

Physik exotischer Magnetisierungsplateaus des frustrierten Quantenmagneten $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$

vorgelegt von
Gregor Rafael Foltin

Dissertation
zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften

am
Lehrstuhl Theoretische Physik 1
Fakultät Physik
der TU Dortmund

30. Juni 2014

Abstract:

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Dimer-Phase des Shastry-Sutherland-Modells, einem geometrisch stark frustrierten Quanten-Spin-1/2-Modell, im externen Magnetfeld bei Temperatur $T = 0$. Die Analyse dieses Modells ist durch das Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ motiviert, das gut durch das Shastry-Sutherland-Modell beschrieben wird. $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ zeichnet sich dadurch aus, dass sich beim Anlegen eines externen Feldes ungewöhnliche Magnetisierungsplateaus herausbilden. In dieser Arbeit liegt das besondere Interesse in der mikroskopischen Beschreibung der Magnetisierungsplateaus, die stark korrelierten bosonischen Mott-Isolatoren mit spontaner Symmetriebrechung entsprechen. Von theoretischer Seite werden zwei Regime für die Magnetisierung unterschieden, die auch in diese Arbeit getrennt behandelt werden.

Zuerst werden die Plateaus bei niedriger Magnetisierung behandelt. Für dieses Regime sagt die etablierte Theorie Anregungen voraus, die aufgrund von starken repulsiven Wechselwirkungen zu kristallinen Phasen lokalisieren. Für mittlere Magnetisierungen formen sich hingegen sogenannte Streifen-Strukturen. Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment werden in dieser Arbeit aufgelöst, indem zunächst ein geometrisch reduziertes System, die Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre, betrachtet wird. Für dieses System wird perturbativ ein effektives Modell zu hoher Ordnung abgeleitet und mit einer klassischen Näherung sowie exakten Diagonalisierungen gelöst. Ein Vergleich mit der Dichte-Matrix-Renormierungs-Gruppe zeigt, dass Diskrepanzen nicht durch das effektive Modell induziert werden, sondern von der Vernachlässigung der exotischen Kinetik des effektiven Modells in der klassischen Näherung herrühren. Unsere Ergebnisse deuten auf eine Erweiterung des etablierten Bildes der Magnetisierungsplateaus hin, dass auch von variationellen Methoden im zweidimensionalen Modell für niedrige Magnetisierungen bestätigt wird. Da im System starke korrelierte Hüpfprozesse vorliegen, kann es zu einer Bindung der Teilchen im System kommen. Dies erklärt unseren Befund auf der 4-Bein-Röhre, dass gebundene Zwei-Teilchen-Zustände zu kommensurablen Phasen lokalisieren. Unsere Ergebnisse für die 4-Bein-Röhre lassen sich für $1/8 M_{\text{Sat}}$ und $1/4 M_{\text{Sat}}$ unmittelbar auf das zweidimensionale Modell übertragen. Für $1/4 M_{\text{Sat}}$ finden wir durch korreliertes Hüpfen stabilisierte, semi-klassische Streifen-Strukturen, analog zum zweidimensionalen Modell.

Der zweite Teil dieser Arbeit behandelt das zweidimensionale System im Bereich mittlerer Magnetisierung zwischen $1/4 M_{\text{Sat}}$ und $1/2 M_{\text{Sat}}$, indem ein störungstheoretischer Ansatz zur Beschreibung von Streifen-Strukturen bei endlicher Magnetisierung konstruiert wird. Die Methode erlaubt es die Energie und die Anregungslücken des Systems bei endlicher Magnetisierung perturbativ zu bestimmen. Mit dieser Methode werden erfolgreich die Breiten der Plateaus mit $1/3 M_{\text{Sat}}$ und $1/2 M_{\text{Sat}}$ bestimmt, die auch direkt mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden. Aus dem Vergleich folgt die Bestimmung von $J'/J = 0.63$ für das Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Frustration und exotische Phasen	1
1.2	Das Material	7
1.2.1	Kristallstruktur und exotischer Grundzustand	7
1.2.2	Anregungen	14
1.3	$\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ im Magnetfeld	20
1.4	Experimentelle Zusammenfassung	30
1.5	Das Shastry-Sutherland-Modell	32
1.5.1	Abschätzung der Kopplungskonstanten	35
1.6	Shastry-Sutherland-Modell im Magnetfeld	37
1.7	Motivation und Gliederung	47
2	Methoden	50
2.1	Perturbative kontinuierliche unitäre Transformation (PCUT)	50
2.1.1	Effektiver Hamiltonoperator und effektive Observablen	51
2.1.2	Herleitung effektiver Modelle und effektiver Observablen	59
2.2	Klassische Näherung (CA)	69
2.2.1	Klassisches Spin-Funktional	69
2.2.2	Numerische Bemerkungen	71
2.2.3	Ordnungsparameter	72
2.2.4	Einheitszellen der 4-Bein-Röhre	74
3	Effektives Modell	76
3.1	Das effektive Modell des Shastry-Sutherland-Modells in der Dimer-Phase	76
3.1.1	Physik des ungestörten Anteils und Quasi-Teilchen-Bild	77
3.1.2	Effektives Gitter, Cluster und Randbedingungen	80
3.1.3	Physik der Störung	87
3.1.4	Linked-Cluster-Entwicklung für das Shastry-Sutherland-Modell	92
3.1.5	Effektives Modell in 2. Ordnung	101
3.2	Effektives Modell und effektive Magnetisierung der 4-Bein-Röhre	106
3.2.1	Chemisches Potenzial	107
3.2.2	Ein-Teilchen-Hüpfen	108
3.2.3	Wechselwirkungen	111
3.2.4	Korrelierte Hüpfsterme	113
3.2.5	Paar-Fluktuationen	116
3.2.6	Magnetisierung der lokalen effektiven Teilchen	118
4	Klassische Behandlung der 4-Bein-Röhre	122
4.1	Die klassischen Resultate	122
4.1.1	Klassische Magnetisierungskurven	124

4.1.2	Magnetisierungskurven der DMRG	129
4.1.3	Magnetisierungsprofile des 1/8- und 1/4-Plateaus	132
4.1.3.1	1/8-Plateau	132
4.1.3.2	1/4-Plateau	137
4.1.4	Zusammenfassung	141
5	Exakte Diagonalisierung der 4-Bein-Röhre	143
5.1	Diagonalisierung endlicher Cluster	145
5.1.1	Analytische Diagonalisierung endlicher kleiner Cluster	145
5.1.1.1	1/4 Plateau	145
5.1.1.2	1/8 Plateau	149
5.1.1.3	3/16 Plateau	152
5.1.2	Numerische Diagonalisierung endlicher Cluster	157
5.1.2.1	Volle numerische Diagonalisierung endlicher Cluster	158
5.1.2.2	Trunkierte numerische Diagonalisierung größerer endlicher Systeme	167
5.2	Diagonalisierung des thermodynamischen effektiven Modells	171
5.2.1	Methodisches Vorgehen beim Diagonalisieren	171
5.2.2	Phasendiagramm	176
5.2.3	Plateau-Strukturen	180
5.2.3.1	1/4 Plateau	181
5.2.3.2	1/8 Plateau	184
5.2.3.3	3/16 Plateau	187
5.3	Zusammenfassung	190
6	Zweidimensionales Modell	191
6.1	Methodisches Vorgehen	192
6.2	Experiment	204
6.3	Grundzustandsenergien	206
6.4	Dispersion und Lücke	210
6.5	Phasendiagramm und Vergleich mit anderen Methoden	217
6.6	Zusammenfassung	220
7	Zusammenfassung	222
7.1	Zusammenfassung und Ausblick	222
A	Methode : DMRG	227
A.1	Dichte-Matrix-Renormierung-Gruppe (DMRG)	227
A.1.1	Einführung in die Grundideen	227
A.1.2	Algorithmus	231
B	Methode : Lanczos-Diagonalisierung	236
B.1	Lanczos-Verfahren	236
B.1.1	Lanczos-Tridiagonalisierung und Lanczos-Verfahren	236
B.1.2	Anmerkungen zur Zuordnung der Zustände	238
C	Methode : Lanczos-Diagonalisierung	244
C.1	Padé- und Dlog-Padé-Extrapolation	244
D	Thermodynamische Amplituden des Hamiltonian der 4-Bahn-Leiter	247

E Thermodynamische Amplituden der Observablen S^z der 4-Bahn-Leiter	254
Literaturverzeichnis	256
Teilpublikationen	267
Danksagung	268

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Frustration und exotische Phasen

In dieser Arbeit beschäftigen wir uns mit dem Shastry-Sutherland-Modell [1] im externen Magnetfeld. Bei dem Shastry-Sutherland-Modell handelt es sich um ein Spin-Modell aus zwei antiferromagnetischen Kopplungen, typischerweise J und J' genannt, die Teilchen mit Spin $1/2$ beschreiben sollen. Dieses Modell wird auf dem Shastry-Sutherland-Gitter diskutiert, welches wir in Kapitel 1.5 genauer diskutieren. Das Shastry-Sutherland-Modell ist ein prominentes Beispiel für ein Modell-System, in dem geometrische Frustration auftritt. In diesem Unterkapitel erläutern wir zunächst, was Frustration bedeutet und warum frustrierte Systeme besonders interessant sind. Dabei beschränken wir uns auf eine kurze Einführung. Interessierte Leser, die mehr zum Thema frustrierter Magnetismus erfahren wollen, verweisen wir auf [2] [3] [4] [5].

Im Bereich des frustrierten Magnetismus unterscheidet man zwischen der geometrischen und der Wechselwirkungsfrustration, abhängig davon, ob das betrachtete Gitter oder der betrachtete Hamiltonoperator für die Frustration verantwortlich ist. Das Bild 1.1 illustriert die Problematik der geometrischen Frustration. Geometrische Frustration kann in Gittern auftreten, die geschlossene Schleifen aus einer ungeraden Anzahl an Teilchen zeigen. Im Bild 1.1 ist eine Schleife aus drei Gitterplätzen gezeigt (ein Dreieck). Betrachten wir eine antiferromagnetische Wechselwirkung zwischen Spins $1/2$ auf diesem Gitter, erhält man einen klassischen Grundzustand, wenn man die Spins entgegengesetzt zueinander auf das Gitter setzt. Aufgrund der ungeraden Anzahl der Teilchen in der Schleife, können aber nur zwei Spins entgegengesetzt zueinander ausgerichtet sein. Unabhängig von der Orientierung des dritten Spins, kann dieser Spin seine Energie immer nur bezüglich eines Spins minimieren und ist ferromagnetisch orientiert zum zweiten Spin. Dieser Spin ist demnach "frustriert". Im Shastry-Sutherland-Gitter, das in dieser Arbeit untersucht wird, wird genau diese Situation vorliegen, da Dreiecke aus Quanten-Spins $1/2$ auftreten und die Wechselwirkungen des Shastry-Sutherland-Modells antiferromagnetische Heisenberg-Kopplungen sind.

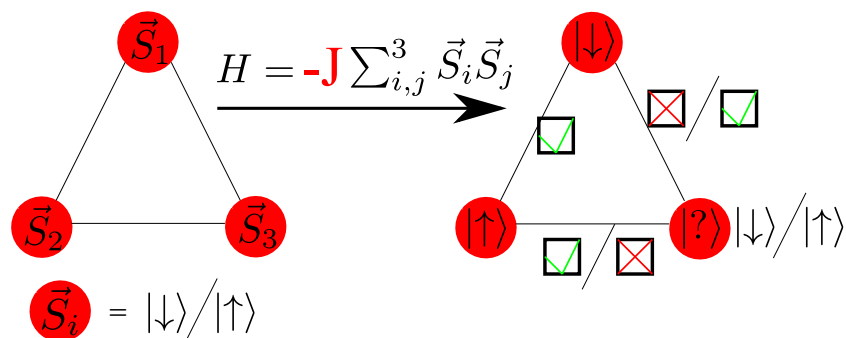


Abbildung 1.1: Wir zeigen ein Beispiel für geometrische Frustration. In einem Dreieck wechselwirken drei Spin-1/2-Teilchen mit antiferromagnetischen Heisenberg-Kopplungen ($J > 0$), so dass eine antiparallele Ausrichtung der Spins die Energie minimiert. In diesem Beispiel werden Spin \vec{S}_1 und Spin \vec{S}_2 antiparallel ausgerichtet. Der dritte Spin kann, unabhängig von der Orientierung, nur zu einem Nachbarn parallel stehen und zum anderen antiparallel platziert werden (angedeutet durch das OK- und X-Symbol in den Quadraten). Eine Energieminimierung an jeder Kopplung zwischen zwei Spins des Dreiecks ist nicht möglich.

Anderson vermutete in den 70er Jahren als erster einen exotischen Grundzustand für ein antiferromagnetisches Heisenberg-Modell auf dem Dreiecks-Gitter [6]. Das Dreiecks-Gitter ist das einfachste Gitter aus frustrierten Dreiecken. Damit eröffnete er ein bis heute populäres Feld der Physik. Dabei kann ein frustriertes Gitter zu ungewöhnlichen Phänomenen führen, wie später diskutiert wird. Das Heisenberg-Modell auf dem Dreiecksgitter ordnet aber in einer sogenannten 120° -Ordnung bei $T = 0$ [7] [8] [9], d. h. man findet, trotz der geometrischen Frustration, eine langreichweitige Spinordnung, die auch der entsprechende klassische Magnet aufzeigt. Auf anderen frustrierten Gittern, wie dem Shastry-Sutherland-Gitter, führt die Frustration jedoch zu Grundzuständen, die keine langreichweitige Spinordnung aufweisen.

Frustration kann aber auch generiert werden, indem man z. B. in einer eindimensionalen Spin-1/2-Kette eine ferromagnetische Nächste-Nachbar-Heisenberg-Kopplung mit einer antiferromagnetischen Übernächste-Nachbar-Heisenberg-Kopplung kombiniert (siehe [10]). Die erstgenannte Kopplung ist energetisch begünstigt, wenn alle Spins parallel ausgerichtet sind. Die zweite Kopplung zerteilt das System in zwei Untergitter, in denen die Spins jeweils antiparallel stehen müssen, um die Energie global zu minimieren. Unter der Annahme, dass beide Kopplungen gleich groß sind, erkennt man sofort die Frustration. Jeweils eine Kopplung ist energetisch ungünstig gelegen. Diese Frustration wird als Wechselwirkungsfrustration bezeichnet und hängt vom Hamiltonoperator ab.

An den Beispielen für geometrische und Wechselwirkungsfrustration sehen wir nun auch die Gemeinsamkeit. Sehr vereinfacht gesprochen, liegt in frustrierten Systemen das Problem vor, dass die Orientierung einiger Spins energetisch irrelevant ist, da ein eindeutiges Energieminimum nicht vorliegt. Es liegt eine hohe Entartung vor, d. h. eine große Anzahl an Zuständen existiert, die die maximale Anzahl an energetisch minimalen Wechselwirkungen erfüllt. Im ersten Beispiel (den Dreiecken im Shastry-Sutherland-Modell) liegen zwei Spins im Dreieck parallel zueinander, und im Beispiel der Heisenberg-Kette mit zwei Kopplungen, ist die Orientierung jedes zweiten Spins beliebig. Beide Beispiele zeigen, dass in frustrierten Systemen der Entartungsgrad der klassischen

Grundzustände mit der Größe des betrachteten Systems skaliert. In einem thermodynamischen System existieren unendliche viele klassische Zustände minimaler Energie. Man hat eine extensive Grundzustandsentartung.

Wir motivieren nun, was die Anwesenheit der vielen klassischen Grundzustände für Erwartungen eröffnet. Betrachten wir zunächst ein unfrustriertes zweidimensionales Quantensystem bei $T = 0$, so ist die Erwartung, dass der Grundzustand eine Symmetrie des Systems (spontan) bricht und dass es im Grundzustand zu langreichweitiger Ordnung kommt¹. Die langreichweitige Ordnung liegt typischerweise sowohl im klassischen Grundzustand als auch im Grundzustand des Quantensystems vor. Ein Beispiel für ein unfrustriertes System ist das antiferromagnetische Heisenberg-Modell für Spin $1/2$ auf dem Quadratgitter. Geben wir klassisch einem beliebigen Spin eine feste Orientierung, so richten sich alle anderen Spins im System entsprechend aus. Es liegt eine langreichweitige Korrelation der Spins untereinander vor und das System ist in einer Néel-Ordnung. Das System bricht die $SU(2)$ -Symmetrie spontan und dieser Zustand kann nach dem Mermin-Wagner-Theorem stabil gegen Quantenfluktuationen sein, die das System ggf. in einen ungeordneten Zustand bringen würden. Im Quantenfall ändert sich dieses Bild nicht, aber Quantenfluktuationen führen zu einer Energiereduktion im System und lokal ist die Untergitter-Magnetisierung an einem Gitterplatz geringer als das volle Moment $1/2$ (siehe [11]).

In der Regel zeigen die meisten zweidimensionalen Quanten-Systeme einen langreichweitig geordneten Grundzustand. Dazu erinnern wir z. B. an das zweidimensionale Dreiecksgitter, das trotz Frustration im Quantenfall eine 120° -Ordnung realisiert. Diese (Quanten)-Grundzustände sind adiabatisch verknüpft zu den klassischen Grundzuständen und typischerweise führen Quantenfluktuationen zu den eben angesprochenen Effekten, nämlich einer Energieabsenkung und der Reduktion des lokalen magnetischen Momentes.

In frustrierten Systemen besteht an einigen (oder allen) Spins die Freiheit, die Orientierung beliebig zu wählen ohne die Energie zu ändern. Es existiert eine makroskopische Grundzustandsentartung. Wir betrachten nun eine Überlagerung aller Grundzustände und greifen einen Spin im System heraus, der in eine feste Richtung polarisiert sei. Je weiter wir uns im frustrierten System von diesem fest ausgerichtete Startspin entfernen, umso weniger Spins mit definierter Orientierung können wir finden. Die Frustration führt dazu, dass der Startspin eine Überlagerung "spürt" und entfernte Gitterplätze daher unpolarisiert erscheinen. Die Korrelationen können in frustrierten Systemen mit der Entfernung daher stark abfallen. Wir haben unser Argument mit einem (hypothetischen) Überlagerungszustand begonnen. In einem Quanten-Spin-System können Quantenfluktuationen zwischen den makroskopisch vielen, klassischen Zuständen vermitteln und eine derartige Überlagerung ermöglichen. Diese starken Fluktuationen können einer langreichweitigen Ordnung des Quantensystems entgegenwirken und so eine Ordnung im System verhindern. Der Verlust von langreichweitiger Spin-Ordnung wirft nun die spannende Frage

¹Nach dem Mermin-Wagner-Theorem kann eine kontinuierliche Symmetrie in einer Dimension bei $T \geq 0$ und in zwei Dimensionen für endliche Temperatur nicht brechen. Laut diesem Theorem ist in einem zweidimensionalen System für $T = 0$ explizit eine Ordnung im System erlaubt.

auf, was das Quantensystem für einen (ungeordneten) Zustand realisiert, wobei verschiedene Szenarien realisiert werden können.

Zwei in der Literatur bekannte Szenarien für magnetisch ungeordnete Phasen in einem zweidimensionalen System sind der Valenz-Bindungs-Kristall (abgekürzt VBC, nach dem englischen Begriff Valence-Bond-Crystal) und die Resonante-Valenz-Bindung (abgekürzt RVB, nach dem englischen Begriff Resonating-Valence-Bond). Der RVB ist sehr prominent, da der RVB eine Spin-Flüssigkeits-Phase ist, wie Anderson sie zuerst für das Heisenberg-Modell auf dem Dreiecksgitter vermutete [6]. Man spricht in diesem Zusammenhang davon, dass im Zustand der Spin-Flüssigkeit jede (magnetische) Ordnung im System schmilzt. Die Wahl der Bezeichnung Spin-Flüssigkeit soll die Analogie dieser Phase zu Wasser herausstellen, der ungeordneten Flüssigkeitsphase von H_2O . Der entscheidende Unterschied zu Wasser ist jedoch, dass eine Spin-Flüssigkeit selbst bei Temperatur $T = 0$ keine Ordnung aufweist.

Gehen wir nun auf die VBC- und RVB-Phasen ein, so treffen wir die Annahme, dass sich Spins $1/2$ im System paarweise zu Singulettts binden. Aufgrund von Quantenfluktuationen zwischen den makroskopisch vielen klassischen Grundzuständen, kombiniert mit den Eigenschaften des Hamiltonoperators oder der Topologie des Gitters, kann die Formung der Bindungszustände begünstigt werden. Diese Bindungszustände können, aufgrund der Geometrie oder des Hamiltonoperators, an raumfesten Spin-Spin-Kopplungen lokalisieren. Dann zeigt die Dimer-Belegung eine periodische Struktur, die die Translationssymmetrie (je nach Einheitszelle des Gitters) brechen kann. Lokalisieren die Dimere, spricht man vom VBC. Erinnern wir uns daran, dass eine makroskopische Entartung im frustrierten System vorliegt, so begünstigen die Quantenfluktuationen speziell die Zustände aus dem entarteten Raum, die im VBC die (raumfesten) Überlagerungen der Spins zu Singulettts bilden. Aufgrund der Bildung von Singulettts ist der VBC-Zustand magnetisch ungeordnet. Man beachte aber, dass Dimer-Dimer-Korrelationsfunktionen langreichweitig geordnet sind. Da die meisten Systeme bei tiefen Temperaturen ordnen, stabilisieren sich ungeordnete Grundzustände in nur sehr wenigen zweidimensionalen Materialien oder Modellen. Interessanterweise kann aber im frustrierte Quantenmagneten $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ genau ein solcher exotischer Zustand experimentell realisiert werden. Mikroskopisch wird dieses Material durch das Shastry-Sutherland-Modell beschrieben (siehe Kapitel 1.5) und es zeigt sich, dass der VBC sogar ein exakter Eigenzustand des Modells ist. Dies ist wesentlich durch die Frustration begründet. Das Material und das Modell sind demnach gute Kandidaten, um den Zusammenhang von Frustration und Stabilisierung von ungeordneten Phasen zu analysieren.

Der VBC ist magnetisch ungeordnet, aber die Translationssymmetrie ist entweder gebrochen oder es kommt zumindest zu Lokalisierung (von Dimeren) innerhalb der Einheitszelle. Um die Frage zu beantworten, ob es auch möglich ist, einen Zustand zu stabilisieren, der “noch ungeordneter” ist, kehren wir zur Spin-Flüssigkeit und dem RVB zurück. Der RVB zeigt genauso wie der VBC keine magnetische Ordnung, aber der RVB bricht zusätzlich die Translationssymmetrie nicht bzw. findet im System keine Lokalisierung statt. Die Aussage, dass keine Ordnung vorliegt, kann auch physikalisch präziser formuliert werden. Dazu betrachten aktuelle Definitionen von

Spinflüssigkeiten das Verhalten der Korrelationen, die im lückenbehafteten RVB alle exponentiell abfallen. Konkreter gehen wir auf die Arbeit [6] von Anderson ein, die sich dem Bild der VBC bedient. Aufgrund der Natur der Quantenfluktuationen, ist im VBC eine spezielle Dimerisierung begünstigt. Ist das System aber diesbezüglich isotrop und begünstigt alle klassischen Zustände gleichermaßen, so folgt aus der makroskopischen Entartung, eine makroskopische Anzahl an möglichen Dimerisierungen. Sind die Quantenfluktuationen nun stark, so lokalisiert das System nicht in eine einzelne Dimerisierung und der Grundzustand kann als Überlagerung aller VBC gegeben sein, was gerade dem RVB-Zustand entspricht [12]. Es sei angemerkt, dass die Spin-Flüssigkeit, aufgrund ihrer ungeordneten Natur, nicht nur von theoretischem Interesse ist, sondern eine Verbindung von Spin-Flüssigkeiten zu Hoch-Temperatur-Supraleitern besteht [13]. Zudem ist eine Spin-Flüssigkeit ein möglicher Kandidat für einen Quanten-Grundzustand, der sich zur Nutzung als topologisch geschützter Quantencomputer eignet [14]. Zum letzten Punkt sei speziell der Toric-Code genannt. Dieses Modell lässt sich exakt lösen und der Grundzustand ist ein RVB (siehe [15]).

Wir haben zwei Beispiele für magnetisch ungeordnete Phasen vorgestellt, die das Themengebiet des frustrierten Magnetismus immer wieder beflügeln. Ein Beispiel für ein Modell, das einen VBC realisiert ist, wie angesprochen, das Shastry-Sutherland-Modell, mit dem wir uns in dieser Arbeit beschäftigen. Ein weiteres stark frustriertes Modell, das wir der Vollständigkeit halber nennen, ist das Heisenberg-Modell auf dem zweidimensionalen Kagomé-Gitter, kurz das Kagomé-Heisenberg-Modell. Bei dem Kagomé-Gitter handelt es sich um ein Gitter, topologisch äquivalent zu den Mustern auf japanischen Flechtkörben, die geformt sind wie gekoppelte David-Sterne (siehe Buch [16]). Wurde lange ein VBC als Grundzustand des Kagomé-Heisenberg-Modells vermutet [17], so tendieren in den letzten Jahren die meisten Veröffentlichungen (siehe z. B. [18] [19] [20] [21]) zu einem RVB als Grundzustand. Wir merken an, dass der Grundzustand des Kagomé-Heisenberg-Modells aber immer noch diskutiert wird. Es ist hingegen allgemein akzeptiert, dass es keine Spinordnung gibt und dass der Grundzustand im Kagomé-Heisenberg-Modell kein VBC ist, sondern eine Spin-Flüssigkeit. Ohne ins Detail zu gehen, sei gesagt, dass es innerhalb der RVB-Phase zu Unterschieden im Verhalten der Anregungen kommen kann. Es gibt Vorschläge das Kagomé-Heisenberg-System als eine \mathbb{Z}_2 -Spin-Flüssigkeit mit einer Lücke zu den Anregungen oder auf Basis einer $U(1)$ -Spin-Flüssigkeit, die lückenlose Anregungen zeigt, zu beschreiben (siehe auch [2]). Zu welcher Klasse der RVB des Kagomé-Heisenberg-Modells gehört, ist zur Zeit noch unklar, aber es gibt starke Evidenzen dafür, dass das Kagomé-Heisenberg-Modell einen \mathbb{Z}_2 -RVB als Grundzustand hat. Wir sehen am Beispiel des Kagomé-Heisenberg-Modells, dass es trotz der Dekaden dauernden Untersuchung noch viele offene Fragen gibt. Leider kommt es nur sehr langsam (wie beim Kagomé-Heisenberg-Modell) zu theoretischen Erkenntnissen im Bereich des frustrierten Quantenmagnetismus. Dies liegt aber nicht speziell am Kagomé-Heisenberg-Modell, sondern ist eine allgemeine Eigenschaft von frustrierten Systemen. Wir erinnern uns an die makroskopische Grundzustandentartung klassischer Zustände. Als Festkörperphysiker interessieren wir uns für den Bereich kleiner Energien, um den Grundzustand oder die elementaren Anregungen eines Systems zu verstehen. In frustrierten Systemen finden sich aber sehr viele

(Quanten)-Zustände im Nieder-Energiebereich. So ist die Unterscheidung zwischen den vorgeschlagenen Quanten-Zuständen (VBC, RVB oder etwas weiterem) sehr schwer. Die interessante Physik der frustrierten Spin-Systeme ist intrinsisch mit einer erheblich erschwerten Beschreibung der Systeme verbunden, was insbesondere methodische Fortschritte im Feld des frustrierten Quantenmagnetismus erfordert.

Wir haben die zwei exotischen Zustände, den VBC und den RVB, als interessante Phasen in theoretischen Modellen (am Beispiel des Shastry-Sutherland-Modells oder des Kagomé-Heisenberg-Modells) vorgestellt. Wir gehen nun auf die experimentellen Impulse ein, die das Feld des frustrierten Magnetismus erfährt.

Beispiele für Materialien, die sich durch ein zweidimensionales Spin-Modell simulieren lassen und zudem ungeordnetes Verhalten im Grundzustand zeigen sind selten. Wir beginnen mit dem Material Herbertsmithite ($\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$). Dieses Material scheint tatsächlich einen Spin-Flüssigkeits-Grundzustand zu zeigen, der soweit noch nie in einem zweidimensionalen Material gefunden wurde [22] [23] [24] [25]. Dabei wird angenommen, dass sich dieses Material gut mit dem Kagomé-Heisenberg-Modell, das einen RVB-Grundzustand hat, beschreiben lässt. In Messungen ist keine Anregungslücke im System zu sehen. Weiter liegt im Material eine endliche Dzyaloshinskii-Moriya (DM)-Wechselwirkung vor und der Einfluss der DM-Wechselwirkung bedarf weiterer Untersuchung von theoretischer und experimenteller Seite.

Weitere Beispiele für frustrierte Magneten sind die dreidimensionalen Spin-Eis-Materialien (siehe die Spin-Eis Kapitel in [2] oder [26]), namentlich die Pyrochlore Materialien $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ [27], $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ [28], $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ [29] und $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ [30],[31]. Die Spin-Eis-Materialien sind von speziellem Interesse, weil die Anregungen in diesen frustrierten Spin-Modellen das Verhalten von emergenten magnetischen Monopolen zeigen [32]. Eine weitere interessante Klasse von magnetischen, exotischen Materialien sind die organischen Supraleiter (siehe Buch [33]) wie $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ [34]. In diesen Systemen lässt sich das exotische, supraleitende Verhalten gut untersuchen und durch die leichte Veränderung der externen Parameter wie Druck, Magnetfeld oder Temperatur lassen sich Phasenübergänge zwischen verschiedenen Phasen des Systems erreichen und analysieren. Interessanterweise gibt es undotierte Muttersubstanzen dieser Materialien, die starke Evidenzen für eine Spinflüssigkeit zeigen [35]. Auch wenn die Natur dieser Spinflüssigkeit aktuell stark diskutiert wird, ist die geometrische Frustration sicherlich entscheidend für die Physik.

Wir haben bislang den Begriff der Frustration erklärt. Insbesondere kann Frustration in einem System ein Mechanismus sein, die Bedeutung von Quantenfluktuationen zu erhöhen und damit interessante ungeordnete Quantenphasen zu induzieren. Wir haben zwei wichtige ungeordnete Quanten-Zustände vorgestellt (VBC und RVB) sowie zwei Beispiele für Modelle gegeben, an denen sich das ungewöhnliche Verhalten studieren lässt (Shastry-Sutherland-Modell und Kagomé-Heisenberg-Modell). Des Weiteren haben wir Beispiele für Materialien gegeben, die aufgrund

von Frustration ungewöhnliches Verhalten zeigen. Es ist etabliert, dass sich $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ mikroskopisch gut durch das Shastry-Sutherland-Modell beschreiben lässt und wir beschreiben das Material und das Modell in den kommenden zwei Unterkapiteln genauer.

Ein spannender Weg neuartige Physik zu entdecken ist es frustrierte Systeme in einem externen Magnetfeld zu untersuchen. In einem externen Magnetfeld wird eine endliche Dichte korrelierter magnetischer Anregungen in den Grundzustand induziert. In unfrustrierten Systemen ist typischerweise die Beschreibung des Systems durch schwach wechselwirkende Bosonen möglich, wobei das externe Feld zum chemischen Potenzial der Bosonen korrespondiert. Hier realisiert das System effektiv eine lückenlose Supraflüssigkeit. In frustrierten Systemen liegen aber häufig starke Wechselwirkungen zwischen den magnetischen Anregungen vor. Diese starken Wechselwirkungen führen im endlichen Magnetfeld zur überraschenden Stabilisierung von exotischen bosonischen Mott-Isolatoren, die zu Magnetisierungsplateaus führen, wie prominenterweise in der VBC-Phase des Shastry-Sutherland-Modells im Magnetfeld beobachtet. Wir werden uns in dieser Arbeit mit solchen faszinierenden emergenten Phasen in diesem Modell beschäftigen, um die Magnetisierung des prominenten frustrierten Quantenmagneten $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ zu verstehen.

1.2 Das Material

In diesem Unterkapitel fassen wir den aktuellen Forschungsstand über das Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ zusammen. Zuerst diskutieren wir die Eigenschaften des Grundzustandes sowie die Natur und Eigenschaften der magnetischen Anregungen. Anschließend gehen wir auf das Verhalten im Magnetfeld ein. Dabei spielt die Beschreibung des Materials mit dem Shastry-Sutherland-Modell eine wesentliche Rolle, wobei auch Erweiterungen des Shastry-Sutherland-Modells stellenweise angesprochen werden müssen, um die experimentellen Befunde zu verstehen.

