theta_j (\cos \phi_i \cos \phi_j + \sin \phi_i \sin \phi_j) \end{aligned} \quad (53)$$

$$\text{mit } \cos \phi_i \cos \phi_j + \sin \phi_i \sin \phi_j = \cos(\phi_i - \phi_j) \quad (54)$$

Von der klassischen Energiefunktion  $E_{\text{eff}}(\theta_1, \phi_1, \dots, \theta_{N_d}, \phi_{N_d})$  wollen wir den Grundzustand finden. In diesem werden sich die klassischen Spin-Vektoren bzw. deren Winkel so ausrichten, dass sie die geringstmögliche Energie haben. Um die Energie zu minimieren, müssen die in  $\vec{e}_y$ -Richtung benachbarten  $\phi$ -Winkel für  $t < 0$  immer gleich ausgerichtet sein und für  $t > 0$  immer entgegengesetzt ausgerichtet sein. Für in  $\vec{e}_y$ -Richtung benachbarte gilt das genau Umgekehrte.

Wir können für den Fall, in dem  $\phi$  nur bei jedem horizontal benachbarten Dimer um  $\pi$  phasenverschoben ist, schreiben

$$H_{\text{eff}} = E_0 - (\mu - V) \frac{N_d}{2} + \left( \frac{\mu}{2} - V \right) \sum_i \cos \theta_i + \frac{t}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \sin \theta_i \sin \theta_j + \frac{V}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \cos \theta_i \cos \theta_j \quad (55)$$

oder für den Fall, in dem  $\phi$  nur bei jedem vertikal benachbarten Dimer um  $\pi$  phasenverschoben ist, mit einem negativen Vorzeichen vor dem  $t$ -Term. Andere Möglichkeiten für  $\phi$  kann es natürlich auch geben, diese werden aber nie energetisch sinnvoller sein.

Um die Konfigurationen der Spins mit der minimalisierten Energie abhängig von  $t$ ,  $V$  und  $\mu$  zu bestimmen, kürzen wir die Konstanten und teilen durch  $V$ . Zusätzlich können wir im thermodynamischen Limes effektiv einen Ausschnitt aus nur zwei Dimeren betrachten mit Energie  $\epsilon$ , da sich im Grundzustand alle benachbarten Winkel wiederholen werden, um die Energie zu minimieren.

$$\epsilon = \left( \frac{\mu}{V} - 1 \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\mu}{V} - 2 \right) (\cos \theta_1 + \cos \theta_2) + 2 \frac{t}{V} \sin \theta_1 \sin \theta_2 + \cos \theta_1 \cos \theta_2 \quad (56)$$

Zuerst betrachten wir den Fall  $t = 0$ . Für diesen gibt es drei günstige Konfigurationen:

$$\begin{aligned}
1. \quad \theta_1 = 0, \theta_2 = 0 : & \quad \left(\frac{\mu}{V} - 1\right) + \left(\frac{\mu}{V} - 2\right) + 1 \\
2. \quad \theta_1 = \pi, \theta_2 = \pi : & \quad \left(\frac{\mu}{V} - 1\right) - \left(\frac{\mu}{V} - 2\right) + 1 \\
3. \quad \theta_1 = 0, \theta_2 = \pi : & \quad \left(\frac{\mu}{V} - 1\right) - 1
\end{aligned} \tag{57}$$

In [Abbildung 16](#) sind die Energien der Konfigurationen eingezeichnet.