1.2.1 Kristallstruktur und exotischer Grundzustand

Das Material Strontium-Kupfer-Borat ($\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$) wurde erstmals 1991 von Smith und Kesler synthetisiert [36]. Die Autoren haben einen Kristall und ein Pulver des Materials mit Hilfe von Röntgenstreuung vermessen, um die Kristallstruktur des Materials aufzudecken. Wir rekapitulieren im Folgenden nur die physikalisch interessanten Punkte der Kristallstruktur (siehe auch Arbeiten [37] [38]). Wir begründen die reduzierte Beschreibung damit, dass wir auf eine Beschreibung des Magnetismus abzielen und dieser im Wesentlichen in zweidimensionalen Ebenen stattfindet. Aus dieser Beschreibung wird die Modellierung des Materials mit dem Shastry-Sutherland-Modell plausibel.

Im Wesentlichen ist $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ein geschichtetes Material, in dem sich CuBO_3 -Ebenen und Sr-Ebenen entlang der $\vec{c} = (0, 0, 1)^T$ -Richtung abwechseln. Dabei tragen die Kupferatome ein magnetisches Moment, das wir mit einem Spin-1/2 identifizieren. Die CuBO_3 -Ebenen verursachen den relevanten Magnetismus in diesem Material (siehe Bild 1.2). An einem Boratom

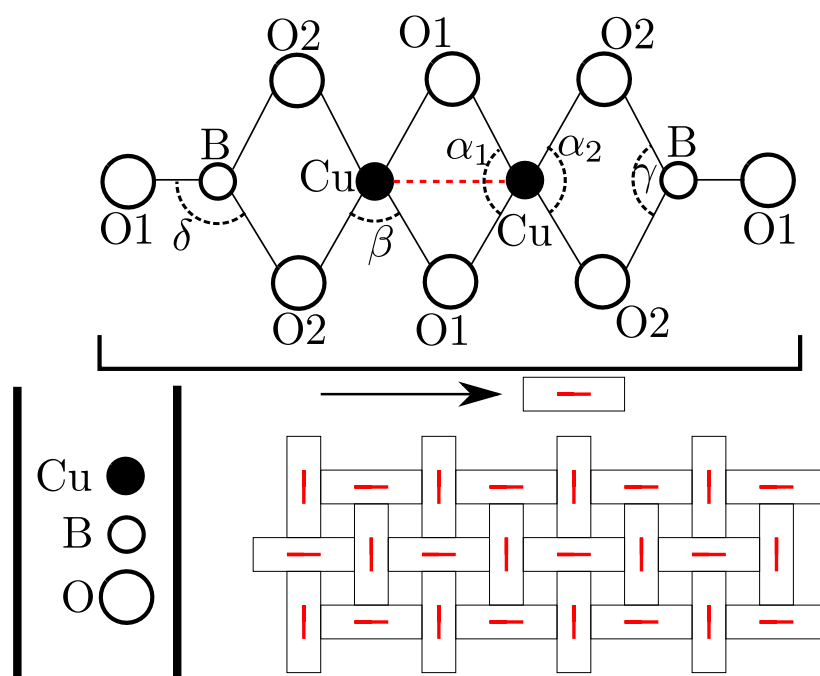


Abbildung 1.2: Reduzierte Darstellung der CuBO_3 -Ebene im Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ (oben). Im Bild sind die im Text angegebenen Brückenwinkel $\alpha_1, \alpha_2, \beta, \gamma, \delta$ definiert (oben). Aus dem im oberen Teil des Bildes definierten Block, kann die CuBO_3 -Ebene aufgebaut werden, wie es unten dargestellt ist.

befinden sich drei Bindungen zu drei Sauerstoffatomen und an jedem Kupferatom finden sich vier Bindungen zu vier Sauerstoffatomen. Wir kürzen die Struktur der vier Atome einer Dreifachbindung des Boratoms (zu drei Sauerstoffatomen) mit einem symbolischem \mathbb{D} ab. Weiter kürzen wir die Struktur der X-förmigen Vierfachbindung mit einem Kupferatom im Zentrum mit dem Symbol \mathbb{X} ab. Im Material finden sich dann Bor-Sauerstoff-Kupfer-Bindungen nach dem Muster $\mathbb{D} - \mathbb{X} - \mathbb{X} - \mathbb{D}$, wie es in Bild 1.2 im oberen Teil gezeigt ist [38]. Die $\mathbb{D} - \mathbb{X} - \mathbb{X} - \mathbb{D}$ -Struktur fassen wir in Bild 1.2 mit dem Symbol $\boxed{\text{---}}$ zusammen. Dabei soll der rote Strich die relevante Kupfer-Kupfer-Austauschwechselwirkung andeuten. Im Bild 1.2 haben wir innerhalb der $\boxed{\text{---}}$ -Struktur eine Unterscheidung zwischen den Sauerstoffatomen vorgenommen, um die Orientierung zu erleichtern. Die Sauerstoffatome O1 findet man in Bild 1.2 als Sauerstoffatome zwischen zwei Kupferatomen und an den Enden der gezeigten Struktur $\boxed{\text{---}}$. Die restlichen Sauerstoffatome werden mit O2 bezeichnet. Diese Einteilung ist sehr hilfreich, denn nun können wir die Gitterstruktur der CuBO_3 -Ebene aufbauen. Die Gitterstruktur ergibt sich, mit den als O1 bezeichneten Sauerstoffatome dieser Struktur, wenn die Strukturen orthogonal zueinander binden, indem wir die O1-Sauerstoffatome am Ende der Struktur $\boxed{\text{---}}$ mit den O1-Sauerstoffatomen zwischen den Kupferatomen der nächsten $\boxed{\text{---}}$ -Einheit identifizieren. Dies ist im unteren Teil von Bild 1.2 dargestellt, wobei wir zur Orientierung zusätzlich noch den effektiven Kupfer-Kupfer-Austausch über die zentralen O1-Sauerstoffatome, als rote Linie dargestellt haben.

Wir kommen nun zu den mikroskopisch relevanten Daten. Konkret diskutieren wir die Bindungswinkel und die zwischenatomaren Abstände. Nach Keszler et al. [36] beträgt der Abstand

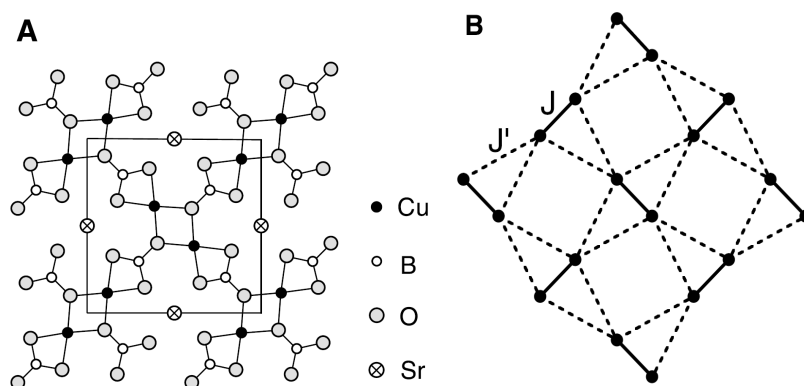


Abbildung 1.3: Schematische Kristallstruktur des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ (linkes Bild). Im rechten Bild ist die magnetische Struktur mit den relevanten antiferromagnetischen Kupfer-Kupfer-Superaustauschwechselwirkungen J und J' zu sehen. Beide Abbildungen stammen aus [39].

zwischen einem Kupferatom und einem O1-Sauerstoffatom 1.929 \AA und zwischen einem Kupferatom und einem O2-Sauerstoff 1.947 \AA bei Raumtemperatur. Der Winkel zwischen den Atomen $\text{O1} - \text{Cu} - \text{O1}$ beträgt $\alpha_1 = 82.2^\circ$ und zwischen den Atomen $\text{O2} - \text{Cu} - \text{O2}$ liegt ein Winkel von $\alpha_2 = 72.9^\circ$ vor. Diese Winkel sind ebenfalls in Bild 1.2 eingezeichnet, zusammen mit dem Winkel $\beta = 102.4^\circ$, bei dem es sich um den $\text{O1} - \text{Cu} - \text{O2}$ -Winkel handelt. Weitere relevante Abstände sind der Abstand von einem Boratom zu einem O1-Sauerstoffatom, gegeben durch 1.353 \AA und der Abstand von einem Boratom zu einem O2-Sauerstoffatom, gegeben durch 1.379 \AA . Die relevanten Winkel am Boratom sind $\gamma = 114.1^\circ$, welcher den $\text{O1} - \text{B} - \text{O1}$ -Winkel darstellt und der Winkel $\delta = 122.9^\circ$, der am $\text{O1} - \text{B} - \text{O2}$ -Bein liegt.

Wir wenden uns nun dem Magnetismus zu. Dazu geben wir die Einheitszelle des Materials in Abbildung 1.3 an. In dieser Abbildung sind die Kupferatome als schwarze Punkte gut erkenntlich eingetragen. Die Lage der Strontiumatome der Zwischenebenen sind in diesem Bild ebenfalls dargestellt. Es gibt zwar eine schwache Austauschwechselwirkung zwischen zwei Kupferatomen verschiedener CuBO_3 -Ebenen, über die Strontiumatome in der Zwischenebene, aber im Wesentlichen ist der Magnetismus durch den Austausch der Kupferatome innerhalb einer $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ -Ebene gegeben. Die Kupferatome sind die einzigen atomaren Bestandteil des Materials sind, die ein magnetisches Moment tragen. Aufgrund von Superaustausch können wir daher den Magnetismus in diesem Material auf eine effektive Wechselwirkung der Kupferatome reduzieren.

Die auf die Kupferatome reduzierte Kristallstruktur ist im rechten Teil von Bild 1.3 zu sehen. Dabei hat jedes Kupferatom einen nächsten Nachbarn im Abstand von 2.905 \AA bei Raumtemperatur, mit dem es über die Austausch-Kopplung J wechselwirkt. Weiter besitzt das Kupferatom vier Über-Nächste-Nachbarn mit denen das Kupferatom über die Austausch-Kopplung J' wechselwirkt, die bei Zimmertemperatur im Abstand von 5.132 \AA vorliegen [37]. Der Brücken-Winkel $\text{Cu} - \text{O} - \text{Cu}$ (siehe Bild 1.2), der die Austausch-Kopplung J bestimmt, liegt bei Zimmertemperatur bei 102.42° und ist antiferromagnetisch. Die Konstante der Austauschwechselwirkung J ist

die stärkste magnetische Wechselwirkung im Material. Der Winkel am Cu – O2 – B – O1 – Cu-Bein bestimmt weiter, dass die Austauschkonstante J' über ein Cu – O2 – B – O1 – Cu-Bein ebenfalls antiferromagnetisch ist.

Im Jahr 1999 veröffentlichten Kageyama et al. Messungen der magnetischen Suszeptibilität und der nuklearen Quadrupol-Resonanz (NQR) am Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$, zusammen mit Messungen im Magnetfeld [37]. Wir interessieren uns zunächst für die Messung der Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität, die in Abbildung 1.4 gezeigt ist. Im Inset der Abbildung 1.4 sind die bereinigten Messdaten mit schwarzen Punkten gekennzeichnet, die einen auffälligen, exponentiellen Verlauf für kleine Temperaturen zeigen. Das ist ein Hinweis auf eine magnetische Anregungs-Lücke. Nach diesem ersten Hinweis haben die Autoren eine NQR-Messung durchgeführt. Diese Messung bestätigt die Existenz der Anregungslücke und offenbart einen (fast) exakten Singulett-Grundzustand im System. Die Singulettts sind auf Dimeren lokalisiert, die sich aus den zwei benachbarten Spin-1/2-Kupferelektronen bilden, die mit der Kopplung J verbunden sind. Die Dimerisierung liegt im gesamten System an kristallographisch äquivalenten Punkten vor, wobei die Dimere orthogonal zueinander liegen (siehe Bild 1.2, das die Dimerisierung im unteren Teil skizziert).

Bei der Anregungs-Lücke im Material muss es sich, bezogen auf den magnetischen Grundzustand, um eine Spin-Lücke handeln. Die Autoren haben also ein dimerisiertes System mit Spin-Lücke in einem zweidimensionalen Magneten gefunden, wofür es in der Natur nur wenige weitere Beispiele gibt. Des Weiteren haben die Autoren ein Material gefunden, das einen exotischen Grundzustand stabilisiert. Dabei nehmen wir vorweg, dass hierfür die geometrische Frustration im System verantwortlich ist. Um den ungewöhnlichen Kurvenverlauf der magnetische Suszeptibilität zu fitten, haben die Autoren zum ersten Mal die Frage nach einem geeigneten mikroskopischen Modell gestellt. Die durchgezogene Linie in Abbildung 1.4 entspricht dem Ergebnis einer (theoretischen) Rechnung, auf Basis eines Modells isolierter Dimere ($J' = 0$). Die gestrichelte Linie zeigt die Ergebnisse einer Rechnung, die die Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung J' einbezieht. Jedoch ist die J' -Kopplung nur auf dem Level einer Molekularfeld-Theorie berücksichtigt. Wie zu sehen ist, liefert keine der beiden Rechnungen einen zufriedenstellenden Fit. Die mikroskopische Erklärung des Verlaufs bleibt zunächst offen.

Kurze Zeit später konnten Miyahara und Ueda die Fragestellung nach einem geeigneten mikroskopischen Modell klären [40]. Die Autoren erkennen in der orthogonalen Lage der gekoppelten Dimere die Äquivalenz zum Shastry-Sutherland-Modell und können, auf Grundlage dieses Modells, einen angemessenen Fit der Suszeptibilitätsdaten aus Arbeit [37] bestimmen. Wir werden in Kapitel 1.5 auf das Shastry-Sutherland-Modell im Detail eingehen und merken hier nur an, dass dieses Modell einen exakten Singulett-Grundzustand aufweist.

Motiviert durch diese Erklärung und den offenen Fragen bezüglich des Phasendiagramms dieses Modells, hat die Arbeit [41] den Grundzustand des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ erneut mittels nuklearer magnetischer Resonanz-Experimente (NMR) gemessen. Mit dieser Methode beobachteten sie, dass die Quadrupol-Resonanz-Linie des Kupfers im (schwachen) Magnetfeld in vier Linien

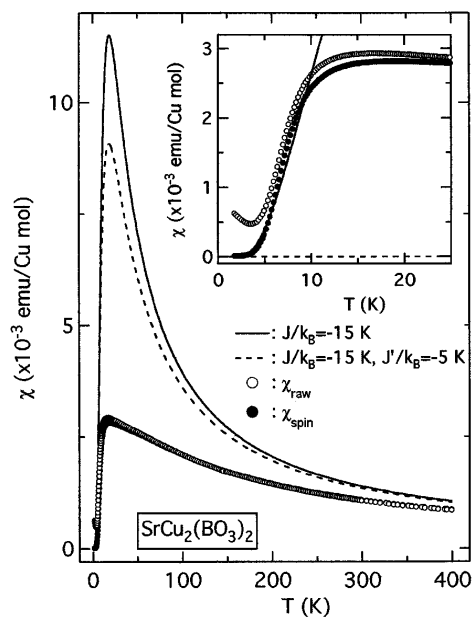


Abbildung 1.4: Gemessene magnetische Suszeptibilität des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ als Funktion der Temperatur (gepunktet) und zwei theoretische Rechnungen, veröffentlicht in [37]. Der Inset zeigt die bereinigten Messwerte für kleine Temperaturen als schwarze Punkte und einen Fit mit einer exponentiellen Funktion für den Bereich kleiner Temperaturen.

aufspaltet und dass die Spin-Echo-Intensität einiger aufgespaltener Linien unter gewissen Pulsen oszilliert [41]. Die Autoren erklären dieses Phänomen damit, dass starke Spin-Spin-Kopplungen im System vorliegen, was die Autoren als direkte Beobachtung des Singulett-Produktzustandes, also einem dimerisierten System, interpretieren. Wir merken an, dass spätestens seit dieser Arbeit, die Beschreibung des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ durch das Shastry-Sutherland-Modell als etabliert gilt, da die Grundzustand-Charakteristika übereinstimmen. Die NMR-Messung bestimmt die dominante Kopplungskonstante auf $J = 75$ K. Weiter kann die experimentelle Suszeptibilitätskurve nur für nennenswerte Zwischendimer-Kopplung J' gefittet werden, so dass Arbeit [40] die Kopplung auf $J' = 0.68J$ abgeschätzt.

Natürlich existieren im Material neben J und J' weitere Kopplungen, die im Shastry-Sutherland-Modell nicht enthalten sind. Mazurenko et al. haben mit einer ab initio Rechnung die Amplituden von zusätzlichen (unfrustrierten) symmetrischen und asymmetrischen Kopplungen bestimmt [42]. Das Ergebnis der Arbeit zeigt, dass (unfrustrierte) symmetrische und asymmetrische zusätzliche Kopplungen im Material vorliegen, die typischerweise eine Amplitude in der Größenordnung von einigen Prozent der Hauptkopplung J haben. Diese kleinen zusätzlichen Kopplungen können beispielsweise eine Rolle spielen, weil die asymmetrischen Kopplungen dafür sorgen, dass der Grundzustand von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ kein perfekter Singulett-Produktzustand ist.

Wir werden in dieser Arbeit speziell über das Verhalten im Magnetfeld untersuchen. Deswegen merken wir hier an, dass es einige Phasen bei endlichem Feld gibt, in denen die Frustration der Kopplung J' dazu führt, dass die Energieskala J nicht relevant ist. Dann spielen niedrigere

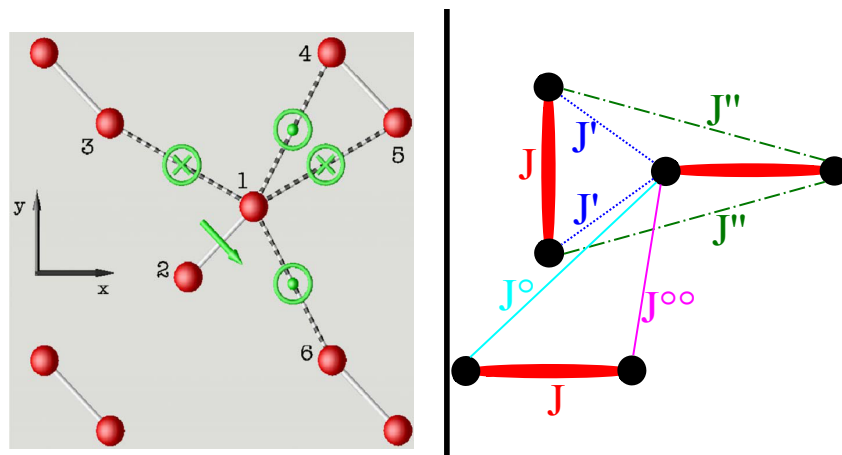


Abbildung 1.5: Zusätzliche Kopplungen im Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. Links sind die Inner- und Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkungen (Bild aus [42]) und rechts sind zusätzliche Heisenberg-Kopplungen aufgeführt, die in [42] diskutiert werden.

Energieskalen eine wichtige Rolle. In diesem Regime werden speziell die anisotropen Wechselwirkungen, mit Amplituden von nur wenigen Prozent von J , die Dynamik im System mitbestimmen, was die Betrachtung dieser Wechselwirkungen weiter motiviert.

In Abbildung 1.5 sind die zusätzlichen Kopplungen, die in Arbeit [42] berechnet wurden, dargestellt. Auf der linken Seite zeigen wir die anisotropen Kopplungen, bei denen es sich um Dzyaloshinski-Moriya-Wechselwirkungen (DM-Wechselwirkungen) handelt, d. h. einer Kopplung vom Typ $\vec{D}_{i,j} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j$. Hier sind \vec{S}_i und \vec{S}_j die Spin-Operatoren benachbarter Plätze und $\vec{D}_{i,j}$ ist der DM-Vektor der Amplituden der drei Komponenten der DM-Wechselwirkung. Dabei haben nur asymmetrische Spin-Spin-Kopplungen eine nennenswerte Amplitude [42], die den Spin-Paaren der Heisenberg-Kopplungen J und J' entsprechen (vgl. linke und rechte Seite von Bild 1.5). Entsprechend spricht man auch von der Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung und der Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung. Mazurenko schätzt den Amplituden-Vektor $\vec{D}_{1,2}$ der Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung auf $\vec{D}_{1,2} = (0.25, 0.25, 0)$ meV ab (siehe den Pfeil im linken Teil von Bild 1.5 an den Spins 1 und 2). Der Bindungszustand von zwei Spins, kann den Gesamtspin $\vec{S}_{\text{Total}} = 0$ (Singulett) und $\vec{S}_{\text{Total}} = 1$ (Triplet) haben. Die Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung sorgt für eine Mischung der Zustände verschiedener Quantenzahlen, da \vec{S}_{Total} für asymmetrische Wechselwirkungen keine gute Quantenzahl ist. Daher ist der Singulett-Grundzustand des Materials auch kein exakter Produktzustand mehr, da ein kleiner Anteil an Triplets auf jedem Dimer in den Grundzustand eingemischt ist.

Die Autoren der Arbeit [38] haben Struktur-Messungen an der CuBO_3 -Ebene vorgenommen. Sie zeigen, dass die Atome der CuBO_3 -Ebene keine perfekte Fläche ausbilden. Die Ebene ist unterhalb von $T_s = 395\text{K}$ verzogen, d. h. jeder zweite Dimer liegt leicht außerhalb der CuBO_3 -Ebene [38]. Dieser Strukturfehler der Ebene ist für die Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung verantwortlich, denn die verzogene Struktur führt zum Bruch der Spiegelsymmetrie der Ebene und bedingt damit Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung. Entsprechend ist der Amplituden-Vektor der Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung $\vec{D}_{1,2}$ oberhalb von $T_s = 395\text{K}$ $|\vec{D}_{1,2}| = 0$, da die Spiegelsymmetrie

in diesem Fall vorliegt. Innerhalb der CuBO_3 -Ebene führt die verzogene Struktur zu keinen qualitativen Strukturänderungen [38].

Wir betrachten nun die Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung. Wir erinnern uns an die Struktur der CuBO_3 -Ebene und im Speziellen an die Dreifach-Bindungen aus drei Sauerstoffatomen und einem Boratom (diese Struktur hatten wir mit \mathbb{D} abgekürzt). Die Superaustausch-Kopplung der Zwischen-Dimer-Spins (effektiv die Kopplung J') entsteht durch die Kopplung des $\text{Cu} - \text{O}_2 - \text{B} - \text{O}_1 - \text{Cu}$ -Beins (siehe Bild 1.2). Da aber an der Dreifach-Bindung des Boratoms keine Inversionssymmetrie vorliegt, tritt neben der Heisenberg-Kopplung J' eine anisotrope Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung auf (siehe [43]). Diese Wechselwirkung schreibt sich wieder gemäß $\vec{D}_{i,j}\vec{S}_i \times \vec{S}_j$, wobei die Spins i und j nun zu verschiedenen Dimeren gehören, wie es der linke Teil von Bild 1.5 zeigt.

Wir erinnern daran, dass die verzogene Struktur der CuBO_3 -Ebene zu keiner Verschiebung innerhalb dieser Ebene führt. Daher sind die Beiträge der DM-Wechselwirkung (genauso wie J') zu allen Über-Nächsten-Nachbar-Spin-Spin-Paaren (vom Betrag) gleich groß. Die Amplituden-Vektoren $\vec{D}_{i,j}$ zeigen an den verschiedenen Kopplungen aber in verschiedene Richtungen, wie im linken Teil des Bildes 1.5 gezeigt [43]. Nach [44] ist die Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung für die Anregungen und das Verhalten im Feld relevant. Wir werden diese Wechselwirkung deshalb später wieder aufgreifen. An dieser Stelle sprechen wir nur kurz über die Amplituden der Komponenten von $\vec{D}_{i,j}$. Mit Hilfe der Arbeit [44] kann durch einen Vergleich mit einem Experiment auch eine erste Abschätzung der Stärke der DM-Wechselwirkung gegeben werden. Dabei kann durch diesen Vergleich lediglich die Amplitude der Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung auf $|\vec{D}_{i,j}|/J = -0.02$ abgeschätzt werden. Eine komponentenweise Bestimmung der Stärke der Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung liegt aktuell nur durch die ab initio Rechnungen aus Arbeit [42] vor. Hier werden die Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkungen als $\vec{D}_{1,3} = (-0.01, -0.07, -0.1)$ meV, $\vec{D}_{1,4} = (-0.07, -0.01, 0.1)$ meV, $\vec{D}_{1,5} = (0.01, 0.07, -0.1)$ meV und $\vec{D}_{1,6} = (0.07, 0.01, 0.1)$ meV berechnet, wobei die Spin-Paare i, j des Amplituden-Vektors $\vec{D}_{i,j}$ wie im linken Teil von Bild 1.5 definiert sind. Vergleicht man die Komponenten der Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung mit der Hauptkopplung J , die Mazurenko mit $J = 7.3$ meV angibt, so liegen die Komponenten der Amplituden-Vektoren $\vec{D}_{i,j}$ bei 1-2% von der Kopplung J .

Will man eine Zwischenebenen-Kopplung diskutieren, ist darauf zu achten, dass effektiv jeder zweite Dimer im System einen anderen Abstand zur nächsten CuBO_3 -Ebene hat und es mindestens zwei unterschiedliche Kopplungen der Ebenen geben muss, wobei man nur einen kleinen Unterschied erwartet [45]. Die Arbeit [42] schätzt die Zwischenebenen-Kopplung ebenfalls ab, aber führt den Symmetriebruch nicht explizit ein. Die einzige relevante Zwischenebenen-Kopplung findet zwischen den Spins statt, die innerhalb einer Ebene mit der Kopplung J gebunden sind. Die Amplitude der Zwischenebenen-Kopplung ist ungefähr $0.008J$. Beachten wir, dass es sich um eine frustrierte Kopplung handelt, ist die Zwischenebenen-Kopplungen vernachlässigbar.

Abschließend diskutieren wir weitere frustrierte Heisenberg-Kopplungen, namentlich die Kopplungen J° und J^∞ aus Bild 1.5. Diese Kopplungen haben laut Mazurenko eine Amplitude von

$J^\circ = 0.17$ meV und $J^{\circ\circ} = 0.06$ meV. Diese Kopplungen sind klein und da diese Kopplungen vom Heisenberg-Typ sind, erwarten man keine Auswirkung auf die wesentliche Physik. Eine Vernachlässigung dieser Terme wird in der Literatur häufig vorgenommen und die Verwendung von J° - und $J^{\circ\circ}$ -Kopplungen wird erst plausibel, wenn Energieskalen im System analysiert werden, die in der Größenordnung von J° und $J^{\circ\circ}$ liegen. Das ist für anisotrope Kopplungen anders. Die Amplituden, die Mazurenko für die DM-Wechselwirkung bestimmt, liegen zwar in ähnlichen (kleinen) Größenordnungen, haben aber interessante Auswirkungen auf die Physik wie z. B. der Verlust des exakten Singulett-Grundzustandes.

Diese Kopplungen müssen trotz ihrer Größenordnung ggf. betrachtet werden, möchte man an Asymmetrie verknüpfte Phänomene beschreiben. Selbstverständlich sind diese Terme bei Analysen kleiner Energieskalen, in denen diese Größenordnungen wichtig werden, zu nutzen. Die Entscheidung, ob DM-Terme zu berücksichtigen sind, hängt von der Fragestellung ab und ist nicht zwingend eine Frage der Größenordnung. Wie besprochen, können J° - und $J^{\circ\circ}$ -Kopplungen typischerweise vernachlässigt werden. Analoges gilt für die Kopplung J'' , die im rechten Teil von Bild 1.5 dargestellt ist. Mazurenko gibt diese Amplitude in seiner Arbeit nicht an, da die Amplitude zu klein ist. Weitere Hinweise darauf, dass diese Kopplung nicht relevant ist, können in Arbeit [46] gefunden werden. In dieser Arbeit werden experimentelle Daten zu Anregungen mit Rechnungen an einem, um J'' erweiterten, Shastry-Sutherland-Modell verglichen. Sowohl die präsentierten zusätzlichen Heisenberg-Kopplungen (J° und $J^{\circ\circ}$) als auch die DM-Wechselwirkungen sind klein und für Fragestellungen, die den Grundzustand oder die elementaren Anregungen betreffen, nur nach betrachteter Fragestellung relevant. Dieses Bild wird sich in Anwesenheit eines Feldes aber ändern. Wir werden Feldbereiche kennenlernen, in denen alle Wechselwirkungen dieser kleinen Skalen relevant für die Beschreibung der Physik werden können.

1.2.2 Anregungen

Wir kommen nun zu den magnetischen Anregungen des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. Dabei sollen die theoretischen Erklärungen nur angeschnitten werden, da die ausführliche Beschreibung der Theorie in Kapitel 1.6 folgt. In diesem Unterkapitel stehen die experimentellen Aspekte im Mittelpunkt. Die Diskussion der Anregungen unterstützt unser Ziel, den Magnetismus im Material zu verstehen und zu beschreiben. Wir nehmen vorweg, dass ein endliches Magnetfeld dazu führt, dass eine endliche Dichte an Anregungen im System vorliegt und das Verständnis der Dynamik individueller elementarer Anregungen hilft, die Physik in Anwesenheit vieler Anregungen besser zu verstehen.

In diesem Teil der Arbeit geben wir öfter auch Zahlenwerte für Energien im System an. Während man im Alltag üblicherweise die Energie in der Einheit Joule, abgekürzt durch J, angibt, ist diese Einheit bei den hier betrachteten Größenordnungen unanschaulich. Die Energie, in dem hier betrachteten System, wird in der Literatur in vier Normierungen angegeben. Die erste Normierung ist die Angabe in elektrischen Einheiten mit einer typischen Größenordnung von 10^{-3}

eV = meV. Weiter werden Energien in Temperatureinheiten Kelvin, mit der typischen Größenordnung 100 K verwendet oder Energien in Frequenzeinheiten, mit einer Größenordnung von 1000 GHz, angegeben. Zuletzt sei die Normierung der Energien in magnetischen Einheiten Tesla genannt, mit Größenordnung die typischerweise 10 T betragen. Mit Hilfe der Elementarladung e ($e = 1.602 \cdot 10^{-19}$ As = $16.02 \cdot 10^{-20}$ As, AsV=J) für die elektrische Einheitenwahl, der Boltzmannkonstante k_B ($k_B = 1.381 \cdot 10^{-23}$ J/K) für die Temperatureinheiten, dem Planck'schen Wirkungsquantum h ($h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Js = $0.06626 \cdot 10^{-23} \cdot 10^{-9}$ Js) für die Frequenznormierung und dem magnetischen Moment für ein Elektronen-Spin $1/2$ $\mu_e = \frac{g_e \hbar}{2 m_e} |\vec{S}| = 0.9268 \cdot 10^{-23}$ J/T (e Elementarladung, Elektronenmasse $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31}$ kg, $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34}$ Js, Landé-Faktor Elektron $g_e \approx 2$), können die Einheiten ineinander umgerechnet werden. Wählen wir z. B. eine Kopplung von $J = 10$ meV in elektrischen Einheiten, so entspricht dies 116.1 K, 2556.7 GHz und 172.9 T in den anderen Einheiten.

Zur Beobachtung der Anregungen nutzen die Autoren von [47] die Elektron-Spin-Resonanz (ESR). Diese Methode bestimmt Spektren für Energieniveaus mit Quantenzahl $S_z \neq 0$, aufgrund der Auswahlregeln des Mikrowellenfeldes, das zur Absorptionsmessung genutzt wird. In ersten qualitativen Messungen für verschiedene Frequenzen finden die Autoren eine große Anzahl von lückenbehafteten Anregungen. Speziell die Anregungen kleinster Energie sind interessant. Die niedrigste Anregung ist ein zweifach entartetes Niveau mit der Anregungsenergie des niedrigeren Zustandes $\Delta = 34.7$ K (722 GHz, 3 meV, 52 T) für $H = 0$. Die energetisch nächste Absorptionslinie stellt die nächste Spin-Anregung mit $S_z = 1$ und $\Delta = 54.7$ K (1140 GHz, 4.7 meV, 81.5 T) für $H = 0$ dar.

Darauf präsentieren die Autoren ein Frequenz-Magnetfeld-Diagramm, das die Natur der Anregungen deutlich macht. Wir erinnern daran, dass in einem Magnetfeld die Entartung zwischen Zuständen verschiedener Quantenzahl S_z aufgehoben wird, wobei $S_z = +1$ -Zustände linear an Energie gewinnen und $S_z = -1$ -Zustände linear an Energie verlieren. Das zweifach entartete, niedrigste Energielevel zeigt im transversalen Feld, dass beide Zustände Bestandteile $S_z = +1$ und $S_z = -1$ haben. Im longitudinalen Feld gewinnt der tiefer liegende Zustand linear an Energie und der darüber liegende Zustand steigt (linear) in der Energie. Bei den Zuständen handelt es sich also um Eigenzustände des Operators S_x .

Die guten Quantenzahlen der beiden niedrigsten Triplet-Moden liegen in der x-Richtung. Dies ist eine Konsequenz von Anisotropien, speziell der Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung, die die S_z -Symmetrie bzw. Spin-Rotations-Symmetrie explizit bricht. Im transversalen und longitudinalen Feld sehen die Autoren weiter, dass ein $S_z = +1$ - (bzw. $S_x = +1$)-Zustand vom zweiten Anregungsniveau bei $\Delta = 54.7$ K abfällt, diskutieren aber die $S_z = -1$ -Komponenten dieses Niveaus nicht. Dabei schließen die Lücken der ersten entarteten Anregung zwischen Feldstärken von $H = 22$ T bis $H = 26$ T, abhängig davon, welcher aufgespaltene Zustand betrachtet wird und in welche Richtung das Magnetfeld orientiert ist. Die Lücke des zweiten angeregten Zustandes schließt bei höheren Feldern. Die Autoren machen aber die interessante Beobachtung, dass im eben beschriebenen Bereich von $H = 22$ T bis $H = 26$ T auch ein oder mehrere $S_z = +2$ -Anregungen die Anregungslücke schließen. Da ein elementares Triplet einen Gesamtspin von

$S = 1$ hat, deuten $S_z = +2$ -Anregungen (mit einem Gesamtspin $S = 2$), auf Bindungseffekte hin. Innerhalb der Messgenauigkeit können aber keine genaueren Aussagen getroffen werden und das genaue Verhalten der Anregungen für Felder größer $H \approx 20 T$ bleibt komplex und unklar. Die Auflösung ist aber gut genug, um zweifelsfrei festzustellen, dass die Magnetisierung (bestimmt in [37]) endliche Werte zeigt, noch bevor eine Spin-Lücke im System schließt, was eine Konsequenz der DM-Wechselwirkung ist.

Die magnetischen Anregungen von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ wurden auch mittels inelastischer Neutron-Streuung (INS) gemessen [48]. Die eben diskutierte Elektron-Spin-Resonanz und auch das weiter unten besprochene Raman-Streuexperiment können Anregungen im Material nur mit Impuls $\vec{Q} = (0, 0, 0)$ bestimmen. Das Verhalten der Anregungen bei endlichen Impulsen, wurde in [48] zum ersten Mal bestimmt. Aufgrund der Auswahlregeln der INS, können nur Anregungen mit $S = 1$ aufgelöst werden.

Es zeigen sich in Arbeit [48] drei $S = 1$ -Energielevel um die Energien 3 meV (35 K, 770 GHz, 52 T), 5 meV (58 K, 1280 GHz, 86.5 T) und 9 meV (104.5 K, 2301 GHz, 156 T), was konsistent ist zur ESR ([47]). Wir zeigen die veröffentlichten Dispersionen dieser drei Anregungen in Abbildung 1.6 im linken Bild. Die gemessene Bandbreite der niedrigsten Anregung (um 3 meV) ist fast dispersionslos und hat eine schmale Bandbreite von 0.2 meV. Die Autoren interpretieren diese Anregung als Triplet-Anregung, da die Temperaturabhängigkeit auf eine lückenbehaftete Anregung deutet. Da die Dispersion des Triplets (fast vollständig) flach ist, kommen die Autoren zu dem Schluss, dass die Dynamik der Anregungen sehr lokal ist, bzw. dass Hüpfprozesse der niedrigsten Anregung, stark unterdrückt sind, wobei die Frustration im System diese Lokalisierung verursacht. Eine weitere ungewöhnliche Beobachtung ist, dass das zweite Anregungslevel (um 5 meV), dass in dieser Arbeit als korrelierte zwei Triplet-Anregung interpretiert wird, einen deutlich dispersiveren Charakter hat. Die Interpretation der Mode als Zwei-Triplet-Mode wird von theoretischen Seite untermauert, aber der dispersive Charakter der Mode wird nicht bestätigt ([49]). In Arbeit [49] wird der Zwei-Triplet-Raum theoretisch untersucht und die Ergebnisse passen gut zum Experiment, allerdings liegen um 5 meV zwei Zwei-Triplet-Moden nah beieinander (bei 4.6 meV und 5.6 meV), die aber beide eine flache Dispersion haben, mit Bandbreiten von etwa 0.4 meV.

Mit Hilfe von Raman-Streuung (RS) können, aufgrund der Auswahlregeln dieses Verfahrens, nur Singulett-Anregungen $S = 0$ bei Impuls $\vec{Q} = 0$ aufgedeckt werden. Zusammen mit der INS, die $S=1$ -Moden (bei endlichem \vec{Q}) auflöst und der ESR ($S \neq 0$ -Moden), kann somit ein relativ vollständiges Bild der magnetischen Anregungen erworben werden. Das Verhalten des Raman-Spektrums kann in Abhängigkeit von der Temperatur gemessen werden [52]. Wir konzentrieren uns auf den Befund für kleine Temperaturen.

In diesem Temperaturbereich können die Autoren vier Singulett-Anregungen aufdecken mit den Energien $\Delta = 3.8$ meV (44 K, 969 GHz, 66 T), $\Delta = 5.8$ meV (67 K, 1475 GHz, 100 T), $\Delta = 7.1$ meV (82 K, 1805 GHz, 122 T) und $\Delta = 8.8$ meV (102 K, 2246 GHz, 152 T). Die erste Singulett-Anregung liegt energetisch unterhalb des Zwei-Triplet-Grenzwertes [49]. Die Autoren

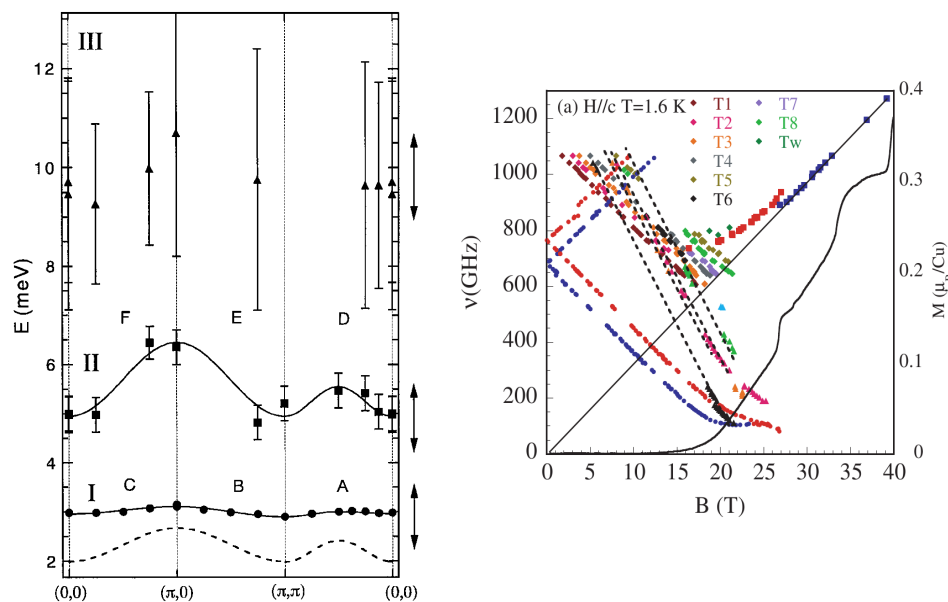


Abbildung 1.6: Die Dispersion der drei niedrigsten Anregungs-Level ($S = 1$), gemessen mittels INS (veröffentlicht in [48]) ist auf der linken Seite gezeigt. Konkret wird die Energie in Abhängigkeit von einem Weg in der Brillouin-Zone gezeigt. Dabei zeigen die Punkte die Messwerte und die durchgezogenen Linien sind Fits für das Auge. Die gestrichelte Linie entspricht der Dispersion der Theorie-Rechnung aus [50]. Im rechten Bild ist das ESR-Spektrum im externen Feld aus Arbeit [51] zu sehen. Es wird die Energie in Abhängigkeit von der Feldstärke gezeigt, für ein externes longitudinales Magnetfeld. Weiter ist die Magnetisierung aus Arbeit [37] eingetragen.

schätzen dann zusammen mit der Ein-Triplett-Energie, bekannt aus der ESR und INS, die obere Kante der Zwei-Teilchen-Energieskala ab. Die Abschätzung zeigt, dass der zweite Peak innerhalb der Energieskala für das Zwei-Teilchen-Kontinuum liegt. Die dritte und vierte Anregung liegen über diesem Grenzwert und sind Mehr-Teilchen-Singulett.

Der Singulett-Zustand des zweiten Peaks ist ein antgebundener Zwei-Teilchen-Zustand. Die Energieskala dieser Mode passt gut zu der theoretischen Rechnung [49], die diese Interpretation liefert. Die Autoren diskutieren nun die Peaks drei und vier und weisen auf die Schärfe der Peaks hin. Weiter untersuchen die Autoren das Temperaturverhalten der Peaks und können keinen phononischen Einfluss feststellen, so dass es sich bei den Peaks um magnetische lückenbehaftete Anregungen handeln muss, die aber (aufgrund der genannten Abschätzung) aus mehr als zwei Teilchen zusammengesetzt sein müssen. Die Autoren sehen hier einen Beweis für die Existenz von gebundenen Drei-Triplett-Zuständen, was durch Energieabschätzungen plausibel scheint. Es sei daran erinnert, dass im Grundzustand, aufgrund der Frustration, Quanten-Fluktuationen der Singulett nicht vorliegen. Weiter sei auf die lokale Natur der Triplett, belegt in der INS-Messung ([48]), hingewiesen. Die Autoren greifen diese Punkte auf und schlussfolgern aus ihren Abschätzungen, dass effektive, anziehende Triplett-Triplett-Wechselwirkungen vorliegen, die die Beobachtung der gebundenen Zwei- und Drei-Triplett-Moden erklären.

An dieser Stelle sei auf die theoretische Arbeit [49] hingewiesen. Die Autoren arbeiten mit einem effektiven Modell und können die Triplett-Triplett-Wechselwirkungen explizit bestimmen. Es zeigt sich in der Tat, dass im Singulett-Kanal attraktive Triplett-Triplett-Wechselwirkungen im

System vorliegen. Hier sei angemerkt, dass im magnetischen Zwei-Triplett-Kanal ($S_z = 2$) aber repulsive Wechselwirkungen vorliegen. Dennoch kann es in diesem Kanal zu Bindungseffekten durch sogenannte korrelierte Hüpfsterme kommen. Der genannte Mechanismus wird sich in der vorliegenden Arbeit als sehr relevant für das Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ im Magnetfeld herausstellen.

Eine erneute Untersuchung mittels ESR (diesmal bei höheren Magnetfeldern) bietet sich an, da die erste ESR-Arbeit [47] ein Schließen der Energielücke für Moden mit $S = 1$ und $S = 2$ in einem schmalen Bereich angedeutet hat [51]. Die Auflösung war aber nicht groß genug, um Klarheit in diesem schwer zu vermessenden Bereich zu schaffen. Mit der ESR-Methode gibt es keine Möglichkeit $S = 0$ -Anregungen aufzulösen. Die sehr hohe Auflösung dieser Messung erlaubt es den Autoren aber, eine indirekte Messung von Singulett zu ermöglichen. Im Magnetfeld verändern Singulett-Zustände ihre Energie nicht ($S_z = 0$), aber Zustände mit größerem Drehimpuls S und positivem S_z gewinnen an Energie (Zeeman-Aufspaltung). Durch die hohe Auflösung können die Autoren die Anti-Level-Crossings der Level verschiedener Quantenzahl S_z sehen, die aufgrund der DM-Wechselwirkung sichtbar werden. Somit kann das vollständige Anregungsspektrum bestimmt werden, da $S \neq 0$ -Moden direkt und $S = 0$ -Moden indirekt gemessen werden können.

Zuerst bestätigt die Arbeit [51] die wesentlichen Aussagen der vorherigen ESR-Messung [47]. Die Autoren finden im feldfreien Fall ein zweifach entartetes Triplett-Level als Anregung, das in [47] als Anregung niedrigster Energie gesehen wurde. Beiden Triplets haben im feldfreien Fall die Energien 700 GHz (2.74 meV, 31.8 K, 47.3 T) und 750 GHz (2.93 meV, 34 K, 50,7 T). Die Autoren können aber einen weiteren Triplett-Zustand mit $S = 1$ und $S_z = 0$ bei leicht kleineren Energien von etwa 650 GHz (2.54 meV, 29.5 K, 44 T) beobachten. Weiter bestätigen die Autoren die Vielzahl von Triplett- ($S = 1$) und Quintuplett- ($S = 2$)- und, über den Mechanismus des Anti-Level-Crossings, auch Singulett-Anregungen. Diese Anregungen liegen energetisch über den drei genannten Triplets. Dazu zeigen wir auf der rechten Seite von Bild 1.6 das veröffentlichte Spektrum im longitudinalen Magnetfeld, welches die verschiedenen Triplett- und Quintuplett-Anregungen zusammenfasst. Die Autoren weisen explizit auf Quintuplett-Lösungen hin, die sich nur als $S_z = 2$ -Bindungszustände interpretieren lassen, geformt aus einer Überlagerung von vier Spins $1/2$.

Die Autoren finden einen $S = 0$ -Bindungszustand als energetisch niedrigsten Zustand (Der Zustand bei etwa 650 GHz). Die Autoren spekulieren über die Relevanz dieses Zustandes, betrachtet man das Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells im feldfreien Fall. Wir merken hier nur an, dass das Modell durch Erhöhung des Kopplungsverhältnisses J'/J auf einen Phasenübergang zuläuft. Der niedrigliegende $S = 0$ -Zustand erlaubt die Spekulation, dass eine mögliche Kondensation dieses Bindungszustandes einen Grundzustand im System stabilisiert und damit der Mechanismus des Übergangs sein könnte. Es wird aber später klar werden, dass dieses Szenario nicht realisiert ist.

Interessanterweise schließt der niedrigste Zustand der Quintupletts mit $S_z = 2$ die Lücke noch vor dem Triplett-Zustand mit $S_z = 1$ (bei etwa 24 T). Neben der Triplett-Anregung, die bei

etwa 26 T schließt, sollten demnach auch die Bindungszustände zum Verständnis der Physik und speziell des Verhaltens im Magnetfeld wichtig sein.

Um das Verhalten der Anregungen von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ abzuschließen, betrachten wir die Anregungen des Materials mittels hochaufgelöster INS erneut [53]. Der Fokus liegt auf dem dynamischen Strukturfaktor der drei bekannten Triplet-Anregungen. Die Autoren finden die drei Anregungsenergien mit $S = 1$ um die Energien 3 meV, 5 meV und 9 meV wieder. Für die Anregungen um 5 meV und 9 meV wird eine andere Energie-Impuls-Abhängigkeit als in Quelle [48] gefunden.

Die Autoren betrachten das spektrale Gewicht der drei Anregungen als Funktion des Impulses und der Energie entlang der $(H, 0, L)$ -Ebene. Es ist zu erkennen, dass sich für einen Impuls $(H, 0, 0)$, immer ein Intensitätsmaximum bei einem charakteristischen Wert $(0, 0, L)$ ausbildet. Für die Ein-Triplett-Anregung findet sich das Maximum der Intensität bei zwei halbzahligen Verhältnissen ($H/L = 1.5$ und $H/L = 2.5$). Für die Zwei- und Drei-Triplett-Anregung liegt dieses Verhältnis genau bei zwei bzw. drei. Die Autoren schließen daraus, dass die Formfaktoren aller drei Anregungen unterschiedlich sein müssen. Dies ist ein weiterer Hinweis darauf, dass es sich bei den Anregungen um ein Triplet, einen Zwei-Triplett-Bindungszustand und einen Drei-Triplett-Bindungszustand handelt. Weiter können die Autoren in der Ein-Triplett-Messung eine Aufspaltung in drei Triplet-Moden im dynamischen Strukturfaktor identifizieren. Diese Aufspaltung lässt sich durch die DM-Wechselwirkungen erklären und kann in dieser Messung, aufgrund der hohen Auflösung, für die gesamte Dispersion gut nachgewiesen werden. Hier sehen wir, wie schon zuvor angesprochen, ein Beispiel dafür, dass die DM-Wechselwirkung, trotz ihrer kleinen Amplitude, die Physik beeinflussen kann. Aufgrund der Frustration hat die DM-Wechselwirkung einen spürbaren Einfluss auf die Dynamik der Anregungen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sich im Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ verschiedene lückenbehaftete Anregungen finden lassen. Die Triplet-Lücke ist aufgrund von DM-Wechselwirkungen leicht in drei Moden aufgespalten und alle drei Moden zeigen eine sehr schwache Dispersion, was für eine sehr lokale Natur dieser Anregungen spricht. Kurz unterhalb der tiefsten Triplet-Lücke liegt ein $S = 0$ -Bindungszustand aus zwei Triplets. Weiter zeigen sich mehrere Hinweise darauf, dass ein $S_z = 2$ -Quintuplett-Zustand die Energielücke noch vor den tiefsten Triplets schließt, wenn ein endliches Magnetfeld angeschaltet wird. Die Zwei-Triplett-Bindungszustände zeigen im Vergleich eine größere Dispersion. Wie bereits bei der Anwendung einiger Messverfahren ausgenutzt, gewinnen die Anregungen mit positivem S_z in einem Magnetfeld an Energie. Ist das Magnetfeld hinreichend stark, so erwarten wir, dass eine endliche Dichte von Triplet-Anregungen oder gebundenen Zuständen in den Grundzustand induziert wird. Somit liegt eine endliche Magnetisierung im System vor. Wir leiten nun zum Verhalten der Magnetisierung im nächsten Unterkapitel über, die eine spannende Physik erwarten lässt, da $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ sehr ungewöhnliche magnetische Anregungen besitzt. Die Physik der Anregungen wird uns auf stark korrelierte Systeme für ein endliches Magnetfeld führen. Es ist der Hauptfokus dieser Arbeit, die neue Physik von stark korrelierten, frustrierten Magneten bei endlichem Magnetfeld aufzudecken.

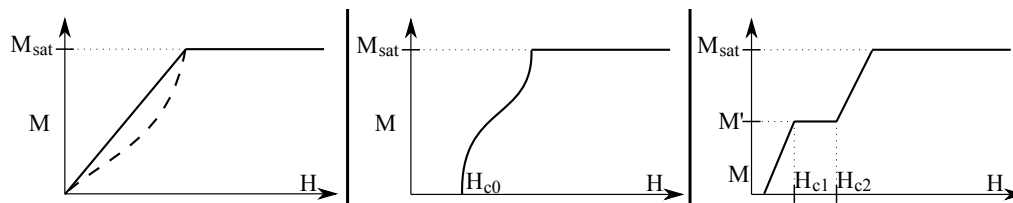


Abbildung 1.7: Schematisches Verhalten verschiedener Magnetisierungskurven bis zur Sättigung M_{sat} . Links ist das typische Verhalten eines klassischen (durchgezogene Linie) und quantenmechanischen (gestrichelte Linie) Heisenberg-Modells auf dem Quadratgitter gezeigt. In der Mitte ist das schematische Verhalten einer Spin-Leiter dargestellt und im rechten Bild ist ein Schema einer Magnetisierungskurve mit Magnetisierungsplateau gezeigt, wobei das Plateau die Magnetisierung M' hat und im Feldbereich von H_{c1} bis H_{c2} stabil ist.

1.3 $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ im Magnetfeld

In diesem Kapitel soll das Verhalten des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ im externen Magnetfeld beschrieben werden. Um die Besonderheiten herauszustellen, geben wir einen kurzen Überblick über “typische” Magnetisierungskurven (die folgenden Argumente finden sich auch im Buch [2]). Dazu zeigen wir in Bild 1.7, im linken und mittleren Teil, zwei schematische Magnetisierungskurven, wobei das linke Bild ein Schema der Magnetisierungskurve für ein antiferromagnetisches Heisenberg-Modell auf dem Quadratgitter darstellt, was ein Beispiel für ein zweidimensionales unfrustriertes Spin-Modell ist. Der mittlere Teil von Abbildung 1.7 zeigt ein Schema für eine Spin-Leiter mit antiferromagnetischer Heisenberg-Wechselwirkung (ein eindimensionales unfrustriertes Modell). Beide Magnetisierungskurven haben gemeinsam, dass sie stetig und stetig differenzierbar zwischen dem Beginn der Magnetisierungskurve und der vollständigen Sättigung M_{sat} verlaufen. Wir werden dieses Verhalten im Folgenden immer als kontinuierliches Verhalten bezeichnen. Die (Raum)-Dimension des zugrundeliegenden Modells und Gitters bestimmt, ob die Magnetisierung linear (für das zweidimensionale Quadratgitter) oder mit einem Wurzelverhalten (für eine eindimensionale Spin-Leiter) verläuft.

Die dargestellten Kurven lassen sich effektiv physikalisch als Kondensation von Bosonen in einem System verstehen. Für das Quadrat-Gitter kondensieren Spin-Wellen und die Spin-Leiter ist ein Beispiel für ein System, in dem lückenbehaftete Triplet-Anregungen kondensieren. Typischerweise sind die Anregungen lückenbehafteter Spin-Systeme (Hardcore)-Bosonen. Für die Spin-Leiter sei angemerkt, dass keine Kondensation im eigentlichen Sinne vorliegt, da eine Kondensation nach Mermin-Wagner aufgrund der Dimension nicht stattfinden darf. Die Zustände im endlichen Magnetfeld sind adiabatisch zum Grundzustand verknüpft. Wir merken an, dass die Triplet-Anregung im Shastry-Sutherland-Modell ein weiteres Beispiel für eine hardcore-bosonische Anregung eines lückenbehafteten Spin-Systems ist. Die Dichte der Bosonen wird durch das externe Feld kontrolliert, dass wie ein chemisches Potenzial für die Teilchen-Anregung wirkt. Eine Erhöhung des externen Feldes führt zu der Kondensation der bosonischen Anregungen im System, wobei sich die typischen Kurven der Abbildung 1.7 zeigen. Da die Bosonen in unfrustrierten Systemen schwach wechselwirken, bildet sich eine lückenlose Supraflüssigkeit, so dass die Magnetisierung kontinuierlich ansteigt.

Die durchgezogene Magnetisierungskurve des Heisenberg-Modells auf dem Quadratgitter (im linken Bild von Abbildung 1.7) stellt das Ergebnis einer klassischen Behandlung des Problems dar. Quanten-Fluktuationen modifizieren das Bild der (exakten) Geraden, aber der typische kontinuierliche Verlauf wird nicht fundamental geändert. Wir haben dies für das Quadratgitter als gestrichelte Linie in Abbildung 1.7 dargestellt. Dabei ist die gestrichelte Linie als Karikatur zu verstehen. Typischerweise ist die Krümmung aufgrund der Quantenfluktuation schwach und ein nahezu lineares Verhalten bestimmt die Magnetisierungskurve für den zweidimensionalen Fall. Befindet sich eine Spin-Lücke im System bei einem Grundzustand mit $S = 0$, wie beispielsweise in einer Spin-Leiter, so beginnt die Magnetisierung erst ab einem endlichen externen Feld H_{c0} . Das externe Feld muss die Anregungslücke schließen, damit sich das System mit magnetischen Anregungen füllt, die zur endlichen Magnetisierung beitragen.

Wir gehen nun auf die Messungen des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ im Magnetfeld ein, die sich dadurch auszeichnen, dass sich in diesem magnetischen System Magnetisierungsplateaus ausbilden. Als Magnetisierungsplateau versteht man einen Feldbereich, zwischen zwei Feldern H_{c1} und H_{c2} (dargestellt rechts in Bild 1.7), in dem die Magnetisierung einen konstanten (rationalen) Wert hat. Wie angesprochen ist $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ das erste Material, bei dem sich nachweislich mehrere Magnetisierungsplateaus in der Magnetisierungskurve zeigen.

Wir klären nun, welche Magnetisierungsplateaus im Experiment konkret gefunden werden und beleuchten die Historie dieser Magnetisierungskurve. Im weiteren kommen wir auch auf experimentelle Ergebnisse zur Struktur der Plateaus zu sprechen.

Die erste Veröffentlichung über $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ hat speziell wegen des Fundes von Magnetisierungsplateaus die weitere Forschung an diesem Material angestoßen [37]. Wir zeigen die veröffentlichte Magnetisierungskurve in Bild 1.8 auf der linken Seite, wobei die maximale externe Feldstärke 50 T ist. Speziell im unteren Bild (für Temperatur $T = 0.5$ K) erkennen wir gut ein ungewöhnliches Verhalten. Wir sehen zwei eingezeichnete Geraden, gleicher Steigung, in denen die Autoren die typische lineare Steigung sehen. Dabei fällt auf, dass die Geraden aber nur in einem mit $H_{c1} = 20.9$ T und $H_{c2} = 27.9$ T (bzw. $H_{c3} = 29.8$ T und $H_{c4} = 37.0$ T) abgegrenzten Bereich auf der gemessenen Magnetisierung liegen [37]. Zwischen H_{c2} und H_{c3} , unterhalb von H_{c1} und oberhalb von H_{c4} ist das typische Verhalten eindeutig nicht gegeben und es wirkt, als würde die lineare Steigung der Magnetisierung auf einen anderen Bereich wechseln, der ebenfalls eine lineare (aber andere) Steigung aufweist. Der Bereich vor $H_{c1} \approx 21$ T fällt hier besonders auf, da das Verhalten quadratisch statt linear wirkt. Die Autoren finden sichtbare Anomalien, die sich nur als Magnetisierungsplateaus interpretieren lassen. Mit steigender Temperatur verschwinden diese Anomalien. Die Anomalie zwischen H_{c2} und H_{c3} ist ein Plateau der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$, wobei M_{sat} die magnetische Saturierung des Materials ist, die erreicht wird, wenn jeder Spin in Feldrichtung ausgerichtet ist. Zwischen H_{c4} und der Feldstärke H_{c5} , die aus der Magnetisierungskurve für $T = 1.7$ K bestimmt wurde, befindet sich ein $1/4M_{\text{sat}}$ -Plateau. Wir hatten bereits Modifikationen des erwarteten Verhaltens aufgrund von DM-Wechselwirkung kennengelernt (für den Grundzustand und die Anregungen). Die Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung bricht Gittersymmetrien im System explizit und bewirkt, dass die Quantenzahl S_z nicht erhalten ist.

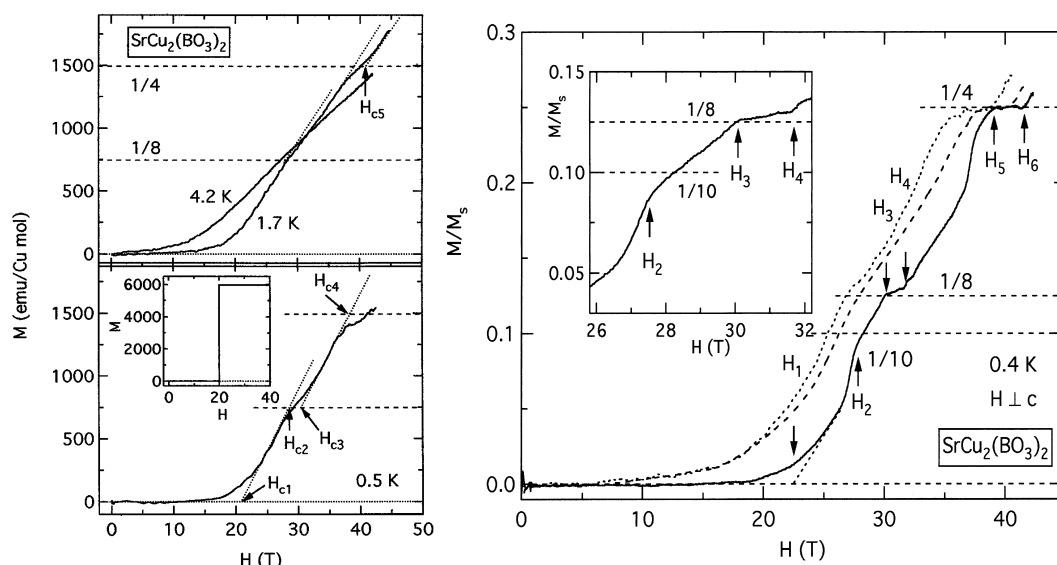


Abbildung 1.8: Die ersten veröffentlichten Magnetisierungskurven einer polykristallinen $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ -Probe in einem externen Magnetfeld [37]. Die (transversale) Magnetisierung im linken Bild wurde mit einer Induktionsmethode bei den Temperaturen $T = 4.2\text{ K}, 1.7\text{ K}$ und 0.5 K bestimmt, die einen gepulsten Draht-Spulen-Magneten als externes Magnetfeld nutzt, mit einer Pulsdauer von 20 ms [37]. Dabei ist das Magnetfeld in c -Richtung ($H \parallel c$) orientiert. Im Inset des linken unteren Bildes ist eine theoretische Vorhersage für den Beginn der Magnetisierungskurve zu sehen, bestimmt aus der Magnetisierung für ein Modell isolierter Dimere bei $T = 0$. Die Magnetisierungskurve im rechten Bild wurde von derselben Arbeitsgruppe mit denselben Methoden bestimmt, bei der Temperatur 0.4 K [40]. Hier wurde die Qualität der polykristallinen $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ -Probe gesteigert. Die durchgezogene Linie im rechten Bild zeigt die (transversale) Magnetisierung der Probe, wenn die Proben senkrecht zur c -Richtung ($H \perp c$) orientiert ist. Die parallele und senkrechte Magnetisierung für eine Probe, die in Feldrichtung ($H \parallel c$) ausgerichtet ist, ist in gestrichelten und gepunkteten Kurven gezeigt. Der Inset des rechten Bildes zeigt einen vergrößerten Ausschnitt aus der Magnetisierungskurve.

Deshalb ist die Magnetisierung in einem Plateau nicht konstant, sondern zeigt das angesprochene, linear wirkende Verhalten. Des Weiteren sorgt die Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung für zusätzliche Dynamik im System. Die zusätzliche Dynamik von (fast freien) Anregungen für kleine Felder bewirkt den (nichtlinearen) Anstieg der Magnetisierung, der vor dem Beginn des linearen Bereiches, gekennzeichnet durch H_{c1} , eintritt.

Die longitudinale und erneut die transversale Magnetisierung sind in [40] gemessen worden. Die erneute Betrachtung der transversalen Magnetisierung ist durch eine verbesserte Probe motiviert. Wir zeigen die Ergebnisse der Magnetisierung von [40] in Bild 1.8 auf der rechten Seite. Dabei zeigen die Messungen in senkrechte und parallele c -Richtung ein qualitativ gleiches Verhalten, aber die Skalen der Kurven sind verschieden. Dies ist in einer Anisotropie des gyromagnetischen Faktors g , kurz g -Faktor, begründet. Der g -Faktor ist ein Proportionalitäts-Faktor in der Magnetisierung (allgemein gilt $M = g \mu_{\text{Bohr}} H$) und muss aufgrund der Quanten-Natur der Spins berücksichtigt werden. Die verschiedenen Magnetisierungskurven für die Messungen $H \perp c$ (g_{\perp}) und $H \parallel c$ (g_{\parallel}) begründen sich im g -Faktor, der wie eine Streckung bzw. Stauchung der Magnetisierungskurven zu verstehen ist. Normiert man die Magnetisierungskurven um den g -Faktor, so liegen die Kurven (fast) übereinander.

Der kleine Unterschied zwischen der longitudinalen und transversalen Magnetisierung für die $H \parallel c$ -Messung liegt an der Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung, die nur einen Beitrag in der xy -Ebene hat [42]. Unabhängig von den angesprochenen Unterschieden, können die Autoren die Plateaus der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$ und $1/4M_{\text{sat}}$ in allen gezeigten Magnetfeldrichtungen wiederfinden, was die Interpretation der Befunde als Plateaus deutlich untermauert.