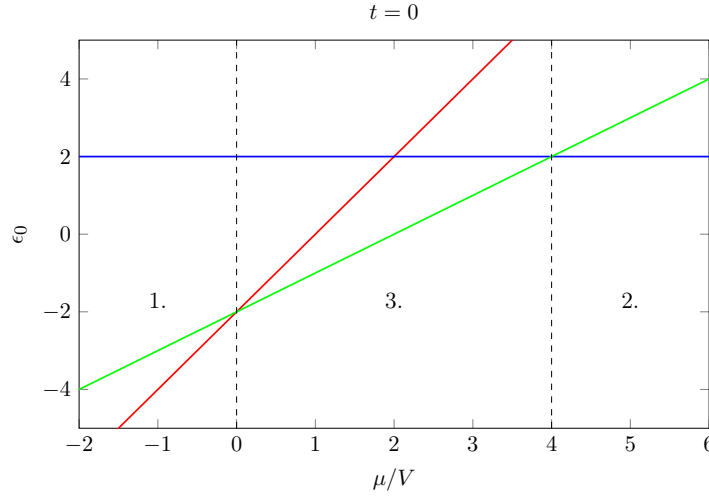


Abbildung 16: Skizze der Energie von zwei Dimeren für unterschiedliche Winkel  $\theta_{1,2}$  und für verschiedene  $\frac{\mu}{V}$ . Die rote Linie steht für die 1. Konfiguration  $\theta_1 = 0, \theta_2 = 0$ . Die blaue für die 2. Konfiguration  $\theta_1 = \pi, \theta_2 = \pi$ . Die grüne für die 3. Konfiguration  $\theta_1 = 0, \theta_2 = \pi$ . Die Zahlen zeigen welche Konfiguration in den drei Bereichen am energetisch günstigsten ist.

Jetzt muss nur noch untersucht werden, wann für  $t \neq 0$  andere Konfigurationen der Winkel eine geringere Energie ergeben. Für die Bereiche der 1. und 2. Konfiguration in [Abbildung 16](#) muss es energetisch günstiger sein, von den  $0^\circ$  oder  $180^\circ$  Ausrichtungen für alle Dimere abzuweichen. Man kann in diesen Bereichen immer von gleich ausgerichteten  $\theta_{1,2}$  ausgehen, da es sowohl im vollständig ausgerichteten Zustand am günstigsten ist, als auch in dem  $\frac{t}{V}$  Term. Wenn man zusätzlich zu dieser Bedingung nur die Terme von  $\epsilon$  betrachtet, die von Winkel abhängen, erhält man

$$\left(\frac{\mu}{V} - 2\right) \cos \theta + 2\frac{t}{V} \sin \theta + \cos^2 \theta. \tag{58}$$

Damit ergibt sich, dass für

$$\frac{\mu}{V} < 4\frac{t}{V} < -\frac{\mu}{V} \quad \text{oder} \quad \left(\frac{\mu}{V} - 4\right) > 4\frac{t}{V} > -\left(\frac{\mu}{V} - 4\right) \tag{59}$$

das Minimum nicht bei  $\theta = 0$  oder  $\theta = \pi$  liegt, sondern bei der ersten Konfiguration zwischen  $[0; \frac{\pi}{2}[$  und bei der zweiten Konfiguration zwischen  $[\pi; \frac{\pi}{2}[$  und für den Fall  $\frac{\mu}{V} = 2$  genau bei  $\theta = \frac{\pi}{2}$ .

Im Bereich der 3. Konfiguration in [Abbildung 16](#) muss, damit weiterhin diese Konfiguration am energetisch günstigsten ist,

$$\left(\frac{\mu}{V} - 1\right) - 2\frac{t}{V} - 1 < \left(\frac{\mu}{V} - 1\right) + \left(\frac{\mu}{V} - 2\right) \cos \theta + 2\frac{t}{V} \sin \theta + \cos^2 \theta \quad (60)$$

gelten. Dies ist erfüllt für

$$\sqrt{-16\left(\frac{t}{V}\right)^2 + 4} - 2 < \frac{\mu}{V} < \sqrt{-16\left(\frac{t}{V}\right)^2 + 4} + 2. \quad (61)$$

Aus diesen Bedingungen folgt das effektive Quanten-Phasen-Diagramm [Abbildung 17](#).