In der transversalen Magnetisierungskurve aus [37] liegen neben den Magnetisierungsplateaus noch Bereiche mit einem linearen Anstieg der Magnetisierungskurve vor, die im Feldbereich vor dem $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau und im Feldbereich zwischen dem $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau und $1/4M_{\text{sat}}$ -Plateau liegen. Das lineare Verhalten lässt zunächst auf eine kontinuierliche Phase schließen, in der die Autoren schwache Korrelationen vermuten [37]. Die genannten Bereiche mit linearem Anstieg verlaufen nun aber in der longitudinalen Magnetisierung deutlich komplexer. Die Autoren finden, dass sich vor dem Übergang in ein Plateau, ein Bereich zeigt, in dem die Magnetisierung stärker ansteigt. Dieser Anstieg hat aber weiterhin eine lineare Form. Geht das System dann in ein Plateau über, so verläuft die Magnetisierung kurz vorher sehr flach und die Magnetisierung verläuft in einem Bogen in das Plateau. Die Bogenform des Verlaufs der Magnetisierungskurve ist durch Anisotropien im System begründet. Aufgrund von DM-Wechselwirkungen kann der Übergang in ein Plateau nicht erster Ordnung sein und muss damit in einer kontinuierlichen (stetig differenzierbaren) Kurve verlaufen. Auf die linearen Bereiche mit größerer Steigung kommen wir später noch zu sprechen. Diese linearen Bereiche stellen ein spannendes neues Merkmal der Magnetisierungskurve dar. Die Autoren sehen weiter die Möglichkeit, dass es sich bei dem linearen Anstieg mit größerer Steigung (vor dem $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau), um Hinweise auf ein Plateau der Magnetisierung $1/10M_{\text{sat}}$ handelt. Dabei ist die Interpretation der Hinweise auf ein $1/10M_{\text{sat}}$ -Plateau von Ideen der theoretischen Arbeiten [54] motiviert, aber ein Plateau dieser Magnetisierung wird sich in späteren Messungen nicht stabilisieren.

Wie angesprochen, wurde die Untersuchung der Magnetisierungskurve weiter fortgesetzt [55], aufgrund einer Verbesserung in der Qualität der Probe und durch die Möglichkeit, die Magnetisierung zu noch höheren magnetischen Feldern zu messen. Die Probe in dieser Arbeit ist diesmal ein Ein-Kristall. Dieser wurde aus einer Mehrzahl von Polykristallen gefertigt, die sonst für die Messungen genutzt wurden.

Wir zeigen die Ergebnisse in Bild 1.9 auf der linken Seite. Dieses Experiment kann Feldstärken bis etwa 60 T erzeugen. Mit diesen Feldstärken decken die Autoren wieder die Plateaus der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$ und $1/4M_{\text{sat}}$ auf und bestimmen die Feldstärke, ab der das System ein Plateau der Magnetisierung $1/3M_{\text{sat}}$ stabilisiert. Außerdem erhält man zusätzliche Einblicke in das System, da neben dem Anfang des $1/3M_{\text{sat}}$ -Plateaus auch das Verhalten am Ende der $1/4M_{\text{sat}}$ -Magnetisierung genauer bestimmt wird.

Die transversale und longitudinale Magnetisierung liegen auf einer (leicht) anderen magnetischen Skala. Dies haben wir bereits im rechten Teil von Bild 1.8 gesehen, das die Ergebnisse aus Referenz [40] zeigt. In dieser Arbeit wurden die beiden Magnetisierungskurven übereinander gelegt, nachdem durch die verschiedenen g -Faktoren dividiert wurde ($g_{\parallel} = 2.28, g_{\perp} = 2.05$). Es

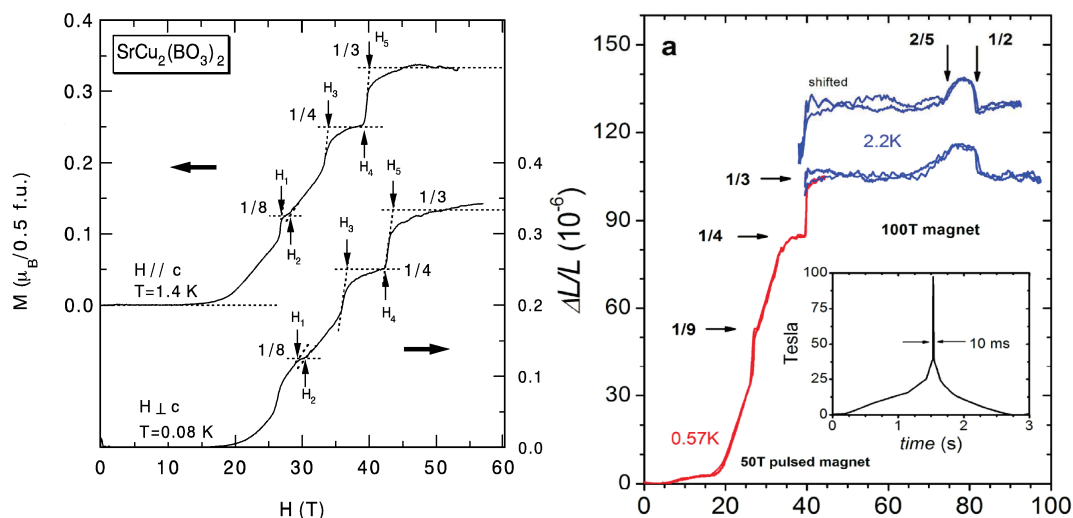


Abbildung 1.9: Im linken Bild ist die Magnetisierungskurve aus Arbeit [55] zu sehen, aufgenommen für $T = 0.08$ K. Es werden die transversale Magnetisierungskurve für eine Orientierung des Kristalls entlang der Feldrichtung ($H \parallel c$) (obere Kurve) und die longitudinale Magnetisierungskurve für eine senkrechte Orientierung des Kristalls zur Feldrichtung ($H \perp c$) (untere Kurve), gezeigt. Im rechten Bild ist die Magnetisierungskurve aus Arbeit [56] gezeigt, gemessen mittels Magnetokalorik und Magnetostriktion in einem gepulsten Magnetfeld. Dabei wird die transversale Magnetisierung für die Kristallorientierung $H \parallel c$ bestimmt. In der Abbildung werden Aufnahmen von 0 T bis 40 T bei einer Temperatur von $T = 0.57$ K kombiniert mit einer Messung eines starken gepulsten Magneten, der eine Feldstärke von 100 T erreichen kann, bei $T = 2.2$ T. Der Verlauf des gepulsten Feldes ist im Inset des rechten Bildes gezeigt.

findet sich dann eine gute Übereinstimmung der beiden Magnetisierungskurven. Die Magnetisierungskurven für die senkrechte und parallele Orientierung des Kristalls weichen aber unterhalb einer Feldstärke von 30 T recht deutlich voneinander ab. Weiter zeigt der Feldbereich vor dem $1/3M_{\text{sat}}$ -Plateaus schwache, aber erkennbare Abweichungen.

Darüber hinaus hat sich das Bild des ungewöhnlichen Krümmungsverhaltens erweitert. Das Magnetisierungsverhalten vor und nach den Plateaus der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$ und $1/4M_{\text{sat}}$ ist durch Geraden gleicher Steigung gegeben, was ganz analog zum Plateauverhalten aus Bild 1.7 ist. Interessant ist nun, dass es in der Magnetisierung einen Knick zwischen den Plateaus zu geben scheint, in dem die lineare Steigung der Magnetisierungskurve wechselt. Weiterhin gilt, dass der Bereich unterhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ nur teilweise linear verläuft. Die DM-Wechselwirkung scheint dafür zu Sorgen, dass die nicht-Differenzierbarkeit, erwartet aus den Erklärungen zu Bild 1.7, nicht eintritt. Statt eines Knicks geht die Magnetisierung mit einem kontinuierlichen Verhalten zum Plateau über. Das Ende der beiden Plateaus zeigt den erwarteten Knick.

Wir haben uns nun ausführlich mit den (frühen) Arbeiten beschäftigt, die keinen Zweifel an der Stabilisierung von Magnetisierungsplateaus der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$, $1/4M_{\text{sat}}$ und $1/3M_{\text{sat}}$ lassen. Die wesentlichen Eigenschaften im Feld schließen darauf, dass eine $SU(2)$ invariante Beschreibung der Magnetisierung plausibel ist, da die Magnetisierungskurven (fast) identisch sind, orientiert man die c -Achse des Kristalls parallel oder senkrecht zum angelegten Magnetfeld. Die Merkmale der Magnetisierungskurve weisen aber auf einen Einfluss der DM-Wechselwirkung hin, obwohl die Amplitude dieser Wechselwirkung klein ist [42]. Der Einfluss wird besonders

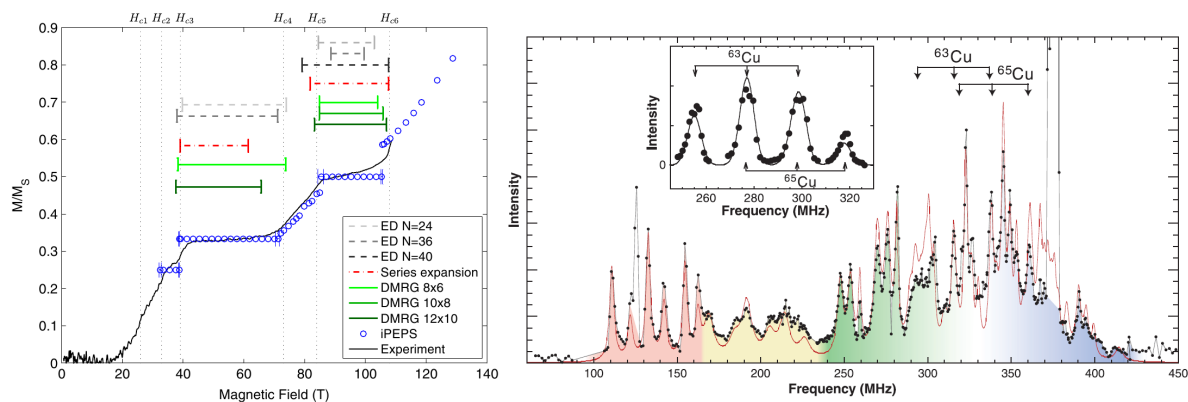


Abbildung 1.10: Im linken Bild ist die Magnetisierungskurve unserer Veröffentlichung zu sehen ([57]), aufgenommen für eine Temperatur 2.1 K. Hier wurde die transversale Magnetisierung (durchgezogene Linie) in einem sehr starken gepulsten Feld bestimmt (Details zum Messverfahren, siehe Anhang-Material [58]), das parallel zur c -Achse des Ein-Kristalls liegt. Die Punkte stammen aus einer Rechnung, basierend auf variationellen Tensor-Netzwerken und die Balken zeigen die Breite der Plateaus, berechnet mit verschiedenen numerischen Methoden und auf Grundlage des Shastry-Sutherland-Modells. Die punkt-gestrichelten Linien stammen aus Reihenentwicklungen zu hoher Ordnung, die wir berechnet haben. Die Reihenentwicklung wurde mittels Takahashi-Störungstheorie (für Ein-Teilchen-Prozesse) und dem Löwdin-Formalismus (für die Grundzustandseigenschaften) bestimmt. Wir gehen in Kapitel 6 dieser Arbeit genauer auf die Methoden und Ergebnisse ein. Das rechte Bild zeigt zwei Kupfer-NMR-Spektren, veröffentlicht in Arbeit [39]. Das gezeigte Spektrum wurde aufgenommen mit einem am Material anliegenden externen Feld, welches das $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau stabilisiert. Das Spektrum zeigt das magnetische Verhalten innerhalb der Anomalie, die als $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau interpretiert wird. Zum Vergleich zeigen die Autoren aus [39] das Spektrum, im Feldbereich kurz vor der Anomalie im Inset.

deutlich an den Kanten der Plateaus. In der Magnetisierungskurve äußert sich ein Übergang erster Ordnung in einem Knick, der sich an den Phasengrenzen der Plateau-Phasen zeigt (siehe rechte Abbildung in Bild 1.7). Die DM-Wechselwirkung erweitert dieses Verhalten dazu, dass der Übergang zum Plateau kontinuierlich verläuft.

Wir betrachten nun noch die Magnetisierungskurven der zwei aktuellsten Arbeiten [56] [57]. Diese Arbeiten zeigen weitere interessante Merkmale der Magnetisierungskurve von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ und vervollständigen das aktuelle Bild der Magnetisierung. Die Magnetisierung ist in [56] mit Hilfe des magnetokalorischen Effekts und der Magnetostraktion in einem gepulsten Magnetfeld gemessen (siehe das rechte Bild in Abbildung 1.9). Die Autoren nutzen zwei verschiedene Methoden, ein gepulstes Magnetfeld zu erzeugen (siehe Verlauf des Feldes im Inset, rechts in Bild 1.9). Die erste Methode erzeugt ein Feld bis zu 50 T (rot) und das zweite Feld wird genutzt, um die Magnetisierung zwischen 50 T bis etwa 100 T (blau) zu bestimmen. Für mittlere Magnetisierungen stimmen die Ergebnisse in der Stabilisierung von Plateaus der Magnetisierung $1/4M_{\text{sat}}$ und $1/3M_{\text{sat}}$ mit den anderen Arbeiten überein. Die Autoren finden zusätzlich ein Plateau der Magnetisierung $1/9M_{\text{sat}}$ für niedrige Magnetisierungen, aber kein Plateau der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$. Im hohen Magnetisierungsbereich zwischen den Feldstärken 74 T bis 85 T, sehen die Autoren die volle Breite eines Plateaus der Magnetisierung $2/5M_{\text{sat}}$. Weiter finden die Autoren

den Anfang eines $1/2M_{\text{sat}}$ -Plateaus, im Anschluß an das $2/5M_{\text{sat}}$ -Plateau bei etwa 85 T. Wir merken an, dass dieses Resultat für die Magnetisierungskurve im Allgemeinen kritisch gesehen wird, da zuvor etablierte Eigenschaften (wie ein Plateau der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$) nicht gefunden werden [57].

In Arbeit [57] wurde das Verhalten der Magnetisierung von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ für sehr hohe Magnetfelder bis 118 T gemessen [57] (siehe das linke Bild in Abbildung 1.10). Durch das hohe Magnetfeld wird zum ersten Mal auch die Messung der vollen Breite des $1/2M_{\text{sat}}$ -Plateaus möglich. Die Hauptmotivation für eine erneute Messung der Magnetisierungskurve ist die präzise Bestimmung der Plateau-Breiten für Magnetisierung $1/3M_{\text{sat}}$ und $1/2M_{\text{sat}}$. Betrachten wir die konkreten Zahlenwerte aus Arbeit [57], so liegt der Stabilisierungsbereich des $1/3M_{\text{sat}}$ -Plateaus zwischen 39 T und 73 T und die Breite des $1/2M_{\text{sat}}$ -Plateaus beträgt 84 T bis 108 T. Dabei wird kein $2/5M_{\text{sat}}$ -Plateau zwischen dem $1/3M_{\text{sat}}$ -Plateau und dem $1/2M_{\text{sat}}$ -Plateau gefunden. Auf die theoretischen Rechnungen, die ebenfalls im Bild eingetragen sind, gehen wir in Kapitel 6 genauer ein.

Fassen wir die Betrachtung der Magnetisierungskurven zusammen, so gibt es einen allgemeinen Konsens darüber, dass Plateaus der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$, $1/4M_{\text{sat}}$, $1/3M_{\text{sat}}$ und $1/2M_{\text{sat}}$ in der Magnetisierungskurve von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ auftreten. Dieser (vorläufige) Satz an Magnetisierungsplateaus des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ist direkt aus den präsentierten Magnetisierungsmessungen hervorgegangen. In Messungen der Magnetisierungskurve können allerdings keine Aussagen über die mikroskopischen Strukturen getroffen werden. Um ein besseres Verständnis der Physik zu entwickeln, ist die mikroskopische Struktur essentiell.

Wir beschäftigen uns zuerst mit der mikroskopischen Struktur des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus, die in [39] sehr genau studiert wurde. Motiviert ist die Betrachtung des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus zuerst dadurch, dass die nötigen Feldstärken in einer Größenordnung liegen, die keinen zu großen technischen Aufwand erfordern. Weiter ist die Untersuchung auch dadurch motiviert, da seinerzeit verschiedene (theoretische) Vorschläge für die Struktur des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus vorlagen. Die experimentelle Bestimmung der $1/8M_{\text{sat}}$ -Struktur sollte die Frage nach der Struktur des Plateaus im Material klären.

Die eben genannte Struktur-Analyse [39] des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus wurde durch Kupfer- und Bor-NMR-Experimente bestimmt. Wir erinnern an dieser Stelle an das Bild der lokalisierten Triplet-Anregungen. In einem Plateau mit Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$ ist im Mittel jeder achte Dimer mit einer Triplet-Anregung besetzt. Wir nehmen vorweg (siehe Kapitel 1.5), dass die Einheitszelle des Shastry-Sutherland-Modells aus vier Spin-Plätzen bzw. zwei Dimer-Plätze besteht. Da aber nun jeder achte Dimer-Platz mit einem Triplet belegt ist, muss sich eine Struktur ausbilden, die aus drei leeren Einheitszellen und einer halb gefüllten Einheitszelle besteht. Eine solche (übergeordnete) Struktur bricht die Translationssymmetrie des Systems und in diesem Fall spricht man auch von einer (magnetischen) Super-Struktur, die kommensurabel ist. Kommensurabel bedeutet, dass die Super-Struktur als Einheitszelle des Systems zu verstehen ist, die die kristallographisch äquivalenten Plätze mit einem Triplet kennzeichnet. Dabei ist das

Bild der lokalisierten Triplets sehr vereinfacht, denn das Triplet polarisiert die umgebenden Singulets. In solch einer kommensurablen magnetischen Super-Struktur erwartet man, dass die (sechzehn) Kupfer-Spins einer Super-Struktur unterschiedlich magnetisiert sind. In einer NMR-Messung zeigt sich der magnetische Unterschied der verschiedenen Kupfer-Atome der Struktur dann explizit an den unterschiedlichen Hyperfein-Feldstärken der Kupfer-Atome, die an deutlichen Peaks bei zusätzlichen Frequenzen gesehen werden.

In Arbeit [39] wurde das Hyperfein-Spektrum für ein externes Feld der Feldstärke $H = 26$ T und der Feldstärke $H = 27.5$ T bestimmt. Wir zeigen das NMR-Spektrum im rechten Teil von Bild 1.10. Der Inset zeigt das Spektrum für $H = 26$ T. Dieser Wert wurde gewählt, um das typische Verhalten der magnetischen Struktur zu zeigen, der zum beschriebenen linearen Anteil der Magnetisierung gehört (siehe rechter Teil von Bild 1.7). Ein einfaches Kupfer-Atom zeigt ein Hyperfeinfeld für sechs Frequenzen, was sich in sechs Spektrallinien in einem NMR-Spektrum zeigen sollte. Diese Frequenzen sind im Inset eingetragen und das Spektrum des Insets zeigt Peaks bei den vermuteten Frequenzen. Das spricht für typisches uniformes Verhalten bei $H = 26$ T, da das NMR-Spektrum nur aus den Spektrallinien des (freien) Kupfers besteht.

Erhöhen die Autoren nun das Magnetfeld auf $H = 27.5$ T, so erreichen sie den Bereich, den Kageyama et al. als $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau bestimmt haben. Man erkennt eine drastische Veränderung des NMR-Spektrums (siehe rechte Bild in Abbildung 1.10). Die große Anzahl an Peaks lässt sich nur mit einer Super-Struktur erklären. Dabei kommen die Autoren zu dem Schluss, dass die Struktur 16 Spins enthalten muss. Dies entspricht einer Struktur mit acht Dimeren. Das Spektrum lässt sich mit Lorenz-Funktionen fitten und die Autoren brauchen mindestens 11 solcher Funktionen, um einem zufriedenstellenden Fit zu erhalten, was für 11 verschiedene Magnetisierungen innerhalb der 16 Spins spricht. Die Peaks mit dem höchsten Gewicht sind bei den bekannten Frequenzen lokalisiert (siehe die Pfeile im Bild). Ein Vergleich der Amplituden der (reinen) Kupferfrequenzen bei $H = 26$ T und $H = 27.5$ T (Pfeile im Hauptbild und im Inset) führt zur Annahme, dass die Super-Struktur aus einem effektiven Teilchen besteht, einem Triplon. Die Interpretation der Autoren geht davon aus, dass sich an jedem achten Platz ein Triplet befindet. Jedes Triplet polarisiert die umgebenden Spins (die zusätzlichen Peaks im Spektrum) und das Triplet, zusammen mit der Polarisationswolke die es umgibt, wird als Triplon bezeichnet [59].

Die Messung bestätigt also exakt die zuvor erwartete Physik. Weiter merken wir an, dass die Einheitszelle der Super-Struktur die Vektoren $\vec{a}_1 = (-2a, 2a)^T$ und $\vec{a}_2 = (3a, 1a)^T$ zeigt. Wir erinnern daran, dass die Vektoren der Super-Struktur die kristallographisch äquivalenten Dimer-Plätze angeben, wobei a der Dimer-Dimer-Abstand im Material ist. Die Super-Struktur mit diesen Vektoren wurde in theoretischen Arbeiten bereits vorgeschlagen, so dass sich die Bezeichnung tilted- $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau etabliert hat. Dabei ist das tilted- $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau einer der Vorschläge, die Eingangs erwähnt wurden. Der Konkurrent der tilted-Super-Struktur (mit den Vektoren $\vec{a}_1 = (-2a, 2a)^T$ und $\vec{a}_2 = (3a, 1a)^T$) ist das sog. Diamant- $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau, das die Vektoren $\vec{a}_1 = (-2a, 2a)^T$ und $\vec{a}_2 = (2a, 2a)^T$ hat. Die theoretischen Rechnungen, die in [39] durchgeführt

wurden, bringen die Autoren auf das tilted- $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau, denn die Merkmale des experimentellen Spektrums können mit der tilted-Super-Struktur reproduziert werden. Wir gehen später noch auf weitere Arbeiten der Autoren von [39] ein, in denen aber das Diamant- $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau zur Erklärung von Experimenten favorisiert wird.

Wir befassen uns nun mit den mikroskopischen Resultaten, erhöht man das Magnetfeld weiter und erreicht Feldstärken, die auf Magnetisierungen führen, (kurz) oberhalb von $1/8M_{\text{sat}}$. Dieser Bereich wurde mittels Drehmoment-Messungen im Magnetfeld untersucht [60]. Die Autoren finden zwei weitere Anomalien kurz nach dem $1/8$ -Plateau, bei Feldstärken von etwa 28.5 T und 29.5 T, die nahezu temperaturunabhängig sind. Die zweite Ableitung der Drehmoment-Messung zeigt ein Verhalten, wie es auch Magnetisierungsplateaus zeigen, aber die exakte Lage der Anomalien unterliegt Hysterese, was bei Plateaus nicht zu erwarten ist. Weiter können die Autoren in der Literatur keinen Vorschlag für ein Plateau finden, das den gemessenen Werten entspricht und die Autoren sehen keine Korrespondenz des Befundes zu einem Plateau mit einem einfachen rationalen Verhältnis. Die Autoren gehen daher davon aus, dass der Befund für Plateaus spricht mit sehr großen, komplexen Super-Strukturen.

Die Autoren bringen weiter einen möglichen Suprakristall zur Sprache. Dabei handelt es sich um eine Phase, die die diskrete Translationssymmetrie und die kontinuierliche $U(1)$ -Symmetrie gleichzeitig bricht. Die Autoren sehen einen starken Einfluss der DM-Wechselwirkung auf das Drehmoment, der eine deutliche Abweichung von transversaler Magnetisierung und Drehmoment-Messung entlang der c -Richtung, zeigt. Die Autoren können die DM-Wechselwirkung ausnutzen, um zu zeigen, dass in den Anomalien ein Symmetriebruch vorliegen muss. Weiter weisen die Autoren darauf hin, dass die DM-Wechselwirkung eine Bose-Kondensation von Anregungen nicht erlaubt. Daher kann es sich bei den Phasen über dem $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau nicht um einen Suprakristall handeln. Wir machen zum Ende noch darauf aufmerksam, dass die Autoren ein Verschwinden des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus und der neuen Anomalien in der Drehmoment-Messung bei einer Temperatur von etwa 0.6 K sehen. Viele Messungen der Magnetisierung sehen die Magnetisierungsplateaus aber noch bei deutlich größeren Temperaturen und die Autoren weisen darauf hin, dass die Stabilisierung in den Magnetisierungsmessungen durch adiabatische, isentrope Abkühlung des Spin-Systems stattfinden muss [60].

Die eben angedeutete Idee des Suprakristalls, oberhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus, ist wesentlich durch die zeitlich parallel entstandene Arbeit [61] motiviert. Mit dieser Arbeit setzten die Autoren der Arbeit [39] ihre NMR-Analyse des Materials fort. Dabei steht aber nicht das NMR-Spektrum des Kupfers im Fokus, sondern das Spektrum der Boratome, da es strukturell einfacher ist, aber alle Kennzeichen der Super-Struktur zeigt.

Die Autoren beobachten das Verhalten des NMR-Spektrums für die Feldstärken 27.5 T (innerhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus), 28.7 T und 29.9 T (beide oberhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus). Dabei ist das Bor-Spektrum innerhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus, aufgrund der Super-Struktur, ebenfalls aus vielen Peaks aufgebaut. Die Messung zeigt, dass das Spektrum oberhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus

modifiziert wird, aber nicht schmilzt. Die drei Spektren zeigen insgesamt ein ähnliches Spektrum und die Position der Peaks ändert sich nicht. Die Unterschiede der drei Spektren liegen einmal in den Amplituden der Peaks. Weiter spalten einige Peaks in zwei (sehr nahe liegende) Peaks auf oder zwei nahegelegene Peaks verschmelzen zu einem Signal. Wir weisen darauf hin, dass sich die komplexen Strukturen nur mit Hilfe einer Super-Struktur erklären lassen (also einem Bruch der diskreten Translationssymmetrie des Systems). Die Ähnlichkeiten der Spektren bzw. die unveränderte Position der Peaks spricht dafür, dass oberhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus die $1/8$ -Super-Struktur weiterhin im System erhalten bleibt.

Das Fortdauern der $1/8M_{\text{sat}}$ -Super-Struktur, obwohl die Magnetisierung in diesem Bereich kontinuierlich steigt, entspricht dem Verhalten eines Suprakristalls. Da die DM-Wechselwirkung die Spin-Rotations-Symmetrie bricht, kann kein Bose-Einstein-Kondensat vorliegen. Oberhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus spalten wie beschrieben einige Peaks des Spektrums der $1/8M_{\text{sat}}$ -Super-Struktur auf. Die Autoren finden eine neuartige geordnete Phase mit komplexerer Ordnung als sie im $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau zu finden ist. Dabei interpretieren die Autoren ihre Ergebnisse so, dass ein analoger Zustand zu einem Suprakristall gefunden wird, dessen Ursprung und Natur spannend sind, aber dieser Feldbereich bedarf weiterer Untersuchung. Fassen wir das Verhalten der Magnetisierung oberhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus zusammen, so ist dieser linear steigende Bereich keinesfalls durch ein einfaches Kondensat von Bosonen zu verstehen. In Arbeit [61] deuten die Resultate oberhalb des $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateaus auf ein Verhalten hin, das analog zu einem Suprakristall ist. In [60] deuten die Ergebnisse auf zusätzlich Anomalien hin, die auf weitere Plateaus in diesem Feldbereich deuten.

Zuletzt sprechen wir noch eine weitere mikroskopische Analyse der Strukturen an. In dieser Messung [62] wird die Magnetisierung des Materials mittels NMR und Drehmoment-Messungen bestimmt, bis zu Feldstärken von 34 T. Dabei wird in dieser Arbeit erstmals eine Plateaufolge von $1/8M_{\text{sat}}$, $2/15M_{\text{sat}}$, $1/6M_{\text{sat}}$ und $1/4M_{\text{sat}}$ mit zwei inkommensurablen Phasen oberhalb und unterhalb des $1/6M_{\text{sat}}$ -Plateaus bestimmt. Die Arbeit kann zu den genannten Plateaus (abgesehen vom $1/3M_{\text{sat}}$ -Plateau) ein NMR-Spektrum messen. Die Bor-Spektren des $1/8M_{\text{sat}}$ - und des $2/15M_{\text{sat}}$ -Plateaus sind sehr linienreich. Das spricht für große Einheitszellen der Strukturen und ein Triplon-Verhalten, also lokalisierten Triplets, die ihre Umgebung polarisieren und so das komplexe Spektrum erklären. Dabei entspricht die Interpretation der Spektren über lokalisierte Triplonen dem Bild, mit dem die Autoren arbeiten, aber die Spektren können mit dieser Interpretation noch nicht vollständig erklärt werden.

Auch das $1/6M_{\text{sat}}$ -Plateau zeigt diese Physik, aber das Spektrum ist nicht so linienreich, was für eine kleinere Einheitszelle spricht. Die inkommensurable Anomalie oberhalb des $1/6M_{\text{sat}}$ -Plateaus zeigt ein Spektrum, das qualitative Ähnlichkeiten zum $1/6M_{\text{sat}}$ -Plateau-Spektrum zeigt und für ein Fortbestehen der $1/6M_{\text{sat}}$ -Super-Struktur spricht. Die Anomalie unterhalb des $1/6M_{\text{sat}}$ -Plateaus ist schwerer einzuordnen. Es liegt klar eine Super-Struktur vor, aber diese zeigt qualitative Ähnlichkeiten sowohl zur $1/8M_{\text{sat}}$ -Super-Struktur als auch zur $1/6M_{\text{sat}}$ -Super-Struktur. Das NMR-Spektrum des $1/4M_{\text{sat}}$ -Plateaus ist strukturell recht einfach und lässt sich gut mit einer Streifenstruktur im System erklären. Die Autoren versuchen, die erzielten Ergebnisse

durch ein vereinheitlichtes Prinzip zu verstehen und kommen auf einen unvollständigen “devil’s staircase” zu sprechen. Grob zusammengefasst, besteht ein Plateau aus Super-Strukturen, die sich periodisch auf das Gitter fortsetzen. Betrachten wir einen Streifen aus einer Super-Struktur (z. B. der $1/6M_{\text{sat}}$ -Super-Struktur), also einer Anordnung derselben Super-Strukturen in x-Richtung, so kann der in y-Richtung gelegene, nächste Streifen wieder dieselbe Super-Struktur haben, oder ggf. eine andere Super-Struktur (z.B. eine $1/8M_{\text{sat}}$ -Super-Struktur) besitzen. Die inkommensurable Abwechslung von Streifen aus Super-Strukturen kann das beobachtete Verhalten erklären. So könnte eine (inkommensurable) Abwechslung von $1/6M_{\text{sat}}$ -Super-Struktur und $1/8M_{\text{sat}}$ -Super-Struktur jeden endlichen Wert zwischen $1/8M_{\text{sat}}$ und $1/6M_{\text{sat}}$ annehmen und eine Super-Struktur zeigen, die wie eine Mischung aus beiden Super-Strukturen wirkt. Dies entspricht genau der Beobachtung der Autoren und wird von den gemessenen Streifenstrukturen des $1/4M_{\text{sat}}$ -Plateaus und der theoretisch vorhergesagten Streifenstruktur des $1/3M_{\text{sat}}$ -Plateaus unterstützt. Hier ist das zentrale Ergebnis, dass die Bildung von Streifen im System, viele mikroskopische Details der Plateaus erklärt.

1.4 Experimentelle Zusammenfassung

Wir fassen kurz zusammen, was über das Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ bekannt ist. Die Kristallstruktur des Materials formt ein Netzwerk aus orthogonal liegenden Dimeren aus Quanten-Spins $1/2$, wie wir in Kapitel 1.2.1 beschrieben haben. Der Grundzustand des Systems ist dadurch bestimmt, dass dominant Singulets an jedem Dimer stabilisiert sind. Dabei besteht eine relevante Zwischen-Dimer-Kopplung J' , ohne die man die Grundzustandseigenschaften, speziell die Suszeptibilität, nicht (theoretisch) beschreiben kann. Weiter sind wir auf zusätzliche Kopplungen eingegangen, wobei wir an dieser Stelle nur eine kleine Inner- und Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung ansprechen, die sich in Messungen von Grundzustandseigenschaften aber kaum bemerkbar machen.

In Kapitel 1.2.2 haben wir magnetische Anregungen betrachtet und hier ungewöhnliche Eigenschaften gesehen. ESR-Messungen, INS und Raman-Streuexperimenten zeigen eine Vielzahl von lückenbehafteten Anregungen im System. Die relevantesten Anregungen für eine Beschreibung des magnetischen Verhaltens sind die Triplet-Anregung und gebundene Zustände aus zwei Triplets mit $S_z = 2$. Mit INS kann die Dispersion dieser Anregungen bestimmt werden und hier zeigt sich eine exotische Kinetik der Anregungen. Die Triplets zeigen eine schwache (fast flache) Dispersion. Die Bewegung der Triplets ist also stark unterdrückt. Dagegen ist die Bandbreite der Dispersion der gebundenen Zustände größer. Die starke Dispersion dieser Anregung spricht für starke Bindungseffekte und wir nehmen an dieser Stelle vorweg, dass dieses Bindungsphänomen nicht durch effektive attraktive Wechselwirkungen der Triplets hervorgerufen wird, sondern durch korreliertes Hüpfen. Wir haben weiter gesehen, dass die DM-Wechselwirkung zu Aufspaltungen von Entartungen führt, aber die DM-Wechselwirkung beeinflusst die Dimer-Physik nicht wesentlich.

Wir haben uns weiter mit dem Verhalten von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ im Magnetfeld beschäftigt (Kapitel 1.3). Im Magnetfeld liegt für eine hinreichend große Feldstärke eine endliche Dichte von Triplet-Anregungen vor. Aufgrund ihrer lokalen Natur, dominieren Wechselwirkungen zwischen den Triplets und es formen sich Kristalle aus lokalisierten Triplets, die das Auftreten der Magnetisierungsplateaus erklären. Die Literatur berichtet von Plateaus bei den Werten $1/8M_{\text{sat}}$, $2/15M_{\text{sat}}$, $1/6M_{\text{sat}}$, $1/4M_{\text{sat}}$, $1/3M_{\text{sat}}$ und $1/2M_{\text{sat}}$. Das Bild der lokalisierten Triplets scheint auch experimentell unterstützt zu werden durch Messungen der mikroskopischen Struktur. Der Bereich zwischen dem $1/8M_{\text{sat}}$ -Plateau und dem $1/6M_{\text{sat}}$ -Plateau zeigt ein sehr komplexes Verhalten, das durch eine inkommensurable Mischung der beiden Strukturen erklärt werden könnte. Sowohl im eben angesprochenen inkommensurablen Bereich (zwischen $1/8M_{\text{sat}}$ und $1/6M_{\text{sat}}$), als auch in den Plateaus der Magnetisierung $1/4M_{\text{sat}}$, $1/3M_{\text{sat}}$ und $1/2M_{\text{sat}}$ ist die mikroskopische Struktur vermutlich durch die Anordnung zu Streifen bestimmt. Es sei auf geringe, aber deutlich zu erkennende Unterschiede in der transversalen und longitudinalen Magnetisierungen aufmerksam gemacht, die besonders deutlich im Bereich unterhalb von $1/8M_{\text{sat}}$ zu sehen sind. Diese Unterschiede sind in der DM-Wechselwirkung begründet. Wir erinnern daran, dass diese Wechselwirkungen das Auftreten von symmetriegebrochenen Suprakristallen nicht erlauben, aber analoge Phasen zu Suprakristallen mit einer Anordnung in Richtung der Vorzugsrichtung und Bruch der diskreten Translationssymmetrie, sind möglich.

Wir sehen, dass speziell die Magnetisierung sehr komplex und physikalisch spannend ist. Wir beschäftigen uns in dieser Arbeit mit der theoretischen Beschreibung dieses Systems im Magnetfeld. Die relevanten physikalischen Mechanismen, die die Magnetisierung bestimmen, sollen herausgearbeitet werden. Dabei haben wir angedeutet, dass die wesentliche Physik in einem $SU(2)$ invarianten Heisenberg-Modell, dem Shastry-Sutherland-Modell, liegen sollte. Die DM-Wechselwirkungen haben zu Erweiterungen geführt, die die mikroskopische Interpretation betreffen, aber nicht die dominante Physik des Systems darstellen. Daher werden wir uns für die Beschreibung des Systems auf symmetrische Heisenberg-Wechselwirkungen beschränken. Dabei stellt die theoretische Beschreibung der Magnetisierung durch ein Heisenberg-Modell eine große Herausforderung dar. Dies liegt zum einen daran, dass es sich um ein zweidimensionales, frustriertes System handelt. Die Entwicklung effektiver Werkzeuge zur (unvoreingenommenen) Beschreibung solcher Quanten-Systeme ist ein aktuelles und schwieriges Thema. Neben der Methodenentwicklung selbst, gibt es auch systembezogene Gründe für die schwierige theoretische Beschreibung. Zum einen liegt die Schwierigkeit in den teilweise sehr großen Super-Strukturen. Diese Strukturen erklären sich gut in einem effektiven Bild, in dem langreichweitige Wechselwirkungen der magnetischen Anregungen die Strukturen bestimmen. Die effektiven langreichweitigen Wechselwirkungen liegen typischerweise in einer kleinen Energieskala. Es existieren daher viele konkurrierende Zustände, die energetisch nah am Grundzustand liegen. Neben der kleinen Energieskala, ist auch die exotische Kinetik der Teilchen selbst eine Herausforderung. Im System liegt ein starker exotischer Bindungsmechanismus vor, das korrelierte Hüpfen. Der Mechanismus der die Bindungsphänomene erklärt, bleibt von experimenteller Seite offen und die theoretische Erklärung durch korreliertes Hüpfen wurde von uns vorweggenommen. Eine theoretische Beschreibung sollte einen Einfluss von Bindungszuständen bzw. Bindungseffekte immer im Auge

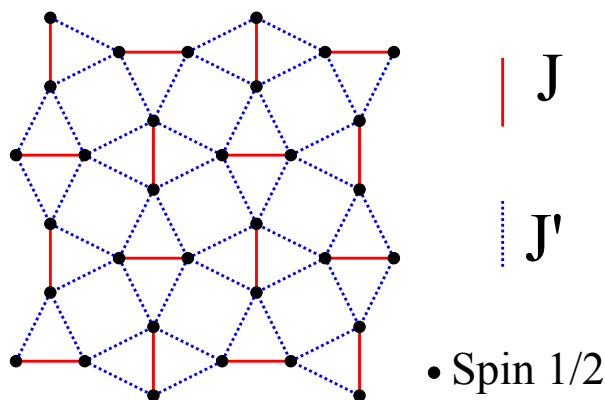


Abbildung 1.11: Wir zeigen das Shastry-Sutherland-Modell. Es handelt sich um ein Spin 1/2 Heisenberg-Modell aus zwei Kopplungen J und J' , diskutiert auf dem Shastry-Sutherland-Gitter. Das Gitter ist so angelegt, dass es für $J' = 0$ zu orthogonalen, isolierten Dimeren zerfällt und für $J = 0$ identisch zu einem Quadrat-Gitter ist.

behalten, aber das korrelierte Hüpfen erhöht typischerweise die Korrelationen im System und verlangt dann eine (möglichst) quantenmechanische Beschreibung.

1.5 Das Shastry-Sutherland-Modell

Das Shastry-Sutherland-Modell wurde 1981 für Quanten-Systeme aus Spins 1/2 vorgeschlagen [1]. Es ist ein Modell aus zwei verschiedenen Heisenberg-Kopplungen mit den Amplituden J und J' , die auf dem Shastry-Sutherland-Gitter definiert sind. Das Modell lässt sich gemäß

$$\mathcal{H}_{\text{Shastry-Sutherland}} = J \sum_{\langle \vec{i}, \vec{j} \rangle} \vec{S}_{\vec{i}} \cdot \vec{S}_{\vec{j}} + J' \sum_{[\vec{i}, \vec{j}]} \vec{S}_{\vec{i}} \cdot \vec{S}_{\vec{j}} \quad (1.1)$$

schreiben. Die Struktur des Shastry-Sutherland-Gitters ist in Abbildung 1.11 dargestellt. Hier haben wir die Kopplung J als rote Wechselwirkung mit durchgezogener Linie zwischen zwei Spin 1/2 markiert und die Wechselwirkung J' haben wir als blaue, gestrichelte Linien eingezeichnet. Die topologische Äquivalenz dieses Gitters zu der Lage der Kupferatome in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ kann leicht durch einen Vergleich von Bild 1.11 mit dem rechten Teil von Bild 1.3 aus Kapitel 1.2.1 festgestellt werden.

Wir betrachten zuerst einige Grenzfälle dieses Modells. Für den Fall $J' = 0$ vereinfacht sich das Modell auf isolierte Dimere, wobei die Dimere orthogonal zueinander liegen. Für $J = 0$ reduziert sich das Modell auf ein Heisenberg-Modell auf dem Quadratgitter. Sind beide Kopplungen J und J' endlich, wechselwirken beide Spins einer J -Kopplung mit den jeweils benachbarten Spins der orthogonalen Nachbar-Dimere. Das System wird bestimmt durch Dreiecke aus gekoppelten Spins, wobei jeweils zwei Kopplungen in einem Dreieck die Stärke J' haben. Die dritte Kopplung im Dreieck hat dann die Amplitude J . Es liegt also geometrische Frustration in diesem Modell vor. Es stellt sich daher die spannende Frage, welche Phasen im Modell als Funktion vom Kopplungsverhältnis J'/J stabilisiert werden.

Shastry und Sutherland haben in ihrer Original-Arbeit [1] bereits festgestellt, dass sich jede Spin-Spin-Wechselwirkung einem Dreieck zuschreiben lässt. Nummerieren wir die Spins in einem Dreieck mit 1, 2 und 3 und lassen die Spins 2 und 3 über die Kopplung J wechselwirken, lässt sich der Hamiltonoperator als

$$\mathcal{H} = \sum_{\Delta} J' \vec{S}_{\Delta,1} \left(\vec{S}_{\Delta,2} + \vec{S}_{\Delta,3} \right) + J \vec{S}_{\Delta,2} \vec{S}_{\Delta,3} \quad (1.2)$$

$$= \sum_{\Delta} J' \vec{S}_{\Delta,1} \left(\vec{S}_{\Delta,\text{Total}}^{2-3} \right) + J \vec{S}_{\Delta,2} \vec{S}_{\Delta,3} \quad (1.3)$$

schreiben. Die Autoren haben durch diese Schreibweise erkannt, dass ein exakter Eigenzustand des Gesamt-Systems konstruiert werden kann. Dazu müssen die beiden durch die Kopplung J verbundenen Spins 2 und 3 an jedem Dreieck Δ eine Bindung eingehen. Bei den genannten Bindungen aller Spins 2 und 3 muss es sich dazu um Singulett-Überlagerungszustände mit Gesamtspin $\vec{S}_{\Delta,\text{Total}}^{2-3} = 0$ handeln. Der Produktzustand aller Singulettts liefert dann einen (exakten) Eigenzustand des Systems, denn alle Terme im Hamiltonoperator, die proportional zu J' sind, verschwinden wegen $\vec{S}_{\Delta,\text{Total}}^{2-3} = 0$. Dies ist eine Folge der geometrischen Frustration. Die Spins 2 und 3 können auch einen Überlagerungszustand mit $\vec{S}_{\Delta,\text{Total}}^{2-3} = 1$ eingehen. Dieser (angeregte) Zustand ist aber kein exakter Eigenzustand des Systems mehr.

Weiter haben die Autoren eine Variationsrechnung durchgeführt. Als Ansatz für den Zustand des Systems haben die Autoren eine Produkt-Wellenfunktion der Dreiecke angenommen und der gewählte Ansatz wurde mit dem Ritz'schen Verfahren minimiert. Der Ansatz ist so konstruiert, dass die Dimerisierung am J -Bein des Dreiecks im Ansatz als lokaler Zustand für ein Dreieck enthalten ist. Die Autoren können zeigen, dass der dimerisierte Zustand eines Dreiecks im Parameterbereich zwischen $J'/J = 0$ bis mindestens $J'/J = 0.5$, Grundzustand an einem Dreieck ist. Entsprechend ist das Produkt der Dimere im Parameter-Bereich ein Ansatz für den Grundzustand des Gesamtsystems. Da der Produktzustand der isolierten Dimere aber ein Eigenzustand des Systems ist, liefert das Variationsverfahren keine obere Schranke für den Grundzustand, sondern den exakten Grundzustand. Shastry und Sutherland bestätigen damit, dass der exotische Dimer-Zustand bis mindestens $J'/J = 0.5$ der Grundzustand des Systems ist. Die Autoren haben den exakten dimerisierten Eigenzustand als Grundzustand erkannt. Im Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ liegt in sehr guter Näherung genau der eben beschriebene Eigenzustand vor (siehe Unterkapitel 1.2.1).

Betrachten wir den entgegengesetzten Limes $J = 0$, so liegt ein Heisenberg-Modell auf einem unfrustrierten Quadratgitter vor, das einen langreichweitig geordneten Néel-Zustand als Grundzustand besitzt [63]. Wir können also mindestens einen Phasenübergang zwischen der magnetisch ungeordneten Dimer-Phase und der magnetisch langreichweitig geordneten Néel-Phase erwarten. In der zuerst genannten Phase liegt die Physik von Singulettts auf Dimeren im Grundzustand vor, während im Néel-Zustand Spinwellen die relevanten Freiheitsgrade des Systems sind.

Wir stellen nun das Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells in Abbildung 1.12 vor,

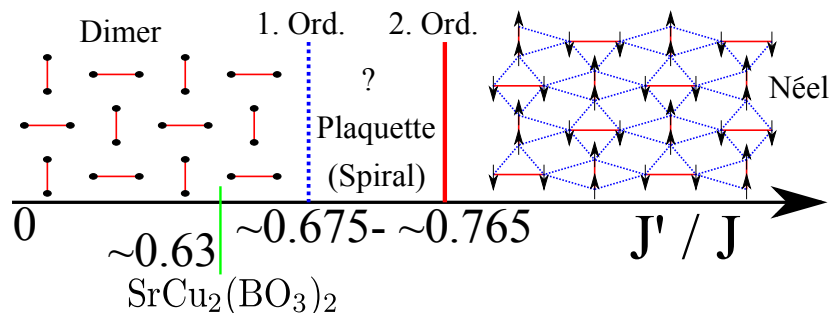


Abbildung 1.12: Wir zeigen das Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells. Für kleine Parameter J'/J liegt im System der Dimer-Zustand vor, der durch einen Übergang erster Ordnung bei etwa $J'/J \approx 0.675$ in eine Zwischenphase wechselt. Nach aktuellem Forschungsstand (siehe [64] [65], im Bild sind die Zahlenwerte aus [64] gezeigt) handelt es sich um eine Plaque-Phase, die bis etwa $J'/J \approx 0.765$ stabil ist und mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung in eine Néel-Phase übergeht. Das Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ liegt mit $J'/J \approx 0.63$ in der Dimer-Phase.

das den uns bekannten, aktuellen Forschungsstand des Phasendiagramms des Modells widerspiegelt. Beginnen wir bei kleinen Werten für J'/J , so befinden wir uns in der Dimer-Phase, die bis etwa $J'/J \approx 0.675$ stabil ist [64]. Dabei haben wir die Zahlenwerte in Abbildung 1.12 aus Arbeit [64] gewählt, einer aktuellen iPEPS-Rechnung zum Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells. iPEPS ist die Abkürzung für infinite Projected-Entangled-Pair-States und ist ein variationelles Tensor-Netzwerk-Verfahren. Der Übergang bei $J'/J \approx 0.675$ ist erster Ordnung und erfolgt laut [64] in eine Plaque-Phase.

Die Plaque-Phase ist bis etwas $J'/J \approx 0.765$ stabil, wo ein Phasenübergang zweiter Ordnung zur Néel-Phase geschieht. Der Übergang der Dimer-Phase in eine Zwischenphase scheint aus heutiger Sicht gesichert. Während in frühen Arbeiten ein direkter Übergang von der Dimer-Phase in die Néel-Phase gesehen wurde oder die Möglichkeit einer Zwischenphase nicht einbezogen wurde ([54] [66] [67] [68]), findet man mit einer Molekular-Feld-Rechnung nach einer Schwinger-Boson-Transformation eine magnetisch geordnete helikale Zwischenphase [69] (kurz Spiral-Phase genannt, siehe Bild 1.12).

Die Anwesenheit einer Zwischenphase konnte später auch von einigen weiteren Arbeiten bestätigt werden [70] [71] [72] [73] [74], aber aus verschiedenen Gründen können in den genannten Arbeiten keine Aussagen über die Natur der Phase getroffen werden. Hier sind variationelle Verfahren oder Störungstheorien (die Vorschläge wie z. B. die Plaque-Phase, als Startpunkt der Untersuchung nutzen) hilfreich und in der aktuellen Literatur gibt es eine sehr klare Tendenz zur Plaque-Phase [64] [75] [76] [77] [78] [79] [80] [81] als Zwischenphase im Shastry-Sutherland-Modell.

Wir heben hier besonders die variationell bestimmten Phasendiagramme aus den Arbeiten [81] und [64] hervor, die ein sehr klares Bild der Plaque-Zwischenphase zeichnen. Die Plaque-Phase bricht die Translationssymmetrie im Gitter und ist analog zur Dimer-Phase aus $S_{\text{Total}} = 0$ -Überlagerungszuständen aufgebaut. Konkret überlagern in der Plaque-Phase die vier Spins an einem Quadrat aus vier J' -Kopplungen zu einem Singulett. Das Singulett liegt dann an jedem zweiten J' -Viereck, so dass jeder Spin im System zu genau einem Singulett gehört. Die Plaque-Singuletts sind keine Eigenzustände des Systems und in der Plaque-Phase liegt eine

endliche horizontale (und vertikale) Dimer-Dimer-Korrelation vor. Die Autoren von [64] nutzt die Dimer-Dimer-Korrelation als Ordnungsparameter, um die Plaquette-Phase von den anderen Phasen zu unterscheiden.

Wir merken abschließend an, dass der Phasenübergang erster Ordnung aus der Dimer-Phase bei $J'/J \approx 0.68$ liegt. Das Kopplungsverhältnis des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ wurde in Arbeit [57] auf etwa $J'/J \approx 0.63$ bestimmt. Wir nehmen vorweg, dass die Ein-Teilchen-Lücke des Systems bei etwa $J'/J = 0.7$ schließen würde. Das Kopplungsverhältnis des Materials liegt also gleichzeitig in der Nähe des Phasenüberganges erster Ordnung und eines potenziellen kritischen Punktes des Modells. Da das Material nah an einem Phasenübergang angesiedelt ist, ist mit einer erschwerten Beschreibung aufgrund der längeren Korrelationen im System zu rechnen. Die Einflüsse der Korrelationen können an dem recht hohen Signal in der Suszeptibilität auch experimentell gesehen werden [37]. Das starke Signal in der Suszeptibilität begründet sich zur Nähe des Kopplungsverhältnisses zum kritischen Punkt. Die Bestimmung des Phasendiagramms hat für uns nur theoretisches Interesse, da andere Phasen als die Dimer-Phase, für die Beschreibung von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ keine Relevanz haben. Für eine theoretische Modellierung des Materials ist aber das Kopplungsverhältnis J'/J passend zu wählen.

1.5.1 Abschätzung der Kopplungskonstanten

Ein wichtiger Punkt bei der Beschreibung des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ist die Bestimmung der Kopplungskonstanten J und J' sowie des Verhältnisses der beiden Kopplungen J'/J , so dass es zu einer Äquivalenz von Theorie und Experiment kommt. Im Experiment ist es nicht möglich die Kopplungskonstanten direkt zu bestimmen. Wir haben bereits argumentiert (siehe Kapitel 1.2), dass ein minimales Modell zur Beschreibung des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$, mindestens die Inner-Dimer-Kopplung J und die Zwischen-Dimer-Kopplung J' benötigt. Dieses Modell entspricht topologisch dem eben präsentierten Shastry-Sutherland-Modell. Wir beschränken uns darauf, die Parameter J und J' des Shastry-Sutherland-Modells zu bestimmen.

Aussagen über die Kopplungskonstanten können aus drei Quellen gewonnen werden. Die erste Möglichkeit besteht darin die Kopplungskonstanten auf experimentellen Weg zu bestimmen. Typischerweise ist dies nicht möglich, aber das Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ stellt, bezüglich der Kopplung J , eine von wenigen Ausnahmen dar. Strukturell ist der Grundzustand ein Produktzustand aus (isolierten) Singulets. Bedingt durch die Frustration existieren keine Fluktuationen aufgrund einer endlichen Kopplung J' im Material, was für den isolierten Charakter der orthogonalen Dimere sorgt. Die Kopplungsstärken der (Singulett)-Spins untereinander sind im Grundzustand allein durch die Kopplung J bestimmt. Die Spin-Spin-Kopplung J kann also mit der Stärke der Bindung eines Spins zu seinem Nachbar-Spin im Singulett identifiziert werden. Diese strukturelle Einfachheit wurde mittels NMR-Messungen der Kupferatome nachgewiesen [41] (siehe Kapitel 1.2.1). Dabei können die Autoren die Resonanzfrequenzen der NMR im Magnetfeld mit der Bindungsstärke identifizieren und auf die Kopplung J zurückführen. Dies ist an die Annahmen

geknüpft, dass ein exakter Singulett-Produktzustand vorliegt. Die Autoren bestimmen damit J auf $J = 75$ K (6.5 meV, 1662 GHz, 112 T).

Eine weitere Möglichkeit, die Kopplungskonstanten zu bestimmen, besteht aus einem vollständig theoretischen Zugang über sogenannte ab initio Rechnungen. Diesbezüglich sind wir bereits auf die Arbeit [42] von Mazurenko et al. eingegangen. Die Arbeit bestimmt die Kopplungen auf $J = 85$ K (7.3 meV, 1866 GHz, 126 T) und $J' = 48$ K (4.1 meV, 1048 GHz, 71 T) und man erhält $J'/J = 0.56$.

Die dritte Methode zur Bestimmung der Kopplungskonstanten J und J' für $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ liegt in einem Vergleich von Messgrößen, bestimmt durch (mikroskopische) Theorien und Experimente. In der Regel wird eine Modellrechnung auf Basis des Shastry-Sutherland-Modells in Abhängigkeit von J'/J durchgeführt. Der Parameter J'/J wird so gewählt, dass Zahlenwerte für gemessene Observablen übereinstimmen. Die Kopplungskonstanten $J = 100$ K (8.6 meV, 2199 GHz, 149 T), $J' = 68$ K (5.9 meV, 1508 GHz, 102 T) und $J'/J = 0.68$ können so gewonnen werden [54]. Dazu hat man die magnetische Suszeptibilität aus exakten Diagonalisierungen (typischerweise im ED abgekürzt) des Shastry-Sutherland-Modells für Cluster der Größe $N_C = 8, 16, 20$ bestimmt, wobei N_C die Anzahl der Spins des Clusters angibt. Die Rechnungen wurden für verschiedene J'/J zwischen $J'/J = 0.5$ bis 0.7 durchgeführt und dann mit der magnetische Suszeptibilität aus der Arbeit [37] verglichen.

Typischerweise bietet sich auch ein Fit von Modell-Rechnungen der Dispersion an. Für das Shastry-Sutherland-Modell ist dies aber schwierig, weil die Dispersion sehr flach ist und eine genaue Abschätzung der Bandbreite schwer ist. Dies wird auch theoretisch erklärt durch ein effektives Modell der Dimer-Phase, das durch Störungstheorie im Parameter J'/J zu hoher Ordnung bestimmt wurde [82]. Eine Anregung kann in dem effektiven Modell nur über einen Term mit sehr kleiner Amplitude, beginnend in sechster Ordnung in J'/J , hüpfen. Das effektive Modell hoher Ordnung aus [82] beinhaltet auch Zwei-Teilchen-Terme (wie Wechselwirkungen und korreliertes Hüpfen), mit denen auch die Beschreibung von gebundenen Zuständen möglich ist. Die Autoren von [82] bestimmen die Kopplungskonstanten auf $J = 72$ K (6.16 meV, 1575 GHz, 107 T), $J' = 43$ K (3.71 meV, 949 GHz, 64 T) und $J'/J = 0.60$, indem an die INS-Daten der gebundenen Zustände aus Arbeit [48] gefittet wird. Dies bietet sich aufgrund der größeren Bandbreite dieser Moden an, im Vergleich zur eben angesprochenen, flachen Dispersion der Ein-Triplett-Mode. Dabei beziehen die Autoren aber die DM-Wechselwirkung nicht in die Rechnungen ein. Hier liegt eine mögliche Ungenauigkeit der Arbeit, denn wir haben Auswirkungen der DM-Wechselwirkung auf die Anregungen bereits kennengelernt (siehe Kapitel 1.2.2). Wir merken an, dass die Autoren mit ihrem publizierten Kopplungskonstanten auch den dynamischen Strukturfaktor ausgerechnet haben [49]. Die so bestimmte Intensitätsverteilung passt gut zum Experiment [48]. Wir machen aber darauf aufmerksam, dass die Übereinstimmung des dynamischen Strukturfaktors zwar für das Kopplungsverhältnis $J'/J = 0.60$ spricht, aber in anderen Arbeiten (siehe z. B. [54]) kann nur mit höheren Kopplungskonstanten der Verlauf der magnetischen Suszeptibilität erfasst werden.

Die magnetische Suszeptibilität aus der experimentellen Arbeit [40] wird von Arbeit [83] genutzt, um die Kopplungskonstanten auf $J = 85$ K (7.3 meV, 1866 GHz, 126 T), $J' = 54$ K (4.65 meV, 1189 GHz, 80T) und $J'/J = 0.635$ abzuschätzen. Die Autoren nutzen dazu einen Vergleich mit ED-Rechnungen des Shastry-Sutherland-Modells für Cluster aus 16 und 20 Dimeren und sehen, dass die beste Übereinstimmung bei den diskutierten Werten liegt. Die numerischen Rechnungen sind methodisch analog zu denen aus Arbeit [54]. Wir betonen, dass Fits an die experimentellen Ergebnisse aus [40] genutzt wurden. Diese Arbeit nutzt einen sehr reinen Ein-Kristall des Materials. Das Verhalten der magnetischen Suszeptibilität des Ein-Kristalls für tiefe Temperaturen deutet auf eine Anregungs-Lücke von $\Delta = 35$ K (3 meV, 767 GHz, 52 T) hin. Der Fit an eine Suszeptibilität, die auf diesen Wert der Lücke hindeutet, scheint aussagekräftiger als ein Fit an die magnetische Suszeptibilität aus der Arbeit [37] (durchgeführt in der bereits angesprochenen Arbeit [54]). Die Messungen der Anregungen des Materials (siehe Kapitel 1.2.2) liefern sehr übereinstimmend ebenfalls eine Anregungslücke von etwa $\Delta = 35$ K (3 meV, 767 GHz, 52 T). Die Probe der Arbeit [37] war lediglich ein Pulver des Substrats und die magnetische Suszeptibilitätskurve zeigt eine Lücke von $\Delta = 30$ K (2.6 meV, 665 GHz, 45 T), die auf einen etwas größeren Wert von $J'/J = 0.68$ für das Kopplungsverhältnis in Arbeit [54] führt.

Zuletzt machen wir noch auf unsere Arbeit [57] aufmerksam, die in Kapitel 6 im Detail diskutiert wird. Wir beleuchten das Verhalten des Shastry-Sutherland-Modells im Feld gleich und nehmen vorweg, dass dieses Modell allein (ohne zusätzliche Kopplungen) die Magnetisierungsplateaus stabilisieren und erklären kann. Ein Fit der experimentellen und theoretischen Breiten der Plateaus, speziell bei hohen Magnetisierungen $1/3M_{\text{sat}}$ und $1/2M_{\text{sat}}$, führt uns ebenfalls auf einen Wert von $J'/J = 0.63$ (analog zum Wert $J'/J = 0.635$ aus Arbeit [83]). Im Speziellen rührt dieser Zahlenwert aus dem Vergleich der experimentellen Magnetisierungskurve im hohen Magnetfeld, die zum ersten Mal die volle Breite des $1/2M_{\text{sat}}$ -Plateaus aufdeckt, mit iPEPS Rechnungen, die für $J'/J = 0.63$ konsistent zueinander sind. Wir fassen nun kurz zusammen, dass die konkreten Werte für J und J' , die wir präsentiert haben, noch zu keinem konsistenten Ergebnis kommen. Beispielsweise liegt J zwischen 75 K und 100 K. Das Verhältnis zwischen beiden ist aber für die Theorie der relevante Faktor. Hier können recht konsistente Werte von $J'/J \approx 0.60$ bis 0.635 in der Literatur gefunden werden (ignorieren wir den Fit von $J'/J = 0.68$ an die Ergebnisse der Pulver-Probe [54]). Bezüglich des Kopplungsverhältnisses J'/J halten wir den Wert 0.63 aus unserer Arbeit für den besten Wert.

1.6 Shastry-Sutherland-Modell im Magnetfeld

Wir beleuchten nun den aktuellen Stand der Forschung bezüglich des Shastry-Sutherland-Modells im Magnetfeld und motivieren unsere Arbeit daraus. In Kapitel 1.2.2 haben wir schon vorweggenommen, dass die Magnetisierung im System durch das Verhalten der Triplet-Anregungen beschrieben wird. Dabei korrespondiert die Dichte an Triplets im System mit der Magnetisierung. Wir einigen uns im Folgenden auf die Teilchen-Sprache und sprechen von der Dichte im System. Der Hamiltonoperator des Shastry-Sutherland-Modells im Magnetfeld $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$ ist

gegeben durch

$$\frac{\mathcal{H}_{\text{Shastry-Sutherland}}}{J} = \sum_{(\vec{i}, \vec{j})} \vec{S}_i \vec{S}_j + (J'/J) \sum_{[\vec{i}, \vec{j}]} \vec{S}_i \vec{S}_j + h \sum_i S_i^z \quad , \quad (1.4)$$

wobei wir das Modell hier auf die Kopplung J mit den Kopplungsverhältnissen J'/J und $B_z/J = h$ normiert haben.

Eine tabellarische Übersicht relevanter Arbeiten zum Shastry-Sutherland-Modell im Magnetfeld ist in Tabelle 1.1 gezeigt. Jede Zeile von Tabelle 1.1 zeigt eine Arbeit. Die entsprechende Quelle ist in der ersten Spalte angegeben, gefolgt von der Methode der theoretischen Arbeit in der zweiten Spalte. In der dritten Spalte geben wir den betrachteten Bereich des Kopplungsverhältnisses J'/J an und erinnern diesbezüglich an die Diskussion in Kapitel 1.5.1. Im Unterkapitel 1.5.1 sind wir zur Schlussfolgerung gekommen, dass das Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ optimal mit $J'/J \approx 0.63$ beschrieben wird. In den experimentellen und theoretischen Magnetisierungskurven wird ein Großteil der Magnetisierung durch Magnetisierungsplateaus bestimmt und gerade die Stabilisierung von Plateaus in der Magnetisierung ist das herausragende Merkmal von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ bzw. dem Shastry-Sutherland-Modell. Diesbezüglich fassen die Spalten vier und fünf der Tabelle 1.1 die berechneten Plateaus zusammen. Wir halten es sowohl für die Übersicht als auch aus physikalischen Gründen (die wir noch ansprechen werden) für sinnvoll, eine Trennung in zwei Dichteregime, kleine Dichte und mittlere Dichte, einzuführen. Dabei verstehen wir den Bereich kleiner Dichte als Bereich bis zur Dichte $1/4$ und geben die Plateaus der theoretischen Rechnungen dieses Dichteregimes in der vierten Spalte an. Weiter definieren wir den Bereich mittlerer Dichten, als Bereich zwischen Dichte $1/4$ und $1/2$ und zählen die berechneten Plateaus, innerhalb dieser Grenzen, in der fünften Spalte von Tabelle 1.1 auf.

Wir beginnen mit der Arbeit [54], in der der physikalische Mechanismus erklärt wird, der zur Stabilisierung der Plateaus führt. Dazu überführt die Arbeit das magnetische Modell 1.4 in ein effektives Bild. Hierbei bestimmt man über entartete Störungstheorie ein effektives Modell in einem Teilchen-Bild (Details folgen in Kapitel 3). Im effektiven Bild werden die Triplet-Anregungen mit $S_z = 1$ der Dimer-Phase als Teilchen eines effektiven Modells betrachtet und das effektive Modell beschreibt die Dynamik der Teilchen. Das effektive Modell wird aus Matrixelementen bestimmt, die von der Kopplung J'/J abhängen.