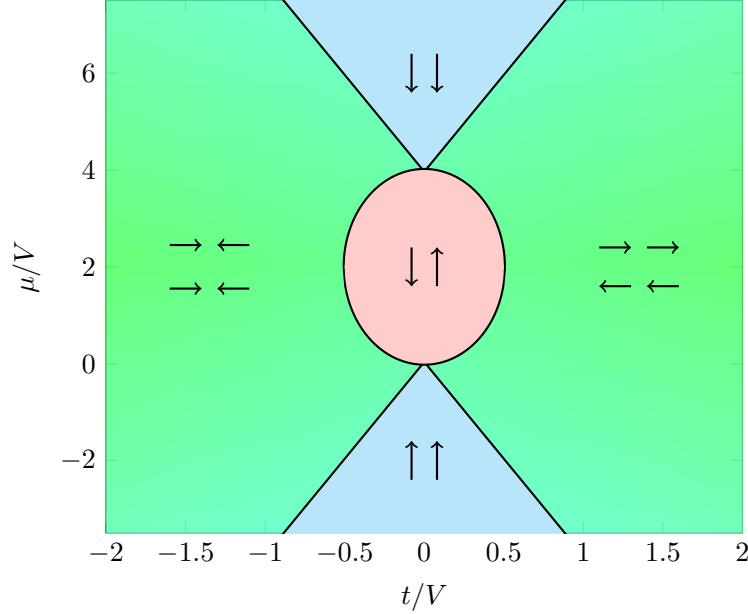


Abbildung 17: Effektives Quanten-Phasen-Diagramm des anisotropen Shastry-Sutherland Modells in erster Ordnung der Störungsrechnung. Die Pfeile zeigen die jeweilige Orientierung der klassischen Spins. Der Farbverlauf in der grünen Phase soll einen langsamen Übergang von der blauen Phase bis zur bei  $\frac{\mu}{V}$  eingezeichneten Orientierung zeigen.

Die drei Konfigurationen aus [Abbildung 16](#) kann man bei  $t = 0$  gut erkennen. Im Quasiteilchenbild entspricht die erste Konfiguration für  $\frac{\mu}{V} < 0$  (bzw.  $B - J < 0$ , da  $V \geq 0$ ) einem vollständig leeren Zustand, bei dem sich alle Dimere im  $|s\rangle$ -Zustand befinden. Die dritte Konfiguration für  $0 < \frac{B-J}{J_1+J_2} < 1$  bildet ein Schachbrettmuster aus besetzten und leeren Dimeren und für  $\frac{B-J}{J_1+J_2} > 1$  würde man in der zweiten Konfiguration zu einem vollständig mit  $|t^+\rangle$  Triplets gefüllten Zustand übergehen.

Außerhalb dieser drei Zustände gibt es noch für  $\frac{\mu}{V} = 2$  und  $\frac{t}{V} > 0,5$  oder  $\frac{t}{V} < -0,5$  die Zustände, dass für alle Dimeren  $\theta = \frac{\pi}{2}$  gilt und  $\phi$  je nach Vorzeichen von  $\frac{t}{V}$  für jede Spalte oder Zeile um  $\pi$  phasenverschoben ist. Für  $\frac{\mu}{V} \neq 2$  richten sich die Spins immer weiter in die  $z$ -Richtung aus, bis sie in die vollständig gefüllte oder leere Phase übergehen und beschreiben dabei eine supraflüssige Phase mit kontinuierlicher Magnetisierung.

Bei diesen Ergebnissen ist hervorzuheben, dass sich durch die Anisotropie eine neue supraflüssige Phase (grün in [Abbildung 17](#)) für  $t \neq 0$  ergibt, die nicht in einem regulären Shastry-Sutherland Modell vorkommt.

## 5. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein räumlich anisotropes Shastry-Sutherland Modell untersucht, eine Erweiterung des bekannten zweidimensionalen Shastry-Sutherland Modells, bei dem die Kopplungen zwischen den Dimeren unterschiedlich stark gewählt werden. Ziel war es, die Auswirkungen dieser Anisotropie auf die Anregungen eines Teilchens und Quantenphasenübergänge bei einem homogenen externen Magnetfeld zu analysieren.

Zuerst wurde dafür der Hamiltonian des Systems im Limes starker Intradimerkopplung formuliert und in einen ungestörten und einen gestörten Anteil unterteilt. Auf Basis der ungestörten Singulett-Triplett-Struktur wurde ein Quasiteilchenmodell definiert, in dem die angeregten Triplett-Zustände als Hardcore-Bosonen beschrieben werden. Der Hamiltonian für das gesamte System lässt sich nicht ohne Weiteres diagonalisieren. Zur Näherung der Energiewerte wurde die Takahashi-Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung angewendet. Mit der Fouriertransformation wurde der effektive Hamiltonian für ein angeregtes Teilchen in eine Dispersionsrelation für das angeregte Teilchen im Impulsraum umgeformt. Wobei auch untersucht wurde, für welche Werte von  $J_1$  und  $J_2$  die Bandlücke schließt und dadurch ein möglicher Quantenphasenübergang zweiter Ordnung von einer Dimer-Phase zu einer antiferromagnetischen Phase stattfindet. Besonders interessant dabei war, dass der geringste Punkt zum Phasenübergang genau eine Néel Phase des anisotropen Shastry-Sutherland Modells beschreibt.

Des Weiteren wurde der Einfluss eines externen Magnetfeldes untersucht. Für den Fall einer Entartung zwischen dem Singulett-Zustand und dem  $|t^+\rangle$ -Triplett wurde ein effektiver Hamiltonian in erster Ordnung mit der Störungstheorie hergeleitet und mithilfe der Matsubara-Matsuda-Transformation in ein klassisches Spinmodell überführt. Es wurden mehrere verschiedene magnetische Phasen gefunden und die Phasenübergänge in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke und den Kopplungsstärken dargestellt. In der ersten Ordnung wurden schon Unterschiede zum isotropen Fall gefunden.

Im Vergleich zum regulären Modell konnte gezeigt werden, dass die Einführung von Anisotropie im Shastry-Sutherland Modell zu neuen physikalischen Effekten führt. Für eine genauere Beschreibung der Phasenübergänge wären weiterführende Rechnungen höherer Ordnung interessant und ein potenzieller Ausgangspunkt für zukünftige Arbeiten. Auch wäre es spannend, eine höhere Anzahl von Anregungen auf dem Gitter zu analysieren. Für das Magnetfeld sind vor allem höhere Ordnungen sehr interessant, um genauer die Einflüsse der Anisotropie auf die Magnetisierungsplateaus zu untersuchen.