Die Autoren von [54] weisen darauf hin, dass aufgrund der Frustration der Kopplung J' , nur ein sehr eingeschränkter Satz an Matrixelementen vorhanden ist, der die Dynamik im System beschreibt. Aus Symmetriegründen verschwinden alle Ein-Teilchen-Hüpfsterme mit der Ausnahme, dass ein Teilchen diagonal in Richtung $\vec{\delta} = a \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$ springen kann, wobei a den Dimer-Dimer-Abstand bezeichnet. Die Amplitude dieses Ein-Teilchen-Terms ist sehr klein. Die Schlussfolgerung (für die wir auch experimentelle Hinweise gesehen haben, siehe Kapitel 1.2.2) ist daher, dass die Anregungen im Wesentlichen lokal an einem Platz bleiben und Ein-Teilchen-Hüpfprozesse vernachlässigbar klein sind. Eine feste Dichte von (quasi-lokalen) Anregungen ordnet sich dann so an, dass die Wechselwirkungen der Teilchen untereinander minimiert werden. Dies führt zur

Zitat	Methode	J'/J	Plateaus A	Plateaus B
[84]	ED (EffMo+CA)	0.65	1/8(K) 1/6(K)	1/4(S) 1/3(S) 1/2(K)
[85]	EffMo(O(3))+ED	0.6 - 0.68	x	1/3(S) 1/2(K)
[86]	EffMo+ED	0.63	2/9(K) 1/6(K)	1/4(S) 1/3(S) 1/2(K)
[87]	PCUT(O(14)) +CA	0.5	1/9(K) 2/15(K) 1/6(K) 2/9(K)	1/3(S)
[88]	Molekular- Feldnäherung	≈ 0.63	1/8(K) 1/6(K) 1/5(E)	1/4(S) 1/3(S)
[89]	Ansatz	Stabilitäts- rechnung	1/8(Ansatz) 1/6(Ansatz)	1/4(Ansatz)
[90]	CORE+ED		1/9(x) 1/6(x) 2/9(x) 1/8(x)	1/4(x) 1/3(x)
[91]	Chern-Simons- Mean-Field	0.4	x	1/4(x) 1/3(x) 1/2(x)
[67]	PEPS	0.6	x	1/4(x) 1/3(x) 1/2(x)
[81]	MERA	> 0.5	1/9(K) 1/8(K) 1/6(K)	1/4(S) 1/3(S) 1/2(K)
[57]	iPEPS (u.a)	0.63	x	1/4(S) 1/3(S) 1/2(K)
[92]	iPEPS	0.63	1/8(E) 2/15(E) 1/6(E) 1/5(E)	1/4(S)

Tabelle 1.1: Die Magnetisierung von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ wird im Wesentlichen von Magnetisierungsplateaus dominiert. Dies wird in theoretischen Rechnungen bestätigt, wobei wir hier nur relevante Arbeiten zusammenfassen, die das reine Shastry-Sutherland-Modell nutzen [1]. Wir fassen hier die Vorhersagen der zu erwartenden Plateaus zusammen. Werden Vorhersagen zur mikroskopischen Gestalt der Plateaus gemacht, so geben wir die Vorhersage in einer Klammer hinter der Dichte an. Wir fassen klassische Plateaus mit (K), Streifenstruktur mit (S), exotische Strukturen mit (E) und Arbeiten ohne Aussagen mit (X) zusammen.

Bildung von Quasi-Kristallen der Triplet-Anregungen. Diese Zustände werden auch als Spin-Dichte-Wellen (SDW) bezeichnet, die physikalisch den Magnetisierungsplateaus des Shastry-Sutherland-Modells entsprechen. Mikroskopisch finden sich Triplet-Anregungen dann an kristallographisch gleichen Punkten. Die Einteilung des Systems in eine Einheitszelle, die eine Superstruktur charakterisiert, bestimmt die kommensurable Ordnung des Systems.

Ein Plateau ist dadurch gekennzeichnet, dass sich die Magnetisierung nicht ändert, variiert man das externe Feld innerhalb eines bestimmten Feldbereiches. Das System ist also unnachgiebig bezüglich einer externen Veränderung und die Plateau-Phase ist abgegrenzt durch die Felder h_{c1} und h_{c2} . Die beiden Feldstärken h_{c1} und h_{c2} geben die Punkte des Phasenübergangs an, wobei man zwei Fälle zu unterscheiden hat, nämlich einen Phasenübergang erster oder zweiter Ordnung. Bei einem Phasenübergang erster Ordnung schneiden sich in der Regel die Energie-Funktionen von zwei Plateaus verschiedener Dichte. Eine kommensurable Quasi-Kristall-Struktur zeigt selbst wieder effektive Anregungen und eine Energie-Lücke zu dieser magnetischen Anregung, die für die Stabilität dieser Phase sorgt. Das chemische Potenzial der magnetischen Anregung bestimmt dann eine Energieskala. Liegt ein externes Feld h an, das dieser Energieskala entspricht, so

kondensieren die Anregungen im System und ein Phasenübergang zweiter Ordnung liegt vor. Für diese Feldstärke bricht die Plateau-Phase schließlich zusammen und die Feldstärke korrespondiert dann zu einer der (kritischen) Feldstärken h_{c1} oder h_{c2} .

Wir betrachten nun genauer einen Phasenübergang erster Ordnung. Wir erinnern an Kapitel 1.3, wo wir die experimentellen Befunde für $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ zusammengetragen haben. Der Bereich niedriger Magnetisierung ist gerade durch eine Abfolge von wechselnden Magnetisierungsplateaus bestimmt und die Breite der Plateaus wird durch die folgende Beschreibung bestimmt.

Das System ist stabil gegenüber der externen Kraft des Feldes h und im System findet eine Änderung der Dichte statt, wenn die Energie eines anderen (Plateau)-Zustandes niedriger liegt. In einem Plateau ist die Translationssymmetrie gebrochen, wobei Plateaus verschiedener Dichte diese Symmetrie in der Regel unterschiedlich brechen. Daher liegt ein Phasenübergang erster Ordnung vor. Für ein Plateau der Dichte n , das zwischen den kritischen Feldern h_{c1} und h_{c2} stabil ist ($h_{c1} < h < h_{c2}$), soll ein Übergang erster Ordnung (Level-Crossing) zu einem Zustand mit kleinerer Dichte ($n - n'$) oder größerer Dichte ($n + n''$) stattfinden. Schlussfolgerung des Zeeman-Effekts ist es, dass die Energie eines Zustandes im Feld eine lineare Funktion des externen Feldes h mit einer Steigung $-g \cdot \mu_B \cdot S_z \cdot n$ ist. Bei einem Übergang erster Ordnung kreuzt das Plateau der Dichte n (mit Energie $E_0^n = -g \cdot \mu_B \cdot S \cdot n \cdot (h - h_{c1})$ oder auch $E_0^n = -g \cdot \mu_B \cdot S \cdot n \cdot (h_{c2} - h)$) die Zustände mit der Energie $E_0^{n-n'} = -g \cdot \mu_B \cdot S \cdot (n - n') \cdot (h - h_{c1})$ und Dichte $n - n'$ bzw. Energie $E_0^{n+n''} = -g \cdot \mu_B \cdot S \cdot (n + n'') \cdot (h_{c2} - h)$ mit Dichte $n + n''$. Die Differenzen aus dem Zustand der Dichte n mit den anderen beiden Zuständen erlauben es die Breite des Plateaus gemäß

$$(\Delta h) = g \cdot \mu_B \cdot S \cdot \min(n' \cdot (h - h_{c1}) , n'' \cdot (h_{c2} - h)) \quad (1.5)$$

anzugeben, wobei wir hier für S_z den maximalen Drehimpuls in z-Richtung eingesetzt haben ($S_z = |\vec{S}| = S$), da Zustände mit dieser Quantenzahl im Magnetfeld die relevante Physik beschreiben. Wir kommentieren diesen Punkt in Kapitel 3 genauer.

Zu einem Plateau der Dichte n gibt es neben den Phasen der Dichte $n - n'$ und $n + n'$ auch andere Zustände mit derselben Dichte n . Diese Zustände liegen höher in der Energie und haben wegen der Zeeman-Aufspaltung dieselbe (lineare) Energieabhängigkeit im externen Feld und die (dichteabhängige) Steigung im externen Feld ist dieselbe wie im Plateau der Dichte n . Da diese angeregten Zustände den energetisch niedriger liegenden Spin-Dichte-Welle-Zustand des Plateaus nicht kreuzen können, spielen diese Zustände in der Physik der Plateaus keine weitere Rolle. Dabei kann der Energieunterschied eines Hochenergie-Zustandes und der Spin-Dichte-Welle des Plateaus beliebig klein sein.

Die Bestimmung des "richtigen" Plateaus einer gegebenen Dichte n ist nichttrivial, da in der Regel eine große Anzahl an Kandidaten für das Plateau vorliegen. Die Kandidaten unterscheiden sich nur in einer sehr kleinen Energieskala voneinander. Kleinste Quantenfluktuationen oder nicht bedachte Wechselwirkungen im System liegen typischerweise aber in der Energieskala der unterschiedlichen Plateaus bei Dichte n . Es sind deswegen hohe Energieauflösungen nötig, um

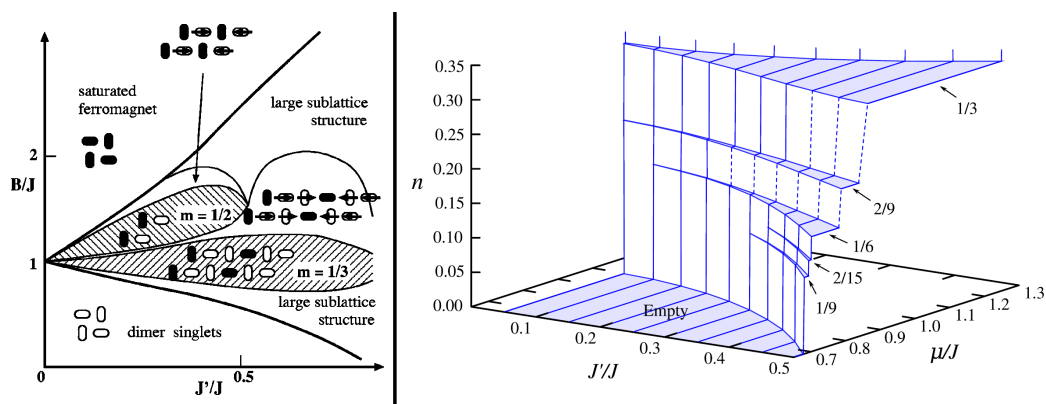


Abbildung 1.13: Zwei perturbativ berechnete Phasendiagramme des Shastry-Sutherland-Modells im Magnetfeld. Im linken Bild ist das Phasendiagramm aus Arbeit [85] gezeigt. Hier wird das effektive Modell bis zur dritter Ordnung abgeleitet und mit der klassischen Näherung gelöst. Im rechten Bild ist das Phasendiagramm aus Arbeit [87] zu sehen. Das Phasendiagramm ist mittels Reihenentwicklung in hohen Ordnungen und der klassischen Näherung bestimmt worden.

die energetischen Unterschiede der Kandidaten aufzulösen und den “wahren” Grundzustand zu finden.

Wir stellen nun einige Magnetisierungskurven aus den Arbeiten von Tabelle 1.1 genauer vor. Historisch und in Analogie zur Arbeit [54], beschäftigen sich die Autoren der Arbeiten [84] und [85] mit der Magnetisierung des Shastry-Sutherland-Modells mit Hilfe von effektiven Modellen. In der erstgenannten Arbeit [84] wird das effektive Modell bis Ordnung drei in J'/J abgeleitet und langreichweitige Wechselwirkungen werden über Yukawa-Potentiale ($V_{i,j}(\Delta\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j) = V_0 e^{\Delta\vec{r}/\eta} / \Delta\vec{r}$) ad hoc hinzugefügt. Dabei werden nur Dichte-Dichte-Wechselwirkungen ins effektive Modell aufgenommen, was die Autoren mit Arbeit [54] motivieren. Das effektive Modell wird in klassischer Näherung gelöst und mit ED-Ergebnissen im Spin-Modell verglichen, um Aussagen über das Phasendiagramm zu bekommen.

In der Magnetisierungskurve aus Arbeit [84] finden die Autoren Plateaus der Werte $1/8$, $1/6$, $1/4$, $1/3$ und $1/2$, wobei im Vergleich der Methoden nicht eindeutig festgestellt werden kann, ob das $1/6$ -Plateau ein Artefakt aufgrund endlicher Systemgrößen ist. Die anderen Plateaus werden als intrinsisch interpretiert, also im thermodynamischen Limes stabil. Yukawa-Wechselwirkungen sind wichtig, um auch die Plateaus kleinerer Dichten zu beschreiben, wie das $1/6$ und $1/8$ -Plateau. Die Abstände der Teilchen sind in diesen Dichten größer, als die Reichweite der Wechselwirkungen des betrachteten effektiven Modells. Die Wechselwirkungen, die bis Ordnung drei auftreten, sind daher nicht ausreichend, um die Strukturen in großen kommensurablen Strukturen eindeutig festzulegen. Vernachlässigen die Autoren die ad hoc eingeführten Yukawa-Terme, werden kein $1/8$ - oder $1/6$ -Plateau in der klassischen Rechnung stabilisiert. Das spricht dafür, dass langreichweitige Wechselwirkungen die Plateaus kleiner Dichten stabilisieren. Der bereits erwähnte Stabilisierungsmechanismus über (langreichweitige) Wechselwirkungen gilt analog für alle Plateaus unterhalb der Dichte $1/4$. Dieser Bereich ist erheblich durch die Minimierung von Wechselwirkungen bestimmt. Weiter finden die Autoren Plateaus der Dichte $1/4$, $1/3$ und $1/2$. Durch die ED stellen die Autoren fest, dass diese Plateaus durch Streifenstrukturen gegeben

sind. Dabei merken wir an, dass es sich um semiklassische Zustände handelt. Die Streifenstrukturen sind klassische Belegungen, ganz im Sinne der Spin-Dichte-Wellen. Betrachtet man aber die reinen Wechselwirkungskosten, so entsprechen die Streifenstrukturen angeregten Zuständen. Es können empirisch andere Spin-Dichte-Wellen gefunden werden, die eine geringere Energie haben, als die Streifen. Erst (Quanten-)Fluktuationen der Streifen müssen zu der Stabilisierung der gezeigten Spin-Dichte-Wellen aus Streifen als Grundzustand führen, was wir in Kapitel 4 explizit zeigen werden.

Die Arbeit [85] erweitert das Bild der starken Wechselwirkungen. Das effektive Modell wird hier durch entartete Störungsrechnung explizit in dritter Ordnung bestimmt. Es treten neben den starken repulsiven Wechselwirkungen auch korrelierte Hüpfsterme auf. Das effektive Modell wird mit Hilfe der klassischen Näherung gelöst. Das Phasendiagramm enthält ein Plateau der Dichte $1/2$ und $1/3$ und suprakristalline Phasen der gleichen Kommensurabilität (siehe linkes Bild in Abbildung 1.13). Mit gleicher Kommensurabilität meinen wir, dass die Dichte und die mikroskopische Struktur einer suprakristallinen Phase, adiabatisch zu einem Plateau verknüpft ist. In dieser Arbeit liegt z. B. bei der $1/3$ -suprakristallinen Phase ebenfalls an jedem dritten Dimer-Platz ein dominantes Triplet vor und die dominanten Triplets ordnen sich zu Streifen an, analog zum $1/3$ -Plateau. Durch den Einbezug der korrelierten Hüpfsterme haben sich suprakristalline Phasen im Phasendiagramm stabilisiert. Die Stabilisierung von suprakristallinen Phasen durch korreliertes Hüpfen ist ein Mechanismus, der bereits in einigen Arbeiten thematisiert wurde ([93] [94] [95]).

Weiter beschreiben die Autoren, dass ein $S_z = 2$ -Quintuplett-Zustand durch das korrelierte Hüpfen stabilisiert wird, da es zu einem effektiven Bindungseffekt kommt. Die Autoren sehen eine Verbindung zwischen der Kondensation dieser Mode (noch vor der Triplet-Lücke (siehe auch Kapitel 1.2.2)), mit dem nicht-linear steigenden Bereich der experimentellen Magnetisierungskurve. Die Autoren halten die Stabilität des Bindungszustandes aber nur für den Bereich sehr kleiner Dichten für relevant und sehen keinen Grund, warum das etablierte Bild der lokalisierten Triplets verändert werden sollte. Aktuelle theoretische Arbeiten zeigen dagegen, dass die Autoren von [85] den Bindungseffekt unterschätzen [92]. Das Bild von Plateaus aus lokalisierten Triplets beschreibt nicht grundlegend die Physik des Shastry-Sutherland-Modells im Magnetfeld, was wir in dieser Arbeit auf der 4-Bein-Röhre in Kapitel 5 explizit nachweisen.

Wir betrachten nun die Ergebnisse aus quantitativen effektiven Modellen. Dazu zeigen wir im Folgenden die Ergebnisse aus zwei Arbeiten. Mit der Herleitung eines effektiven Modells kann ein Zugang zu den langreichweitigen Wechselwirkungen gefunden werden, die nötig sind, um den Bereich kleiner Dichten zu beschreiben. Konkret handelt es sich bei den Methoden zur Ableitung eines effektiven Modells um die PCUT (perturbativ continuous unitary transformation) [87] und die Beschreibung des Systems mit CORE (contractor renormalization) [90].

Das Phasendiagramm der PCUT aus Arbeit [87] zeigen wir im rechten Teil von Bild 1.13. Dabei bestimmen die Autoren die Amplituden der Terme des effektiven Modells in Ordnung 14 und

lösen das effektive Modell dann mit der klassischen Näherung. Im Bereich kleiner Dichten stabilisieren die Wechselwirkungen verschiedene Plateaus großer Einheitszellen mit den Dichten $1/9$, $2/15$, $1/6$ und $2/9$. Interessant ist hier speziell, dass in dieser Arbeit damit die experimentellen Plateaus der Dichte $1/6$ und $2/15$ aus Arbeit [62] richtig vorhergesagt werden. Die klassische Lösung stabilisiert aber kein Plateau der Dichte $1/8$. Im Bereich mittlerer Dichten finden die Autoren ein $1/3$ -Plateau der bekannten Streifenstruktur, aber kein $1/4$ -Plateau. Dieser Befund wirft die Frage auf, ob die Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$ durch das Shastry-Sutherland-Modell stabilisiert werden können oder ob zusätzliche Wechselwirkungen im Material zur Stabilisierung dieser Plateaus führen. Die vorherigen Arbeiten haben das System auf endlichen Clustern diagonalisiert und die Plateaus könnten Artefakte aufgrund der endlichen Systemgröße sein, während die klassische Näherung (und auch das effektive Modell) im thermodynamischen Limes gültig sind. Die gleichen Autoren können in Arbeit [96] zusätzliche $SU(2)$ -invariante Wechselwirkungen einbeziehen und mit diesen Wechselwirkungen das Plateau der Dichte $1/8$ stabilisieren. Weiter können wir mit unserer Arbeit [97] ein $1/8$ -Plateau stabilisieren, indem wir die Zwischen-Dimer-DM-Wechselwirkung, über eine Molekularfeld-Rechnung in klassischen Spin-Dichte-Wellen, einbeziehen. Wir können mit der DM-Wechselwirkung auch das experimentelle Bild der inkommensurablen Überlagerung der Domänenwände zwischen den Dichten $1/6$ und $1/8$ bestätigen (siehe Kapitel 1.3). Betrachten wir das Ergebnis der Arbeit [87] also hinsichtlich der Magnetisierungskurve des Shastry-Sutherland-Modells, so scheint die Schlussfolgerung dieser Arbeit zu sein, dass der Mechanismus zur Stabilisierung der $1/8$ - und $1/4$ -Plateaus in zusätzlichen Kopplungen liegt.

Mit CORE kann man ein effektives Modell nicht-perturbativ ableiten [90]. Das effektive Modell wurde dann auf Clustern von etwa 30 Dimeren mittels ED diagonalisiert und die Autoren kontrollieren ihre Ergebnisse (soweit möglich) mit ED-Rechnungen auf endlichen Clustern mit dem ursprünglichen Shastry-Sutherland-Modell. Die Autoren finden Plateaus der Dichte $1/9$, $1/8$, $1/6$ und $2/9$, für das kleine Dichteregime. Im Bereich mittlerer Dichte findet sie die Plateaus der Dichte $1/4$ und $1/3$. Für den Bereich kleiner Dichten sagen die Autoren ebenfalls eine Ansammlung von Plateaus großer Einheitszellen voraus. Dabei sind die Plateaus der Dichte $1/6$ und $1/8$ mit dem Experiment [62] konform. Das Plateau der Dichte $2/15$ aus Arbeit [87] wird nicht gefunden, da es nicht auf die Cluster der Rechnung passt. Im Bereich mittlerer Dichte finden die Autoren ein Plateau der Dichte $1/4$ und stimmen damit mit früheren Arbeiten überein.

Aufgrund der inkonsistenten Aussagen der Ergebnisse, auf Grundlage von effektiven Modellen, können wir kein klares Bild des Phasendiagramms des Modells generieren. Daher kommen wir nun zu weiteren Methoden, wobei die folgenden Publikationen zeitlich parallel zu dieser Arbeit veröffentlicht wurden. Speziell können numerische Methoden, die unvoreingenommen auf Basis von allgemeingültigen Ansätzen arbeiten, wie Matrix-Produkt-Zustände oder Tensor-Netzwerk-Zustände (PEPS- oder MERA-Zustände), weitere Anhaltspunkte über die Magnetisierungskurve des Modells geben. Dabei wird in der Arbeit [81] die MERA-Methode (multi-scale entangled renormalization ansatz) genutzt, um die Magnetisierungskurve des Shastry-Sutherland-Modells zu bestimmen. Wir zeigen das Phasendiagramm auf der linken Seite von Bild 1.14. Auf der

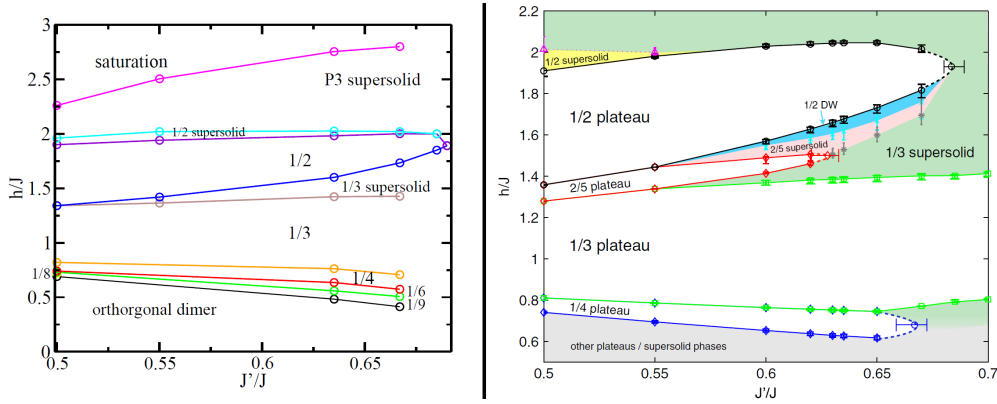


Abbildung 1.14: Zwei variationelle Phasendiagramme des Shastry-Sutherland-Modells im Magnetfeld. Im linken Bild ist das Phasendiagramm aus Arbeit [81] gezeigt, dass die MERA-Methode nutzt. Im rechten Bild sind die iPEPS-Resultate aus Arbeit [57] gezeigt.

rechten Seite von Bild 1.14 zeigen wir das Phasendiagramm der Arbeit [57], wobei die iPEPS-Methode angewendet wird.

Mittels der MERA-Rechnung [81] werden Plateaus der Dichte $1/9$, $1/6$, $1/4$, $1/3$ und $1/2$ bestimmt. Betrachtet man die mikroskopische Struktur der Plateaus, so findet man für die Plateaus mittlerer Dichte wieder Streifenstrukturen entlang einer der beiden Richtungen $\vec{\delta} = (\pm 1, 1)^T$. Die Plateaus kleinerer Dichte sind konsistent zu den klassischen Plateaus der Reihenentwicklungen, stabilisiert aufgrund der Minimierung von langreichweitigen Wechselwirkungen. Zwischen den Plateaus der Dichte $1/3$ und $1/2$ finden die Autoren eine suprakristalline Phase, mit einer Streifenstruktur analog zum $1/3$ -Plateau ($1/3$ -Suprakristall). Dem Plateau der Dichte $1/2$ folgt eine suprakristalline Phase mit der Struktur des $1/2$ -Plateaus ($1/2$ -Suprakristall) und dann wieder eine $1/3$ -suprakristalline Phase. Der Verlauf für mittlere Dichten wird im Wesentlichen durch die Arbeit [57] bestätigt. Das Regime kleiner Dichte wird in [57] nicht betrachtet. Die Phasendiagramme der iPEPS-Rechnung und der MERA-Rechnung stimmen bezüglich der kritischen Felder, die die Stabilitätsbereiche der Plateaus markieren, überein. Die mikroskopischen Strukturen (Streifen) aus der iPEPS decken sich mit den Beobachtungen aus Arbeit [81]. Auch die Stabilisierung der $1/3$ -suprakristallinen Phase zwischen den beiden Plateaus der Dichte $1/3$ und $1/2$ und nach dem Plateau der Dichte $1/2$, ist konsistent. Unterschiede gibt es in den Ausläufen der $1/2$ -suprakristallinen Phase und in der Anwesenheit eines Plateaus der Dichte $2/5$ für Kopplungskonstanten $J'/J < 0.625$. Allgemein zeigen aber beide Phasendiagramme suprakristalline Phasen im Phasendiagramm.

Im Experiment hatten wir Hinweise auf analoge Phasen gesehen. Diese Phasen zeigen eine kontinuierliche Veränderung der Dichte, wie supraflüssige Phasen, und gleichzeitig einen Bruch der Translationssymmetrie [62]. Die DM-Wechselwirkungen im System bricht die $U(1)$ -Symmetrie. Ein spontan symmetriebrochener Suprakristall kann im Material also nicht vorliegen und die genannten suprakristallinen Phasen sind theoretische Idealisierungen einer komplexeren Physik im Material. Trotzdem kann eine $SU(2)$ invariante Beschreibung aber typischerweise ein theoretisches Phasendiagramm bestimmen, das die quantitativen Eigenschaften des Materials erfasst, da die $U(1)$ -Symmetrie nur schwach gebrochen ist. Erst in der Analyse der mikroskopischen

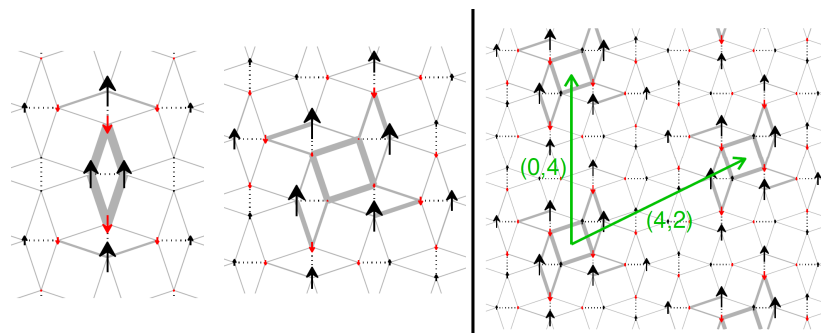


Abbildung 1.15: Wir fassen die interessantesten Ergebnisse aus [92] zusammen. Im linken Bild zeigen wir die typische Ein-Teilchen-Anregung, die in Plateau-Lösungen zu kommensurablen Quasi-Kristallen lokalisieren und das Windrad, das in dieser Arbeit den Baustein der quasi-kristallinen Plateaus formt. Wir zeigen im rechten Bild das $1/8$ -Plateau aus den Windrädern.

Struktur kann die $SU(2)$ gebrochene Natur des Materials ins Gewicht fallen, führt man einen experimentellen Strukturvergleich mit der Theorie durch.

Wir sprechen nun über einen möglichen Paradigmen-Wechsel in der Struktur der Plateaus im Regime kleiner Dichte, der aber völlig im Einklang ist mit der Analyse in dieser Arbeit. Dieser ist durch die iPEPS-Ergebnisse aus Arbeit [92] in Betracht zu ziehen. In der iPEPS gibt es einen intrinsischen Parameter D . Dieser Parameter ist zu Korrelationen, die im System betrachtet werden, äquivalent. Erhöht man diesen Parameter, so bezieht die Betrachtung mehr Korrelationen ein und das Ergebnis nähert sich der exakten Lösung. Auffällig ist, dass für das Shastry-Sutherland-Modell im Magnetfeld erst große Werte von $D \approx 10$ zu Konvergenz führen. Das Phasendiagramm zeigt hervorragende Übereinstimmung mit dem experimentellen Phasendiagramm. Es werden Plateaus der Dichte $1/8$, $2/15$, $1/6$, $1/5$ und $1/4$ aufgedeckt. Zwischen dem $2/15$ und $1/6$ sowie zwischen dem $1/6$ und $1/8$ werden Spin-Dichte-Wellen gemischter Strukturen gefunden. Unterhalb des $1/8$ -Plateaus liegen einige Plateaus kleinerer Dichte, die sehr schmal sind, u. a. ein Plateau der Dichte $1/9$.

Mikroskopisch sind die Plateaus aber nicht durch das bekannte Bild der Quasi-Kristalle aus Triplet-Anregungen gegeben. Die Autoren identifizieren einen gebundenen Zustand aus vier Spins $1/2$ zu einem $S = 2$ -Bindungszustand (mit $S_z = 2$) der im externen Magnetfeld relevant ist. In dieser Arbeit wird der gebundene Zustand auch als “Windrad” bezeichnet. Im linken Bild von Abbildung 1.15 stellen wir ein Windrad einer Ein-Teilchen-Anregung gegenüber. Alle Plateaus dieser Arbeit bestimmen sich mikroskopisch durch die Lokalisierung der Windräder zu kommensurablen Quasi-Kristallen. So ist speziell das $1/8$ -Plateau durch die kommensurable Struktur aus Windrädern gegeben, die wir im rechten Teil von Abbildung 1.15 zeigen. Die Bindungsenergie eines Windrades ist deutlich geringer als die Energie von zwei isolierten Triplet-Anregungen (für alle J'/J von 0 bis 0.7). Die Autoren sprechen die typischen Abschätzungen für die Bindungsenergie der gebundenen Zustände an (siehe z. B. Arbeit [85]). In diesen Abschätzungen werden die Effekte von korreliertem Hüpfen signifikant unterschätzt und die übliche Interpretation, dass gebundenen Zustände nur im verdünnten Limes relevant sind, wird mit den

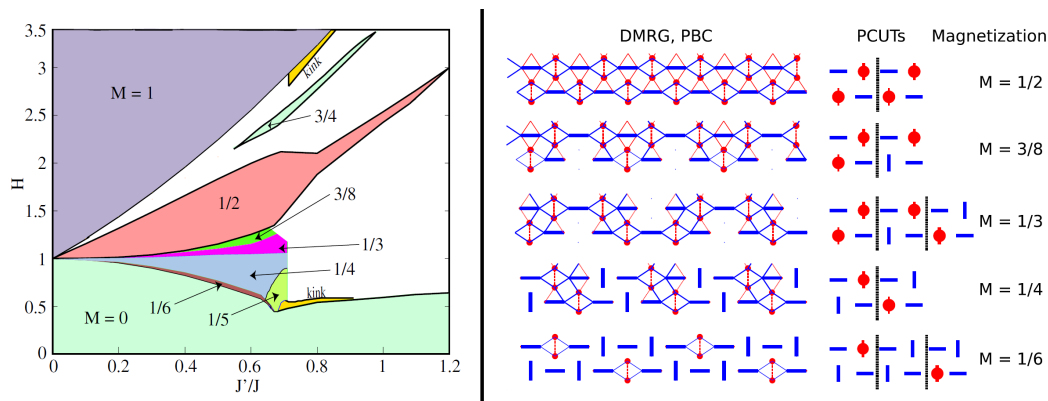


Abbildung 1.16: Das Phasendiagramm der Shastry-Sutherland-Zwei-Bein-Röhre, bestimmt durch DMRG, ist im linken Teil des Bildes gezeigt (siehe Arbeit [98]). Im rechten Bild sind die mikroskopischen Strukturen dieser Arbeit für einige Plateaus gezeigt, bestimmt mit DMRG und Reihenentwicklung in hoher Ordnung (PCUT). Das effektive Modell der PCUT wird dann mit der klassischen Näherung gelöst.