## Literatur

- [1] B. Sriram Shastry und Bill Sutherland. „Exact ground state of a quantum mechanical antiferromagnet“. In: *Physica B+C* 108.1 (1981), S. 1069–1070. ISSN: 0378-4363. DOI: [https://doi.org/10.1016/0378-4363\(81\)90838-X](https://doi.org/10.1016/0378-4363(81)90838-X). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037843638190838X>.
- [2] Shin Miyahara und Kazuo Ueda. „Exact Dimer Ground State of the Two Dimensional Heisenberg Spin System  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ “. In: *Phys. Rev. Lett.* 82 (18 Mai 1999), S. 3701–3704. DOI: [10.1103/PhysRevLett.82.3701](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.3701). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.3701>.
- [3] Shin Miyahara und Kazuo Ueda. „Theory of the orthogonal dimer Heisenberg spin model for  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ “. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 15.9 (Feb. 2003), R327. DOI: [10.1088/0953-8984/15/9/201](https://doi.org/10.1088/0953-8984/15/9/201). URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/15/9/201>.
- [4] Julien Dorier. „Exotic phases of quantum frustrated magnets: magnetization plateaus, nematic order and supersolid phases“. en. Diss. Lausanne: EPFL, 2008. DOI: [10.5075/epfl-thesis-4204](https://doi.org/10.5075/epfl-thesis-4204). URL: <https://infoscience.epfl.ch/handle/20.500.14299/27405>.
- [5] Philippe Corboz und Frédéric Mila. „Crystals of Bound States in the Magnetization Plateaus of the Shastry-Sutherland Model“. In: *Phys. Rev. Lett.* 112 (14 Apr. 2014), S. 147203. DOI: [10.1103/PhysRevLett.112.147203](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.112.147203). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.147203>.
- [6] Myung-Hwan Whangbo u. a. „Magnetization Plateaus by the Field-Induced Partitioning of Spin Lattices“. In: *Condensed Matter* 9.4 (2024). ISSN: 2410-3896. DOI: [10.3390/condmat9040045](https://doi.org/10.3390/condmat9040045). URL: <https://www.mdpi.com/2410-3896/9/4/45>.
- [7] Frédéric Mila und K. Schmidt. „Strong-Coupling Expansion and Effective Hamiltonians“. In: Sep. 2011, S. 537–559. ISBN: 978-3-642-10588-3. DOI: [10.1007/978-3-642-10589-0\\_20](https://doi.org/10.1007/978-3-642-10589-0_20).
- [8] Roderich Moessner und Arthur P. Ramirez. „Geometrical frustration“. In: *Physics Today* 59.2 (Feb. 2006), S. 24–29. ISSN: 0031-9228. DOI: [10.1063/1.2186278](https://doi.org/10.1063/1.2186278). eprint: [https://pubs.aip.org/physicstoday/article-pdf/59/2/24/16665199/24\\\_1\\\_online.pdf](https://pubs.aip.org/physicstoday/article-pdf/59/2/24/16665199/24\_1\_online.pdf). URL: <https://doi.org/10.1063/1.2186278>.
- [9] R. Moessner und J. T. Chalker. „Low-temperature properties of classical geometrically frustrated antiferromagnets“. In: *Phys. Rev. B* 58 (18 Nov. 1998), S. 12049–12062. DOI: [10.1103/PhysRevB.58.12049](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.12049). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.12049>.
- [10] Carolin Boos u. a. „Competition between intermediate plaquette phases in  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  under pressure“. In: *Physical Review B* 100 (2019). CRIS-Team WoS Importer:2019-11-15. DOI: [10.1103/PhysRevB.100.140413](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.140413).
- [11] Jianwei Yang, Anders W. Sandvik und Ling Wang. „Quantum criticality and spin liquid phase in the Shastry-Sutherland model“. In: *Physical Review B* 105.6 (Feb. 2022). ISSN: 2469-9969. DOI: [10.1103/physrevb.105.1060409](https://doi.org/10.1103/physrevb.105.1060409). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.105.L060409>.

- [12] Lalit Yadav u. a. „Observation of Unprecedented Fractional Magnetization Plateaus in a New Shastry-Sutherland Ising Compound“. In: (2025). arXiv: [2405.12405](https://arxiv.org/abs/2405.12405) [[cond-mat.str-el](#)]. URL: <https://arxiv.org/abs/2405.12405>.
- [13] M Takahashi. „Half-filled Hubbard model at low temperature“. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 10.8 (Apr. 1977), S. 1289. DOI: [10.1088/0022-3719/10/8/031](https://doi.org/10.1088/0022-3719/10/8/031). URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/10/8/031>.
- [14] Takeo Matsubara und Hirotsugu Matsuda. „A Lattice Model of Liquid Helium, I“. In: *Progress of Theoretical Physics* 16.6 (Dez. 1956), S. 569–582. ISSN: 0033-068X. DOI: [10.1143/PTP.16.569](https://doi.org/10.1143/PTP.16.569). eprint: <https://academic.oup.com/ptp/article-pdf/16/6/569/5383838/16-6-569.pdf>. URL: <https://doi.org/10.1143/PTP.16.569>.