Ergebnissen dieser Arbeit widerlegt. Die Plateaus der Arbeit [92] sind als Quasi-Kristalle gegeben, die an kristallographisch äquivalenten Punkten einen gebundenen Zustand (ein Windrad) lokalisiert im System stabilisieren. Durch die neue elementare magnetische Anregung im System sind die Plateaus mit ungewöhnlichen rationalen Verhältnissen (z. B. das $2/15$ -Plateau) durch recht einfache Einheitszellen beschrieben.

Wir sehen, dass es sowohl im Bereich kleiner als auch mittlerer Dichten noch einige offene und spannende Fragen gibt. Um diese Punkte nun neu zu beleuchten, bietet sich nicht nur die Nutzung verschiedener Methoden an. Es kann auch günstig sein das System auf topologisch reduzierten Strukturen zu betrachten und eine erneute Untersuchung durchzuführen. Quasi-Eindimensionale Systeme haben den Vorteil, dass starke numerische Werkzeuge für eindimensionale Systeme verwendet werden können, wie z. B. die DMRG (Density Matrix Renormalization Group).

Eine Shastry-Sutherland-Kette enthält aufgrund der Frustration nur triviale Dynamik [99]. Die magnetischen Anregungen sind vollständig lokal und die Magnetisierungskurve wird durch einen devil's staircase beschrieben [99] (siehe Kapitel 1.3 für den devil's staircase). Die Shastry-Sutherland-2-Bein-Röhre entspricht der einfachsten, eindimensionalen Spezialisierung des zweidimensionalen Modells, ohne triviale Dynamik. Es handelt sich bei der Shastry-Sutherland-2-Bein-Röhre um ein System, das entlang einer Raumrichtung periodisch nach zwei Dimeren gekoppelt wird. Die Autoren von Arbeit [98] betrachten einen Vergleich numerischer Ergebnisse verschiedener Methoden für die Shastry-Sutherland-2-Bein-Röhre. Die erste Methode besteht in der Lösung des effektiven PCUT-Modells zu hoher Ordnung mit der klassischen Näherung. Überprüft wurden die Ergebnisse mit DMRG-Rechnungen auf Clustern bis zu 360 Spins. Wir zeigen das Phasendiagramm dieses Systems und eine Auswahl der Lösungen der Plateaus in Abbildung 1.16. Im Phasendiagramm sehen wir, dass im materialrelevanten Bereich von $J'/J \approx 0.6$ bis 0.65 , Plateaus der Dichte $1/6$, $1/5$, $1/4$, $1/3$, $3/8$ und $1/2$ stabilisiert werden. Im rechten Teil des Bildes 1.16 sehen wir, dass es sich in fast allen Fällen um "klassische" Plateaus handelt, die sich aus lokalisierten Triplet-Anregungen formen. Interessanterweise wird aber in der Arbeit auch

ein Plateau der Dichte $1/5$ gefunden, das nicht aus Triplett-Anregungen aufgebaut ist. In regelmäßigen Abständen lokalisiert im $1/5$ -Plateau ein gebundener Zustand aus drei Triplets, wobei der 3-Triplett-Zustand den Drehimpuls $S = 2$ besitzt. Historisch gesehen gibt dieser Befund zum ersten Mal einen Hinweis darauf, dass die typische Annahme, Plateaus im Shastry-Sutherland-Modell sind generell aus lokalisierten Triplett-Anregungen geformt, erweitert werden müsste. In dieser Dissertation werden wir ähnliche Feststellungen treffen und heben die Beobachtung der Arbeit [98] daher besonders hervor.

Wir fassen nun kurz die theoretischen Befunde zusammen und beginnen mit dem Bereich kleiner Dichten $n < 1/4$. Wir haben gesehen, dass ein wichtiger Mechanismus in diesem Bereich die Minimierung von (langreichweitigen) Wechselwirkungen ist. Diese können mit Hilfe von Reihenentwicklungen in hoher Ordnung erfasst werden. Aber wir haben in diesem Bereich keine konsistenten Ergebnisse der theoretischen Befunde untereinander gesehen. Vergleichen wir die theoretische Magnetisierungskurve der PCUT mit dem Experiment, so ist die PCUT unter allen Methoden die ein effektives Modell ableiten, am konsistentesten mit den Aussagen aus der experimentellen Arbeit [62]. Aber gerade das experimentell lang etablierte $1/8$ -Plateau wird nicht stabilisiert, während in der CORE-Rechnung dieses Plateau auftritt, aber z. B. das $2/15$ Plateau fehlt. Die Größenordnungen der langreichweitigen Wechselwirkungen, die die Physik beschreiben, liegen bei sehr kleinen Energieskalen.

Wir fügen hier hinzu, dass die quasi-eindimensionale Zwei-Bein-Rechnung für kleine Dichten einen möglichen Einfluss von Bindungszuständen offen lässt und dass DM-Wechselwirkungen Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment verursachen können. Die Frage nach der Form der Magnetisierungskurve des reinen Shastry-Sutherland-Modells ist im Bereich kleiner Dichten noch nicht zufriedenstellend beantwortet. Hier scheint das Phasendiagramm aus [92], das Plateaus aus lokalisierten Windrädern bestimmt, eine konsistente Erklärung für die Magnetisierungskurve des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ zu liefern.

Fassen wir die Ergebnisse für mittlere Dichten zusammen, so sind auch hier einige Fragen offen. Variationelle Rechnungen bestätigen, dass in diesem Bereich Plateaus und suprakristalline Phasen dominieren. Mikroskopisch sind diese Phasen aus Streifenstrukturen aufgebaut, wobei wir anmerken, dass die Literatur das korrelierte Hüpfen für die Streifenbildung verantwortlich sieht, aber eine explizite mikroskopische Rechnung fehlt in der Literatur. Die Unterschiede der Phasendiagramme für mittlere Dichten liegen meist in den genauen Ausdehnungen verschiedener Phasen, so dass es einen allgemeinen Konsens über die Phasen in diesem Bereich gibt.

1.7 Motivation und Gliederung

Die Übereinstimmungen zwischen dem Shastry-Sutherland-Modell und dem Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ sind sehr gut, betrachtet man die Grundzustandseigenschaften und das Verhalten der Anregungen. Die Physik wird vom Singulett-Grundzustand und der Triplett-Lücke bestimmt, wobei im Material die endliche Zwischen- und Inner-Dimer-DM-Wechselwirkung die einfache Physik

erweitern und zusätzliche Kinetik oder Mischungen der Singulett und Triplett-Zustände verursachen. Die Effekte der DM-Wechselwirkung führen zu einem komplexen Anregungsspektrum, da die Entartungen aufspalten. Im endlichen Feld spielt diese Komplexität keine Rolle. Soweit ist das magnetische Verhalten des Materials konsistent mit dem Bild einer endlichen Dichte von lokalisierten Triplett-Anregungen oder von lokalisierten Quintuplett-Anregungen, die wir als Windräder bezeichnet haben.

In der vorliegenden Arbeit interessieren uns die noch ungeklärte Plateau-Sequenz im Bereich kleiner Dichten für das Shastry-Sutherland-Modell. Wir versuchen die kontroverse Frage zu klären, ob die “richtige” Physik, die die Plateaus für kleine Dichten stabilisiert, bereits im reinen Shastry-Sutherland-Modell enthalten ist. Weiter interessiert uns besonders der physikalische Mechanismus, der die Streifenstrukturen im Bereich mittlerer Dichte stabilisiert. Ziel dieser Arbeit ist es, diese offenen Fragen anzugehen und zu erkennen, ob das Shastry-Sutherland-Modell diese Effekte intrinsisch beinhaltet und gegebenenfalls einfache Bilder der zugehörigen Mechanismen zu gewinnen.

Dazu soll das reine Shastry-Sutherland-Modell im Fokus stehen. Wir untersuchen das Modell auf einer reduzierten quasi-zweidimensionalen Topologie. Aus den Ergebnissen schließen wir dann auf das zweidimensionale Shastry-Sutherland-Modell. Dabei konzentrieren wir uns auf die Eigenschaften bei kleinen Dichten, wobei wir hier die Dichte $1/4$ als Repräsentant der Streifenstrukturen für mittlere Dichten zu diesen Bereich zählen.

Konkret analysieren wir im Folgenden das Shastry-Sutherland-Modell auf der 4-Bein-Röhre. Als quasi-eindimensionales System kann die 4-Bein-Röhre mit numerischen Werkzeugen behandelt werden, die auf eindimensionale Systeme spezialisiert sind. Das spannende Verhalten als Verbindung zwischen einer und zwei Dimensionen kann bestehende Bilder der Physik bestätigen oder neue Erklärungsansätze bieten. Die Möglichkeit, die Quasi-Eindimensionalität auszunutzen, um numerische Verfahren für eine Dimension zu nutzen, hat uns motiviert, PCUT und DMRG zu kombinieren, um kontrollierte Analysen des Systems zu ermöglichen. Die PCUT leitet ein effektives Modell für die 4-Bein-Röhre ab. Das effektive Modell lösen wir mit der klassischen Näherung und der ED. Ein Resultat dieser Analyse etabliert die Streifenstrukturen des mittleren Dichteregimes als Grundzustände der entsprechenden Dichten. Wir werden dieses Ergebnis dann aufgreifen, um mit der PCUT und geeigneten Referenz-Zuständen die Physik der Plateaus für das zweidimensionale Modell erfolgreich zu beschreiben. Dabei werden wir die Stabilitätsbereiche verschiedener Plateaus im Magnetfeld, speziell der Plateaus der Dichte $1/3$ und $1/2$, zu experimentellen Ergebnissen passend bestimmen.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert. Wir stellen die PCUT und die klassische Näherung in Kapitel 2 vor. In Kapitel 3 geben wir eine detaillierte Beschreibung der PCUT für das Shastry-Sutherland-Modell in der Dimer-Phase und stellen das effektive Modell vor. In Kapitel 4 lösen wir das effektive Modell mit der klassischen Näherung und vergleichen die Ergebnisse mit DMRG-Ergebnissen. Probleme werden auftreten, die eine ED Lösung des effektiven Modells motivieren. Wir beginnen dann im Kapitel 5 zunächst mit der Betrachtung des effektiven

Modells in Ordnung zwei. Dadurch lösen sich die Unterschiede zwischen DMRG und der klassischen Lösung des effektiven Modells in einer perturbativen Erklärung auf. Wir fahren dann mit ED des effektiven Modells fort und werden eine Übereinstimmung der ED-Lösungen mit der DMRG und den Erklärungen zu Beginn von Kapitel 5 sehen. In Kapitel 5 erweitern wir die Diagonalisierungsroutine zudem auf einen Lanczos-Algorithmus, der uns erlaubt, größere Systeme zu diagonalisieren. Wir diskutieren die Ergebnisse und stellen die Resultate wieder DMRG-Lösungen gegenüber. Im letzten Teil dieser Arbeit (Kapitel 6) beschreiben wir unsere Ergebnisse für das zweidimensionale Shastry-Sutherland-Modell, wobei wir uns im Speziellen die Stabilität verschiedener (Plateau-)Phasen ansehen. Unsere Prognosen für die Stabilität werden Ergebnissen aus anderen Methoden gegenübergestellt. Abschließend geben wir in Kapitel 7 eine Zusammenfassung dieser Arbeit und führen einen Ausblick auf künftige Projekte durch.

Kapitel 2

Methoden

Wir geben in diesem Kapitel eine kurze Zusammenfassung der theoretischen Werkzeuge an, die in dieser Arbeit angewendet wurden. Konkret stellen wir die perturbative kontinuierliche unitäre Transformation (PCUT, Kapitel 2.1) und die klassische Näherung (CA, Kapitel 2.2) vor.

Im Anhang dieser Arbeit diskutieren wir die Dichte-Matrix-Renormierungs-Gruppe (DMRG, Kapitel A.1) und die exakte Diagonalisierung mittels Lanczos-Verfahren (ED, Kapitel B.1).

2.1 Perturbative kontinuierliche unitäre Transformation (PCUT)

Die perturbative kontinuierliche unitäre Transformation (PCUT) ist ein effektives theoretisches Werkzeug, um eine Störungsreihen-Entwicklung zu sehr hohen Ordnungen zu erreichen. Die PCUT ist aber nur auf Systeme \mathcal{H}_0 mit einem (nach unten) beschränkten, äquidistanten Spektrum anwendbar. Methodisch besteht das Verfahren aus zwei Teilen. Der erste (modellunabhängige) Teil besteht aus der Herleitung eines allgemeingültigen effektiven Hamiltonoperators $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$. Wir sprechen auch die Herleitung einer allgemeingültigen effektiven Observablen $\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ an. Die effektiven Operatoren werden aus der Flussgleichung generiert. Die Flussgleichungen werden modellunabhängig gelöst und führen zu einem allgemeingültigen perturbativen Schema. Speziell der effektive Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ hat die Eigenschaft die Anzahl an Quasi-Teilchen bzw. Energiequanten zu erhalten. In einem äquidistanten Spektrum sind die Energie- und Quasi-Teilchen-Formulierungen vollständig äquivalent. Der modellabhängige Teil besteht darin, die nötigen Zutaten zur Anwendung der PCUT für ein konkretes Modell zu bestimmen. Für das Shastry-Sutherland-Modell werden wir den modellabhängigen Teil in Kapitel 3 beschreiben und durchführen.

Wir beschreiben den modellunabhängigen Teil in Abschnitt 2.1.1. Der so erhaltende teilchen-zahlerhaltende Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ kann dann dazu genutzt werden, ein effektives Modell für die unterschiedlichen Teilchen-Kanäle, speziell Null-Teilchen-Kanal (Grundzustand), Ein-Teilchen-Kanal und Zwei-Teilchen-Kanal zu bestimmen. Das genaue Vorgehen wird in Abschnitt

2.1.2 diskutiert. Ein großer Vorteil dieser Methode ist, dass die Ergebnisse im thermodynamischen Limes gewonnen werden. Dabei können die Rechnungen typischerweise auf einem endlichen System durchgeführt werden. Der Grund hierfür ist das Linked-Cluster-Theorem, welches besagt, dass nur sogenannte zusammenhängende Beiträge relevant sind. Diese zusammenhängenden Beiträge sind mit einer endlichen Längenskala verknüpft. Endliche Cluster mit einer Ausdehnung größer oder gleich dieser Skala, liefern clusterunabhängige, thermodynamisch korrekte Ergebnisse. Wir gehen in Kapitel 2.1.2 auf Details ein. Da es sich bei der PCUT um eine Reihenentwicklung handelt, die Störungsreihen in Form von Polynomen bestimmt, gehen wir in Kapitel C.1 des Anhangs zudem auf die Padé und Dlog-Padé-Extrapolation ein.

Wir stellen in den folgenden drei Unterkapiteln die methodischen Aspekte der PCUT nur zusammengefasst vor. Ausführlichere Beschreibungen können in den Doktorarbeiten [100] [101] [102] [103] [104] gefunden werden. Eine sehr ausführliche Zusammenfassung findet sich zudem in der Diplomarbeit [105]. Weiter weisen wir auf die Review-Veröffentlichungen [106] [107] über die CUT hin.

2.1.1 Effektiver Hamiltonoperator und effektive Observablen

Die Basis der im Folgenden vorgestellten PCUT-Methode ist die Idee der kontinuierlichen unitären Transformation, üblich abgekürzt mit CUT. Die CUT wurde unabhängig voneinander vorgeschlagen von Wegner [108] sowie Glazek und Wilson [109] [110]. Ein Hamiltonoperator \mathcal{H} soll diagonalisiert werden oder es soll zumindest eine Transformation gefunden werden, so dass der Hamiltonoperator $\mathcal{H}' = U \mathcal{H} U^\dagger$ "einfacher zu lösen" ist. U sei eine unitäre Transformation. Das Ergebnis wird typischerweise durch die sukzessive Anwendung von unitären Transformationen erreicht, die auf das gewünschte Ziel führen. Die unitäre Transformation U ergibt sich dadurch als das Produkt von Transformationen U_i über $U = U^{(m)} = U_1 U_2 \dots U_m$.

Die Idee von Wegner ist es nun, nur eine einzige Transformation durchzuführen, die das System kontinuierlich diagonalisiert oder vereinfacht. Dabei verstehen wir unter Vereinfachung im Folgenden eine Block-Diagonalisierung. Parametrisiert wird diese Transformation durch den Flussparameter $l \in [0, \infty[$ und die Transformation $U(l)$ mit

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}(l) \quad \text{für} \quad \mathcal{H}(l) = U(l) \mathcal{H} U^\dagger(l). \quad (2.1)$$

Die Transformation $U(l)$ ist abhängig vom kontinuierlichen Flussparameter l . $U(l)$ soll so konstruiert sein, dass der Flussparameter im Limes gegen unendlich auf das gewünschte Ziel $\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}(l = \infty)$ führt.

Wir definieren den infinitesimalen, antihermiteschen Erzeuger der Transformation $\eta(l)$, der das differentielle Verhalten der Transformation bezüglich des Flussparameters l beschreibt

$$\frac{dU}{dl} = \eta(l) U(l). \quad (2.2)$$

Betrachten wir Gleichung 2.1 für $l + dl$ und entwickeln um dl unter Berücksichtigung der Definition 2.2, so kann das infinitesimale Verhalten des Hamiltonoperators $\mathcal{H}(l)$ bezüglich des Flussparameters l , bestimmt werden zu

$$\frac{d\mathcal{H}(l)}{dl} = [\eta(l), \mathcal{H}(l)]. \quad (2.3)$$

Das ist die sogenannte Flussgleichung. Die Flussgleichung stellt eine Differentialgleichung für den Hamiltonoperator $\mathcal{H}(l)$ dar. Die Lösung der Differentialgleichung für $l \rightarrow \infty$ entspricht der geforderten unitären Transformation zu dem effektiven Hamiltonoperator \mathcal{H}_{eff} .

Die Wahl des Generators der Transformation (kurz der Generator) ist entscheidend für die Methode. Hier haben sich im Wesentlichen zwei Ansätze bewährt, namentlich der Wegner-Generator [108] und der MKU-Generator [111]. Wir beschreiben beide Generatoren und treffen dazu einige Definitionen. Wir nehmen eine geeignete Besetzungszahl-Basis $|\nu_i\rangle$ für den Hilbertraum des Hamiltonoperators \mathcal{H} an. Der Index i der Basis-Zustände unterscheidet hier die verschiedenen Zustände, die ansonsten noch beliebig sein sollen. Damit sind die Matrixelemente des Hamiltonoperators definiert über $h_{i,j} = \langle \nu_i | \mathcal{H} | \nu_j \rangle$. Diagonale Elemente bezeichnen wir mit ϵ_i , definiert über $\epsilon_i \equiv h_{i,i} = \langle \nu_i | \mathcal{H} | \nu_i \rangle$. Für den Wegner-Generator ist die Besetzungszahl-Basis beliebig und lokal kann ein (zunächst) beliebiges Spektrum vorliegen. Für den MKU-Generator nehmen wir an, dass jeder Platz im System mit Anregungen belegt werden kann und die Besetzungszahl-Basis die Anzahl der Teilchen an den Plätzen des Systems beschreibt. Dabei soll ein Zähleroperator Q definierbar sein, der die Anzahl der Anregungen im System zählt, so dass $Q|\nu_i\rangle = q_i|\nu_i\rangle$ gilt. Hier ist q_i die Anzahl der Anregungen im Basis-Zustand $|\nu_i\rangle$. Die Definition eines Zähleroperators für das globale System stellt eine Einschränkung an das Spektrum des Systems dar, auf die wir später noch eingehen werden.

Wir kehren nun zu der Definition der Generatoren zurück und mit den angesprochenen Vereinbarungen sind die Generatoren definiert als

$$\eta_{i,j}^{\text{Wegner}}(l) = (h_{i,i}(l) - h_{j,j}(l)) h_{i,j}(l) = (\epsilon_i(l) - \epsilon_j(l)) h_{i,j}(l) \quad (2.4)$$

$$\eta_{i,j}^{\text{MKU}}(l) = \text{sgn}(q_i(l) - q_j(l)) h_{i,j}(l) \quad . \quad (2.5)$$

Wird die Flussgleichung unter Nutzung der definierten Generatoren $\eta_{i,j}^{\text{Wegner}}(l)$ oder $\eta_{i,j}^{\text{MKU}}(l)$ aufgestellt und numerisch gelöst, ergibt sich daraus bereits ein Verfahren zur Lösung von Problemen [112]. Dabei ist zu beachten, dass es sich hierbei um eine Differentialgleichung auf Operator-Level handelt, d. h. die Matrixelemente $h_{i,j}(l)$ sind eine Abfolge von Erzeuger- (b_i^\dagger) und Vernichter-Operatoren (b_i). Beachten wir, dass die Generatoren in die Flussgleichung eingesetzt werden müssen, so sehen wir, dass die Differentialgleichung für ein Matrixelement $d(h_{i,j}(l))/dl$ durch eine Kommutation (von Erzeuger- und Vernichter-Operatoren) gegeben ist. Typischerweise entstehen aber beim Kommutieren der Operatoren b_i^\dagger und b_i neue Terme für den Hamiltonoperator $\mathcal{H}(l)$, die zuvor nicht enthalten sind. Die Differentialgleichung für einen neuen Term kann aber wieder durch eine Kommutation bestimmt werden. Dies führt aber auch wieder auf neue Terme, so dass die Differentialgleichungen normalerweise nicht geschlossen sind.

Um die CUT zu verwenden muss typischerweise ein Trunkierungsschema genutzt werden, um das Differentialgleichungssystem zu schließen. Bekannte Trunkierungsschemen sind das (physikalisch motivierte) Vernachlässigen von (neu entstandenen) Termen [113], eine Reduktion auf bestimmte Terme [114] oder die Herleitung einer selbstähnlichen Differentialgleichung (SCUT) [115] [116]. Dabei wird in der SCUT zu Beginn eine Operator-Basis gewählt und die Flussgleichung 2.3 wird in der Operator-Basis formuliert [117]. Dadurch wird bereits methodisch eine Selbstkonsistenz erzeugt, die die Differentialgleichungen geschlossen hält, denn Operator-Terme im Hamiltonoperator und im Generator werden als Linearkombinationen der Operator-Basis dargestellt. Die Flussgleichung reduziert sich auf ein Differentialgleichungs-System für die Koeffizienten der Linearkombinationen, die numerisch gelöst werden muss.

Trotz der Erfolge der CUT, gibt es auch einige Probleme dieser Methode, die Erweiterungen motivieren. Bereits in seiner ursprünglichen Arbeit [108] hat Wegner Probleme festgestellt, wenn der effektive Hamiltonoperator Entartungen enthält. Allgemein diagonalisiert der Wegner-Generator das Problem dann nicht, sondern führt auf eine block-diagonale Gestalt. Auf der anderen Seite können im Wegner-Generator bereits vorhandene block-diagonale Strukturen verloren gehen. Der effektive Hamiltonoperator würde eine ggf. gewünschte einfache Struktur verlieren. Der Verlust von block-diagonalen Strukturen tritt im Fluss des Parameters l des MKU-Generators nicht auf. Dieser Generator erhält im Fluss block-diagonale Strukturen [111]. Andererseits hat dieser Generator aber den Nachteil, dass das System immer auf eine block-diagonale Gestalt gebracht wird und eine vollständige Diagonalisierung des Hamiltonoperators intrinsisch nicht erreicht werden kann.

Ein weiteres Problem ist das Trunkierungsschema, das nicht intrinsisch in der Methode verankert ist, sondern problembezogen oder ab initio gewählt wird. Es existiert keine methodische Kontrolle darüber, inwiefern die Trunkierung die Physik beeinflusst. Die Trunkierungen sind eher als Ansatz zu verstehen, das Problem auf eine Gestalt zu bringen, die lösbar Differentialgleichungen liefert. Durch eine ungeschickte Wahl der Trunkierung kann eine falsche Physik zum Vorschein kommen oder der trunkierte effektive Hamiltonoperator vernachlässigt sogar relevante Effekte des Systems ganz oder teilweise.

Diese Probleme können mit Hilfe einer perturbativen Lösung der CUT, der sogenannten PCUT, behoben werden. Dazu stellen wir zuerst die Anforderung, dass sich der Hamiltonoperator über den störungstheoretischen Ansatz

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V} \tag{2.6}$$

schreiben lässt. Der sogenannte Stör-Hamiltonoperator \mathcal{V} soll eine kleine Störung zum exakt bekannten System \mathcal{H}_0 darstellen. Für die PCUT werden wir den Störterm \mathcal{V} und den Generator der PCUT als Reihe im Störparameter λ ansetzen. Dies wird zu einem Trunkierungsschema bezüglich der Ordnung im Parameter λ führen. Der ungestörte Hamiltonoperator \mathcal{H}_0 soll in Diagonalgestalt vorliegen und ein von unten beschränktes, äquidistantes Spektrum haben.

Da das Spektrum äquidistant ist, reduziert sich die Bestimmung der Energie eines Eigenzustandes von \mathcal{H}_0 auf das Abzählen der Energiequanten, wobei wir o.B.d.A. den Zustand mit null (ohne) Quanten als tiefsten Zustand (Grundzustand von \mathcal{H}_0) annehmen. Wir erinnern an die eben getroffene Definition des Zähl-Operators Q ($Q|\nu_i\rangle = q_i|\nu_i\rangle$). Da ein Zähl-Operator definiert sein soll, können wir den MKU-Generator η^{MKU} als Ansatz für die Flussgleichung nutzen, denn der MKU-Generator ist gerade über einen Zähloperator Q definiert. Sei das Energiequant von \mathcal{H}_0 auf 1 normiert und die Grundzustandsenergie auf Null gelegt, haben die Zustände des ungestörten Systems die erlaubten Energien $E_i^{(0)} = i$, wobei $i \in 0, 1, 2, \dots$ gilt.

In Gleichung 2.6 stellt \mathcal{V} die Störung dar. Wirkt die Störung auf einen Eigenzustand von \mathcal{H}_0 , so kann die Störung Terme enthalten, die die Anzahl der Energiequanten erhöht oder verringert. Die Beschreibung des Gesamt-Systems über den Zähl-Operator Q bleibt erhalten. Weiter können Terme auftreten, die die Energiequanten im System auf andere Gitterplätze verschieben, so dass die Zahl der Quanten aber nicht geändert wird.

Für die PCUT nehmen wir weiter an, dass die Wirkung der Störung auf Zustände des ungestörten Systems \mathcal{H}_0 , höchstens $\mathcal{N} \in \mathbb{N}$ Energiequanten hinzufügen oder entfernen kann. Dann kann die Störung aufgespalten werden in Bestandteile T_m mit $m \in -\mathcal{N}, \dots, \mathcal{N} - 1, \mathcal{N}$. Der Operator T_m enthält alle Terme von \mathcal{V} , die genau m Energiequanten (für positives m) hinzufügen oder (für negatives m) entfernen. Formal schreibt sich die Störung damit

$$\mathcal{V} = \sum_{m=-\mathcal{N}}^{\mathcal{N}} T_m \quad \text{mit} \quad [\mathcal{H}_0, T_m] = m T_m \quad . \quad (2.7)$$

Mit diesen Anforderungen können wir nun die PCUT formulieren. Wir wählen den folgenden störungstheoretischen Ansatz für den (effektiven) Hamiltonoperator der PCUT $H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$, indem wir die folgende Reihenentwicklung im Störparameter λ ansetzen

$$H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} = E_0 + Q + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{|\mathbf{m}|=k} F(l, \mathbf{m}) T(\mathbf{m}) \quad . \quad (2.8)$$

Der ungestörte Hamiltonoperator \mathcal{H}_0 wird zunächst in die ungestörte Grundzustandsenergie E_0 und den zuvor definierten Zähl-Operator Q aufgespalten, so dass $\mathcal{H}_0 = E_0 + Q$ gilt. Der Operator Q zählt wie angesprochen die Anzahl der Quasi-Teilchen bzw. Energiequanten im System. Dabei soll für die PCUT im Folgenden eine modellunabhängige Formulierung hergeleitet werden. Für die PCUT muss die Energieskala der Energiequanten normiert sein, damit dieses Ziel erreicht werden kann. Wir erinnern, dass ein normierter Zähl-Operator Q die Werte $Q = i$ mit $i \in 0, 1, 2, \dots$ annimmt.

Für eine gegebene Ordnung k besteht der Ansatz 2.7 darin, jede Kombination aus k T_m -Operatoren zu generieren. Die Störung \mathcal{V} spaltet diesbezüglich entsprechend Gleichung 2.7 in $2\mathcal{N} + 1$ verfügbare T_m -Operatoren auf. Die Reihenfolge der k Operatoren ist mit $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_k)$ zusammengefasst und der Operator $T(\mathbf{m})$ beschreibt die iterative Anwendung der entsprechenden k T_m -Operatoren ($T(\mathbf{m}) = T_{m_1} T_{m_2} \dots T_{m_k}$). Die Operator-Sequenz $T(\mathbf{m})$ besteht aus k

Operatoren, was im Ansatz 2.8 durch die Notation $|\mathbf{m}| = k$ beschrieben wird. Wir bezeichnen die absolute Anzahl an erzeugten oder vernichteten Energiequanten mit $M(\mathbf{m}) = \sum_{i=1}^k m_i$, so dass $[\mathcal{H}_0, T(\mathbf{m})] = [Q, T(\mathbf{m})] = M(\mathbf{m})T(\mathbf{m})$ gilt.

Motiviert ist der Ansatz 2.8 dadurch, dass die Flussabhängigkeit der Beiträge $T(\mathbf{m})$ in einen Vorfaktor $F(l, \mathbf{m})$ geschoben wird. Werden die Koeffizienten $F(l, \mathbf{m})$ zu allen Operator-Sequenzen $T(\mathbf{m})$ bis zu einer endlichen Ordnung k_{\max} bestimmt, ergibt sich zudem ein intrinsisches Trunkierungsschema. Dazu werden alle Operator-Sequenzen $T(\mathbf{m})$ höherer Ordnung vernachlässigt. Unter Sequenzen höherer Ordnung versteht man alle Sequenzen $T(\mathbf{m})$ die $|\mathbf{m}| > k_{\max}$ erfüllen. Dieses Trunkierungsschema ist zudem noch völlig modellunabhängig und in der Methode verankert. An dieser Stelle sei kurz die epCUT (enhanced perturbative continuous unitary transformation) erwähnt [118]. Dieser Lösungs-Algorithmus der CUT formuliert den störungstheoretischen Ausgangspunkt nach Formel 2.6 wie die PCUT ebenfalls in zweiter Quantisierung. Damit ergeben sich physikalische Resultate ebenfalls als Reihen in einem Entwicklungsparameter, der eine intrinsische Trunkierung der Methode erlaubt. Soweit verläuft der Algorithmus der epCUT analog zur PCUT. Dabei wird die Flussgleichung, wie in der SCUT in einer Operator-Basis formuliert. Jeder Operator der Basis wird mit einer Störungs-Ordnung in Verbindung gebracht. Ein Koeffizienten-Vergleich bezüglich des Störparameter führt dann, wie in der SCUT, zu einem Differentialgleichungssystem für die Koeffizienten der Linearkombinationen der Terme des Hamiltonoperators und des Generators in der Operator-Basis. Dadurch wird eine Trennung des Teilchen-Begriffs von der Energie erzeugt und auch Systeme ohne äquidistantes Spektrum können beschrieben werden. Die epCUT verliert aber den Vorteil, eine (zunächst) modellunabhängige Beschreibung zu erlauben.