# Anhang

## A. Störung

Der  $\hat{V}_2$  Term als Matrix in der Singulett-Triplett-Basis aus [Gleichung 8](#).

$$\hat{V}_2 = \frac{1}{4}.$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1-J_2 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & J_1-J_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & -J_1-J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & -J_1-J_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & -J_1-J_2 & 0 \\ 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1-J_2 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1-J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -J_1+J_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1-J_2 & 0 & -J_1+J_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 & J_1-J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_1-J_2 & 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 & J_1-J_2 & 0 & 0 & 0 & -J_1-J_2 & 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J_1-J_2 & 0 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 & J_1-J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 \\ J_1-J_2 & 0 & -J_1-J_2 & 0 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & -J_1-J_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J_1-J_2 & 0 & 0 & -J_1+J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_1+J_2 \end{pmatrix}$$

## B. Hamiltonian Tensoren

$$\alpha, \beta = +1, 0, -1$$

$$A_{\alpha\beta} = \frac{J_1 - J_2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad B_{\alpha\beta} = \frac{J_2 - J_1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Für die Tensoren  $C, D, E$  schreiben wir nur die Werte auf die ungleich Null sind auf.

$$\begin{aligned} C_{+1+1+1+1} &= \frac{J_1+J_2}{4} & C_{+100+1} &= \frac{J_1+J_2}{4} & C_{0+1+10} &= \frac{J_1+J_2}{4} & C_{-1-1+1+1} &= -\frac{J_1+J_2}{4} \\ C_{+1+1-1-1} &= -\frac{J_1+J_2}{4} & C_{-1-1-1-1} &= \frac{J_1+J_2}{4} & C_{0+10-1} &= \frac{J_1+J_2}{4} & C_{0-10+1} &= \frac{J_1+J_2}{4} \\ C_{+10-10} &= \frac{J_1+J_2}{4} & C_{-10+10} &= \frac{J_1+J_2}{4} & C_{-100-1} &= \frac{J_1+J_2}{4} & C_{0-1-10} &= \frac{J_1+J_2}{4} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_{+1+10} &= \frac{J_1-J_2}{4} & D_{0+1+1} &= \frac{J_2-J_1}{4} & D_{-10+1} &= \frac{J_1-J_2}{4} & D_{+10-1} &= \frac{J_2-J_1}{4} \\ D_{-1-10} &= \frac{J_2-J_1}{4} & D_{0-1-1} &= \frac{J_1-J_2}{4} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{+1+10} &= -\frac{J_1+J_2}{4} & E_{0+1+1} &= \frac{J_1+J_2}{4} & E_{-10+1} &= \frac{J_1+J_2}{4} & E_{+10-1} &= -\frac{J_1+J_2}{4} \\ E_{-1-10} &= \frac{J_1+J_2}{4} & E_{0-1-1} &= -\frac{J_1+J_2}{4} \end{aligned}$$

## Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle herzlich bei Prof. Dr. Kai Phillip Schmidt bedanken für die intensive und exzellente Betreuung und die Möglichkeit, bei ihm eine Bachelorarbeit zu verfassen.

Bedanken möchte ich mich auch bei meinen Betreuern Jan Koziol, Antonia Duft und Patrick Adelhardt, die mir in zahlreichen Treffen stets mit Rat und Tat zur Seite gestanden sind und mir immer bei allen Fragestellungen geduldig geholfen haben. Ebenso möchte ich mich bei der gesamten Arbeitsgruppe für das herausragende Arbeitsklima bedanken.

Mein Dank gilt auch meiner Familie und meinen Freunden, die mich auf meinem Weg bis hierher immer unterstützt haben.

# Eigenständigkeitserklärung

Hiermit bestätige ich, dass ich diese Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Erlangen, den 05.08.2025

Jan Hartmann