Nachdem wir nun eine modellunabhängige Darstellung erreicht haben, widmen wir uns der Bestimmung der Koeffizienten $F(l, \mathbf{m})$. Diese leiten wir über die Flussgleichung 2.3 her. Dazu müssen wir uns noch Gedanken über einen passenden Generator machen. Wir haben bereits einige Male betont, dass es sehr günstig ist, die band-diagonale Gestalt des ungestörten Hamiltonoperators \mathcal{H}_0 zu bewahren, um ein effektives Modell in den separaten Teilchenkanälen herzuleiten. Dies wird aber gerade vom MKU-Generator η^{MKU} 2.4 geleistet, der hier verwendet werden kann, da ein Zähleroperator Q definiert ist. Der wesentlich Punkt des MKU-Generators besteht in der Nutzung der sgn-Funktion, die als Ansatz im Generator eine solche Trennung der einzelnen Teilchenkanäle leistet. Weiter haben wir die Flussabhängigkeit in den Koeffizienten $F(l, \mathbf{m})$ geschoben. Damit wir Differentialgleichungen für diese Koeffizienten bestimmen können, muss der Generator ebenfalls als Summe der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen angesetzt werden. So kann man über einen Koeffizientenvergleich der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen auf beiden Seiten der Flussgleichung 2.3 die gesuchten Gleichungen der Koeffizienten $F(l, \mathbf{m})$ ableiten. Zusammenfassend nimmt man die Reihendarstellung des MKU-Generators [119]

$$\eta(l) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{|\mathbf{m}|=k} \text{sgn}(M(\mathbf{m})) F(l, \mathbf{m}) T(\mathbf{m}) \quad (2.9)$$

als Ansatz. Setzen wir nun die Ansätze 2.8 und 2.9 in die Flussgleichung 2.3 ein, können wir den Koeffizientenvergleich der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen auf beiden Seiten der Flussgleichung durchführen. Die Differentialgleichung der Koeffizienten $F(l, \mathbf{m})$ lautet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl} F(l, \mathbf{m}) &= -|M(\mathbf{m})| F(l, \mathbf{m}) \\ &+ \sum_{[\mathbf{m}_A, \mathbf{m}_B]=\mathbf{m}} (\text{sgn}(M(\mathbf{m}_A)) - \text{sgn}(M(\mathbf{m}_B))) F(l, \mathbf{m}_A) F(l, \mathbf{m}_B) \quad . \end{aligned} \quad (2.10)$$

Wir sehen an Gleichung 2.10, dass es sich um eine rekursive Differentialgleichung handelt. Die Ergebnisse der Koeffizienten $F(l, \mathbf{m}_A)$ und $F(l, \mathbf{m}_B)$ müssen vorliegen, wobei sich die Sequenzen \mathbf{m}_A und \mathbf{m}_B aus der Zerlegung der Sequenz \mathbf{m} nach dem Schema

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= (m_1, m_2, \dots, m_k) \quad \text{Zerlegungen:} \\ \mathbf{m}_A &= (m_1); \quad \mathbf{m}_B = (m_2, m_3, \dots, m_k) \\ \mathbf{m}_A &= (m_1, m_2); \quad \mathbf{m}_B = (m_3, \dots, m_k) \\ &\dots\dots\dots \\ \mathbf{m}_A &= (m_1, \dots, m_{k-2}); \quad \mathbf{m}_B = (m_{k-1}, m_k) \\ \mathbf{m}_A &= (m_1, \dots, m_{k-1}); \quad \mathbf{m}_B = (m_k) \end{aligned} \quad (2.11)$$

ergeben. Die Anfangsbedingungen lauten $F(l=0, \mathbf{m}) = 1$, wenn die Sequenzen \mathbf{m} im ursprünglichen Hamiltonoperator bereits vorliegen, und $F(l=0, \mathbf{m}) = 0$ sonst (siehe auch Gleichungen 2.6 und 2.7). Mit diesen Anfangsbedingungen entspricht der Startwert des Flusses dem ursprünglichen Hamiltonoperator $\mathcal{H}(l=0) = \mathcal{H}$.

Wir gehen auf die weiteren Zwischenschritte zur Lösung der Differentialgleichungen der Koeffizienten $F(l, \mathbf{m})$ nicht ein und verweisen auf die genannte Literatur ([100] [101] [102] [103] [104] [105]). Weiter sei daran erinnert, dass wir am Verhalten der Koeffizienten für $l \rightarrow \infty$ interessiert sind und daher die Koeffizienten $C(\mathbf{m}) = F(l = \infty, \mathbf{m})$ definieren. Wir zeigen in Tabelle 2.1 die Koeffizienten $C(\mathbf{m})$ für eine Störung mit $\mathcal{N} = 1$ bis zur vierten Ordnung ($|\mathbf{m}| \leq 4$) als Beispiel für Lösungen der Differentialgleichungen. Im Limes $l = \infty$ schreibt sich der effektive Hamiltonoperator dann

$$H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} = E_0 + Q + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{|\mathbf{m}|=k, M(\mathbf{m})=0} C(\mathbf{m}) T(\mathbf{m}) \quad . \quad (2.12)$$

Wir wiederholen, dass der effektive Hamiltonoperator die Anzahl der Quasi-Teilchen erhält, wobei dies aus unserer Generatorwahl folgt. Alle Koeffizienten $C(\mathbf{m})$ von \mathbf{m} -Sequenzen mit $M(\mathbf{m}) \neq 0$ sind Null. Im effektiven Hamiltonoperator sind also nur noch \mathbf{m} -Sequenzen vertreten, die die Anzahl der Quasi-Teilchen erhalten, d. h. $M(\mathbf{m}) = 0$ erfüllen. Dies ist eine Folge der Konstruktion der PCUT. Dieses Transformationsverhalten wird in den Arbeiten [112] und [119] detailliert diskutiert.

Die Lösung der Differentialgleichung 2.10 für einen Koeffizienten $F(l, \mathbf{m})$ und der anschließende

Ordnung	\mathbf{m}	$C(\mathbf{m})$	Ordnung	\mathbf{m}	$C(\mathbf{m})$
1	(0)	+1	4	(+1,0,-1,0)	-1
2	(+1,-1)	+1	4	(0,+1,-1,0)	+1/2
3	(+1,0,-1)	+1	4	(+1,-1,0,0)	+1/4
3	(+1,-1,0)	-1/2	4	(+1,-1,+1,-1)	-1
4	(+1,0,0,-1)	+1	4	(+1,+1,-1,-1)	+1/2

Tabelle 2.1: Die nicht-verschwindenden Koeffizienten $C(\mathbf{m})$ der PCUT bis Ordnung vier für $\mathcal{N} = 1$. Wir haben die Tabelle aus Quelle [112] übernommen. In dieser Arbeit werden auch die Auswirkung von Symmetrien der \mathbf{m} -Sequenzen auf die Koeffizienten $C(\mathbf{m})$ diskutiert. Die Tabelle ist daher nicht vollständig, denn aus den Symmetrierelationen bestimmen sich die nicht gezeigten \mathbf{m} -Sequenzen. Für $\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_k)$ definieren wir die Sequenzen $\tilde{\mathbf{m}} = (m_k, \dots, m_1)$ und $-\mathbf{m} = (-m_1, \dots, -m_k)$. Die Symmetrierelationen lauten $C(-\tilde{\mathbf{m}}) = C(\mathbf{m})$ und $C(-\mathbf{m}) = (-1)^{|\mathbf{m}|+1}C(\mathbf{m})$.

Limes $l = \infty$, bestimmt die Koeffizienten $C(\mathbf{m})$ immer zu einer rationalen Zahl. Dies kann exemplarisch in Tabelle 2.1 gesehen werden. Wir erinnern, dass die Anzahl der Koeffizienten $C(\mathbf{m})$ bzw. der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen aus Permutationen herrühren, die die Nebenbedingung $M(\mathbf{m}) = 0$ erfüllen. Typischerweise führt dies zu einem exponentiellen Anstieg der Anzahl an Termen mit steigender Ordnung. Weiter erhöht sich die Anzahl der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen drastisch, wenn die Zerlegung der Störung \mathcal{V} in T_m -Terme (2.7) eine große Variation an Energiequanten bewirken kann. Das ist gleichbedeutend mit einem hohen Wert für \mathcal{N} . In dieser Arbeit werden insbesondere die Koeffizienten für $\mathcal{N} = 1$ relevant sein (siehe Kapitel 3). Hier kann das exponentielle Wachstum beispielhaft beschrieben werden. Während Tabelle 2.1 zeigt, dass die Anzahl an Sequenzen in niedrigen Ordnungen in $O(10)$ liegen, so existieren in Ordnung 12, 13, 14 und 15 etwa 4000, 11000, 30000 und 80000 Terme.

Wir gehen nun darauf ein, wie aus einer Observablen \mathcal{O} , die effektive Observable $\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ im Schema der PCUT bestimmt werden kann (siehe auch [120] [121]). Die Ideen und Ansätze, die zur Transformation der Observablen führen, sind analog zur Transformation des Hamiltonoperators (siehe 2.8 und 2.9). Die Flussentwicklung eines Operators ist wieder durch die Flussgleichung bestimmt [120]

$$\frac{\partial \mathcal{O}(l)}{\partial l} = [\eta(l), \mathcal{O}(l)]. \quad (2.13)$$

Der Generator der PCUT ist bereits aus Gleichung 2.9 bekannt und wir setzen die Observable wieder als Störungsreihe der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen im Parameter λ an

$$\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \sum_i^{k+1} \sum_{|\mathbf{m}|=k} G(l, \mathbf{m}, i) \mathcal{O}(\mathbf{m}, i). \quad (2.14)$$

Die Flussabhängigkeit ist erneut in den Koeffizienten $G(l, \mathbf{m}, i)$ enthalten. Weiter sei auf die Erweiterung hingewiesen, dass wir keine $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen ansetzen, sondern $\mathcal{O}(\mathbf{m}, i)$ -Sequenzen. Hierbei handelt es sich um $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen, wobei wir an der Stelle i die ungestörte Observable

einfügen. Entsprechend sind die $\mathcal{O}(\mathbf{m}, i)$ -Sequenzen definiert als

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\mathbf{m}, i) &= T_{m_1} \cdots T_{m_{i-1}} \mathcal{O} T_{m_i} \cdots T_{m_k} \quad \text{für } \mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_k) \Leftrightarrow \\ \mathcal{O}(\mathbf{m}, i) &= T(\mathbf{m}_L) \mathcal{O} T(\mathbf{m}_R) \quad \text{für } \mathbf{m} = (\mathbf{m}_L, \mathbf{m}_R) \quad \text{mit} \\ \mathbf{m}_L &= (m_1, \dots, m_{i-1}) \quad |\mathbf{m}_L| = i - 1 \quad \text{und} \quad \mathbf{m}_R = (m_i, \dots, m_k) \quad |\mathbf{m}_R| = k - (i - 1) \quad . \end{aligned} \quad (2.15)$$

Der Startwert ist $\mathcal{O}(l = 0) = \mathcal{O}$ und die effektive Observable ergibt sich im Limes $l \rightarrow \infty$. Die Differentialgleichungen für die Koeffizienten $G(l, \mathbf{m}, i)$ können erneut bestimmt werden, indem der Ansatz für den Generator (2.9) und der Ansatz für die Observable (2.14) in die Flussgleichung eingesetzt werden (2.13). Da die Definition der effektiven Observablen $\mathcal{O}(\mathbf{m}, i)$ nun zwei Sequenzen aus Operatoren ($T(\mathbf{m}_L)$ und $T(\mathbf{m}_R)$) enthält, haben wir diese Einteilung in Gleichung 2.15 mit $\mathbf{m} = (\mathbf{m}_L, \mathbf{m}_R)$ abgekürzt. Mit dieser Definition lauten die Differentialgleichungen der Koeffizienten $G(l, \mathbf{m}, i)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial l} G(l, \mathbf{m}, i) &= \sum_{\mathbf{m}_L=(\mathbf{m}_{LA}, \mathbf{m}_{LB}), \mathbf{m}_{LA} \neq \emptyset} \text{sgn}(M(\mathbf{m}_{LA})) F(l, \mathbf{m}_{LA}) G(l, (\mathbf{m}_{LB}, \mathbf{m}_R), i - |\mathbf{m}_{LA}|) \\ &- \sum_{\mathbf{m}_R=(\mathbf{m}_{RA}, \mathbf{m}_{RB}), \mathbf{m}_{RB} \neq \emptyset} \text{sgn}(M(\mathbf{m}_{RB})) F(l, \mathbf{m}_{RB}) G(l, (\mathbf{m}_L, \mathbf{m}_{RA}), i) \quad . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Es handelt sich wie beim Hamiltonoperator um eine rekursive Gleichung. Die Koeffizienten $F(l, \mathbf{m})$ in dieser Gleichung sind aus der Herleitung des effektiven Hamiltonoperators bekannt. Ebenso verläuft die Aufteilung einer \mathbf{m} -Sequenz in zwei Teile $\mathbf{m} = (\mathbf{m}_A, \mathbf{m}_B)$ analog, wie in der Rechnung für den Hamiltonoperator. Hier ist darauf zu achten, dass in der ersten Summe die Sequenz \mathbf{m}_{LB} leer sein darf, genauso wie die Sequenz \mathbf{m}_{RA} in der zweiten Summe. Wir verweisen für die Lösungen dieser Gleichungen wieder auf die Details der Arbeiten [120] [121].

Definieren wir nun den Koeffizienten $\hat{\mathcal{C}}(\mathbf{m}, i) := G(l = \infty, \mathbf{m}, i)$ für den Limes $l = \infty$ des Flussparameters, schreibt sich die effektive Observable als

$$\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \sum_i \sum_{|\mathbf{m}|=k} \hat{\mathcal{C}}(\mathbf{m}, i) \mathcal{O}(\mathbf{m}, i). \quad (2.17)$$

An dieser Stelle sei betont, dass auch die Bestimmung der Koeffizienten $\hat{\mathcal{C}}(\mathbf{m}, i)$ ein modellunabhängiger Schritt der Methode ist. Weiter handelt es sich bei den Lösungen für die Koeffizienten $\hat{\mathcal{C}}(\mathbf{m}, i)$ wieder um rationale Zahlenwerte.

Die effektive Observable $\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ erhält die Teilchenzahl nicht. Oft ist deswegen eine Aufspaltung der Observablen \mathcal{O} in die Energiequanten erhöhenden und verringernden Bestandteile sinnvoll, analog der Zerlegung der Störung in Gleichung 2.7. So können die Sequenzen in der effektiven Observablen $\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ nach der Anzahl von erzeugten oder vernichteten Energiequanten sortiert werden. Wir definieren nun die Zerlegung der ungestörten Observablen

$$\mathcal{O} = \sum_{m=-\mathcal{N}'}^{\mathcal{N}'} T'_m \quad \text{mit} \quad [\mathcal{H}_0 T'_m] = m T'_m \quad . \quad (2.18)$$

In dieser Gleichung bezeichnet \mathcal{N}' die maximale Anzahl an Energiequanten, die die Observable \mathcal{O} durch eine Anwendung erzeugen oder vernichten kann.

Die effektive Observable $\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ zeigt, genau wie der effektive Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$, eine exponentiell anwachsende Anzahl an Sequenzen mit steigender Ordnung. Da die Nebenbedingung nicht greift, dass nur teilchenzahlerhaltende Sequenzen beitragen, erhöht sich für ein gegebenes \mathcal{N} aber die Anzahl der Terme nochmal erheblich.

2.1.2 Herleitung effektiver Modelle und effektiver Observablen

Wir treffen nun einige vereinfachende Annahmen an das ungestörte System \mathcal{H}_0 . Diese Annahmen werden die folgenden Betrachtungen auf das Wesentliche lenken. Die allgemeingültigen Aussagen werden bei Verallgemeinerungen der System-Eigenschaften des ungestörten Systems \mathcal{H}_0 nicht betroffen. Zunächst haben wir bereits im vorherigen Unterkapitel angesprochen, dass die Operatoren der CUT in der Besetzungszahl-Basis mit lokalen Erzeuger- (b_i^\dagger) und Vernichter-Operatoren (b_i) geschrieben werden. Wir haben durch den störungstheoretischen Ansatz 2.6 und der geforderten diagonalen Struktur des ungestörten Hamiltonoperators bereits die Quasi-Teilchen-Anregungen definiert. Der effektive Hamiltonoperator der PCUT soll daher aus lokalen Erzeuger-Operatoren b_i^\dagger und Vernichter-Operatoren b_i der Quasi-Teilchen-Anregungen des ungestörten Systems aufgebaut sein. Die vereinfachende Annahme ist hier, dass es nur ein Quasi-Teilchen gibt. Prinzipiell kann ein ungestörtes Spektrum mehrere Teilchen-Anregungen zeigen, die sich in einem Flavour oder einer Quantenzahl unterscheiden. Wir vernachlässigen diesen Freiheitsgrad, da die folgenden Definitionen analog erweitert werden können. Weiter gehen wir von Hardcore-Bosonen aus, d. h. dass sich auf jedem Platz \vec{i} maximal eine bosonische Anregung befinden kann.

Wir gehen nun auf die allgemeine Struktur des effektiven Hamiltonoperators ein. Dieser ist über Gleichung 2.12 als Summe über $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen gegeben. Die Bestandteile einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz sind die Operatoren T_m , die in der Zerlegung der Störung auftreten. Die T_m -Operatoren lassen sich über die lokalen Erzeuger- und Vernichter-Operatoren aufschreiben. Dabei liegen die T_m -Operatoren in normalgeordneter Form vor. Wir erinnern daran, dass eine $T(\mathbf{m})$ -Sequenz als Produkt mehrerer T_m -Operatoren gegeben ist. Da die T_m -Operatoren normalgeordnet sind, kann eine $T(\mathbf{m})$ -Sequenz demnach nicht normalgeordnet sein. Wir können aber die verschiedenen $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen durch Nutzung der bosonischen Vertauschungsrelationen für Hardcore-Bosonen

$$\left[b_{\vec{i}}, b_{\vec{j}}^\dagger \right] = \delta_{\vec{i}, \vec{j}} \left(1 - 2 b_{\vec{i}}^\dagger b_{\vec{i}} \right) = \delta_{\vec{i}, \vec{j}} \left(1 - 2 n_{\vec{i}} \right) \quad \text{und} \quad \left[b_{\vec{i}}^\dagger, b_{\vec{j}}^\dagger \right] = \left[b_{\vec{i}}, b_{\vec{j}} \right] = 0 \quad (2.19)$$

in eine normalgeordnete Form bringen. Der Operator $n_{\vec{i}} = b_{\vec{i}}^\dagger b_{\vec{i}}$ ist der Zähloperator. Der präsentierte Kommutator nutzt, dass wir nur die Anwesenheit des Teilchens als Freiheitsgrad haben. Wir verweisen für mehr Details oder weiterführende Informationen zum Kommutator von Hardcore-Bosonen auf die allgemeineren Aussagen in Arbeit [122], wo Gleichung 2.19 z. B. auf Teilchen mit verschiedenen Flavourn verallgemeinert wird.

Die $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen erhalten die Anzahl der Quasi-Teilchen, d. h. das System ist blockdiagonal in der Anzahl der Quasi-Teilchen. Diese Eigenschaft bedingt, dass der effektive Hamiltonoperator $H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$, ohne zunächst konkret auf die Normalordnung einzugehen, die folgende globale Struktur haben muss

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \dots \quad (2.20)$$

Diese Schreibweise greift auf, dass ein quasi-teilchenzahlerhaltender Hamiltonoperator eine Summe aus teilchenzahlerhaltenden Mehrteilchen-Operatoren \mathcal{H}_n sein muss. Konkret bezeichnet ein Summand \mathcal{H}_n alle irreduziblen n -Teilchen-Operatoren, die wir nun genauer definieren werden.

Explizit schreiben sich die irreduziblen n -Teilchen-Operatoren aus Gleichung 2.20 als

$$\mathcal{H}_0 := E_0 \quad (2.21)$$

$$\mathcal{H}_1 := \sum_{\vec{i}_1, \vec{j}_1} A_{\vec{i}_1}^{\vec{j}_1} b_{\vec{j}_1}^\dagger b_{\vec{i}_1} \quad (2.22)$$

$$\mathcal{H}_2 := \sum_{\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{j}_1, \vec{j}_2} A_{\vec{i}_2, \vec{i}_1}^{\vec{j}_2, \vec{j}_1} b_{\vec{j}_1}^\dagger b_{\vec{j}_2}^\dagger b_{\vec{i}_2} b_{\vec{i}_1} \quad (2.23)$$

$$\mathcal{H}_n := \sum_{\{\vec{i}\}_n, \{\vec{j}\}_n} A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n} b_{\vec{j}_1}^\dagger \cdots b_{\vec{j}_n}^\dagger b_{\vec{i}_n} \cdots b_{\vec{i}_1} \quad (2.24)$$

$$= \sum_{\vec{i}_1, \dots, \vec{i}_n, \vec{j}_1, \dots, \vec{j}_n} A_{\vec{i}_n, \dots, \vec{i}_1}^{\vec{j}_n, \dots, \vec{j}_1} b_{\vec{j}_1}^\dagger \cdots b_{\vec{j}_n}^\dagger b_{\vec{i}_n} \cdots b_{\vec{i}_1} \quad (2.25)$$

Diese Darstellung des effektiven PCUT-Hamiltonoperators entspricht der allgemeinsten Struktur eines effektiven PCUT-Hamiltonoperators. Die Normalordnung bedingt, dass in einem Beitrag aus \mathcal{H}_n die n Erzeuger-Operatoren immer links von den n Vernichter-Operatoren stehen.

Die normalgeordnete Struktur bewirkt, dass es sich bei einem Summanden in dem n -Teilchen-Operator \mathcal{H}_n um irreduzible Anteile handelt. Dies kann trivial durch die Wirkung dieser Operatoren gesehen werden. Betrachten wir einen Zustand mit weniger als n Teilchen, so sorgen die zuerst angewendeten Vernichter-Operatoren dafür, dass ein Vernichter-Operator auf ein Platz ohne Teilchen wirkt und der Beitrag dieses Operators verschwindet. Erst wenn mindestens n Teilchen in einem Zustand vorhanden sind, kann die Wirkung der irreduziblen Operatoren \mathcal{H}_n einen endlichen Beitrag liefern. Physikalisch beschreiben die Summanden mit endlichem Beitrag daher n -Teilchen-Prozesse. Wie beschrieben kann durch Kommutationen der effektive Hamiltonoperator 2.12 in die Form 2.21 gebracht werden. Wir machen diesbezüglich nun einige Anmerkungen.

Wir gehen davon aus, dass der effektive Hamiltonoperator 2.12 bis zu einer bestimmten Ordnung x_{MAX} im Störparameter λ abgeleitet wurde. Dies bedingt, dass in den irreduziblen n -Teilchen-Operatoren \mathcal{H}_n (aus Gleichung 2.21) nur eine endliche Anzahl an Summanden eine endliche Amplitude haben können. Damit ist also die Summe in den n -Teilchen-Operatoren \mathcal{H}_n endlich. Um dies plausibel zu machen sei zuerst angemerkt, dass wir in einer endlichen Ordnung, nur endlich viele $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen finden. Wir begründen nun die endliche Anzahl der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen, indem wir an die Flussgleichung 2.3 erinnern. Hier haben wir den effektiven

Hamiltonoperator und den Generator als Summe der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen angesetzt. Setzen wir die Ansätze für Hamiltonoperator und Generator in die Flussgleichung ein, so werden im Wesentlichen also $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen miteinander kommutiert. Haben die beiden Sequenzen keine Erzeuger- und Vernichter-Operatoren an gemeinsamen Plätzen, kommutieren diese Terme. Eine $T(\mathbf{m})$ -Sequenz, die als Resultat der beiden kommutierenden $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen gegeben ist, tritt im effektiven Hamiltonoperator 2.12 der endlichen Ordnung x_{MAX} daher nicht auf.

Damit ist klar, dass es nur eine endliche Anzahl an $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen geben kann. Gehen wir von Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen im ursprünglichen Hamiltonoperator aus, so greift ein T_m -Operator einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz immer auf zwei Indizes von benachbarten Plätzen zu. Aufgrund der eben beschriebenen Kommutationen, zeigen die Indizes aller Summanden einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz eine einschränkende Eigenschaft, die direkte Konsequenz der Kommutation ist. Ein Index oder beide Indizes eines T_m -Operators greift immer auf Plätze zu, die bereits von einem zuvor angewendeten T_m -Operator berührt wurden. Dabei beinhaltet der erste T_m -Operator einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz noch den beliebigen Index i , der über alle Plätze des Systems summiert wird.

Wir betonen, dass wir in Gleichung 2.12 noch nicht auf die endliche Zahl von Beiträgen einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz eingegangen sind. Die $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen aus Gleichung 2.12 sind über das Produkt der T_m -Operatoren beschrieben, die selbst noch Summen über alle Gitterplätze beinhalten. Diese allgemeine Definition enthält aber noch viele unnötige Terme, die nicht beitragen. Definieren wir für eine $T(\mathbf{m})$ -Sequenz nun, dass nur relevante Beiträge beachtet werden, so sprechen wir von einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz aus zusammenhängenden Clustern. Diese Bezeichnung ist dadurch motiviert, dass die Wirkung einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz aus zusammenhängenden Clustern nur Beiträge zeigt, die ein zusammenhängendes Cluster auf dem System beschreiben. Wir gehen auf diesen Punkt später noch genauer ein und nehmen hier jedoch vorweg, dass aus den eben genannten Gründen einzig zusammenhängende Cluster zur PCUT beitragen. Das bedeutet, dass die PCUT ein cluster-additives Verfahren ist und deswegen mit Methoden der Linked-Cluster-Entwicklung behandelt werden kann.

In der endlichen Anzahl an $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen liegt zudem eine weitere wichtige Beobachtung. Betrachten wir einen Gitterplatz \vec{i} , der in einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz angesprochen wird, so greifen die anderen Erzeuger- und Vernichter-Operatoren dieser Sequenz nur auf Gitterplätze zu, die höchstens n -fache Nächste-Nachbarn des Platzes \vec{i} sind. Betrachten wir ein effektives Modell in einer endlichen Ordnung, so haben die $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen aus zusammenhängenden Clustern nur eine endliche Reichweite. Dieses Argument motiviert uns im Verlauf dieses Unterkapitels, eine Beschreibung auf endlichen Systemen durchzuführen. Die endliche Reichweite der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen kann auf endlichen Systemen vollständig berücksichtigt werden.

Wir gehen nun darauf ein, für welche Amplituden $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ in Gleichung 2.21 die $C(\mathbf{m})$ -Koeffizienten der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen relevant sind. Dazu betrachten wir noch einmal die bosonischen Vertauschungsrelation und gehen von dem Fall aus, dass keine Doppelbesetzungen vorliegen. Dann

reduziert sich der Kommutator für Hardcore-Boson auf die bosonische Kommutatorrelation

$$b_{\vec{i}} b_{\vec{j}}^{\dagger} = \delta_{\vec{i},\vec{j}} - 2n_{\vec{i}} + b_{\vec{j}}^{\dagger} b_{\vec{i}} \quad . \quad (2.26)$$

Kommutieren wir in einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz einen Erzeuger- und Vernichter-Operator am selben Platz, so trägt die Amplitude $C(\mathbf{m})$ der $T(\mathbf{m})$ -Sequenz in einer n -Teilchen-Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ bei. Weiter gibt es durch die Kommutation einen Summanden (proportional zur Identität), der weder Erzeuger- noch Vernichter-Operatoren am Ort \vec{i} enthält. Dieser Term führt dazu, dass der Koeffizient $C(\mathbf{m})$ in einer $(n-1)$ -Teilchen-Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_{n-1}}^{\{\vec{j}\}_{n-1}}$ des Summanden \mathcal{H}_{n-1} beiträgt. Dies kann nun iteriert werden und wir sehen, dass eine $T(\mathbf{m})$ -Sequenz einen Beitrag zu allen irreduziblen n -Teilchen-Operatoren \mathcal{H}_n liefern kann. Dabei werden wir noch erläutern, dass eine $T(\mathbf{m})$ -Sequenz der Ordnung $|\mathbf{m}|$ höchstens $|\mathbf{m}|+1$ -Teilchen-Prozesse hervorbringen kann mit dem Teilchenkanal $n = |\mathbf{m}|+1$. Dabei ist dies ein allgemeines Phänomen, dass bei der Normalordnung auftritt.

Wie beschrieben kann durch die Normalordnung des Hamiltonoperators 2.12 das effektive Modell in der Darstellung der irreduziblen Anteile erreicht werden. Wir merken an, dass dies auf Operator-Level durch analytisches oder numerisches Kommutieren erreicht werden kann. Typischerweise ist es aber auf Operator-Level sehr aufwendig auf diese Weise die gesuchten Amplituden $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ zu bestimmen. Typischerweise ist es hingegen wesentlich leichter, die Wirkung der Operatoren \mathcal{H}_n auf Zustände zu nutzen. Wir haben bereits angedeutet, dass die $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen eine Summe aus zusammenhängenden Prozessen endlicher Reichweite darstellen. Wir können demnach den Hamiltonoperator 2.12 als Ansatz nehmen und die unbekannt Amplituden auf endlichen Systemen bestimmen. Konkret werden wir dazu Matrixelemente definieren und mit den Matrixelementen die Amplituden aus dem Ansatz 2.21 bestimmen. Es ist genauer gesagt möglich, die Wirkung der Operatoren auf Zustände hinreichend großer endlicher Cluster zu betrachten, um die Amplituden $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ zu bestimmen. Wir beschreiben im Folgenden ein Schema, wie wir die nötigen Kommutationen alternativ durch Rechnungen auf endlichen Clustern beschreiben können.

Wir geben die Eigenzustände des ungestörten Systems \mathcal{H}_0 in der Fock-Basis an. Ein lokaler Zustand auf einem Platz \vec{i} ist vollständig durch die Besetzung beschrieben. Dabei ist die Besetzung entweder $n_{\vec{i}} = 0$ oder $n_{\vec{i}} = 1$, aufgrund der hardcore-bosonischen Eigenschaften. Der Dichte-Operator $n_{\vec{i}} = b_{\vec{i}}^{\dagger} b_{\vec{i}}$ gibt die Besetzung am Platz \vec{i} an. Die Notation der Zustände lautet $|\{\vec{i}\}_n\rangle$, wobei die n Positionen \vec{i}_k ($k \in 1, \dots, n$) die Positionen der Teilchen im System angeben. Wir definieren die reduzierte Schreibweise für die Eigenzustände des ungestörten Hamiltonoperators H_0 daher als

$$|0\rangle \quad \text{Grundzustand bzw. Teilchen-Vakuum} \quad (2.27)$$

$$|\vec{i}_1\rangle \quad \text{Zustand mit einem Teilchen am Platz } \vec{i}_1 \quad (2.28)$$

$$|\vec{i}_1 \vec{i}_2\rangle \quad \text{Zustand mit zwei Teilchen an den Plätzen } \vec{i}_1 \text{ und } \vec{i}_2 \quad (2.29)$$

$$|\{\vec{i}\}_n\rangle \quad \text{Zustand mit } n \text{ Teilchen an den Plätzen } \vec{i}_1, \vec{i}_2, \dots, \vec{i}_n \quad . \quad (2.30)$$

Diese Notation fasst wie beschrieben die Eigenzustände von \mathcal{H}_0 kompakt zusammen. Wir erinnern daran, dass in der PCUT die Zerlegung $\mathcal{H}_0 = E_0 + Q$ eingeführt wurde und unter den genannten Vereinbarungen gilt $Q|\{\vec{i}\}_n\rangle = n|\{\vec{i}\}_n\rangle$.

Mit diesen Definitionen können wir nun ein Schema entwickeln, um eine Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ aus den irreduziblen Beiträgen \mathcal{H}_n aus Gleichung 2.21 zu bestimmen. Dabei lässt sich eine Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ mit einem konkreten Matrixelement auf einem geeigneten endlichen Cluster in Verbindung bringen. Wir definieren das volle Matrixelement $A_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$, aus dem wir die Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ bestimmen werden, als

$$A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n} \leftrightarrow \langle \{\vec{j}\}_n | \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} | \{\vec{i}\}_n \rangle = A_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} \quad . \quad (2.31)$$

Für unser Schema sei erwähnt, dass $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ aus Definition 2.12 (Summe aller $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen) zu nutzen ist. In einer konkreten Rechnung ergibt sich damit das Matrixelement $A_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ als Störungsreihe im Parameter λ . Um nun die gesuchte Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ zu bestimmen, berechnen wir das Matrixelement erneut mit dem Ansatz 2.21. Aus dem Ansatz folgt, dass sich das Matrixelement als Summe verschiedener Amplituden aus 2.21 bestimmt. Dazu erinnern wir daran, dass der effektive Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ eine Summe der irreduziblen Teilchen-Operatoren ist. Aufgrund der Normalordnung tragen aus dem Ansatz 2.21 aber nur Amplituden aus irreduziblen m -Teilchen-Operatoren \mathcal{H}_m für $m \leq n$ bei.

Die Wahl der Zustände $|\{\vec{j}\}_n\rangle$ und $|\{\vec{i}\}_n\rangle$ für das Matrixelement $A_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ aus Gleichung 2.31 bewirkt, dass aus dem irreduziblen n -Teilchen-Summanden \mathcal{H}_n nur die Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ beiträgt. Der volle Beitrag $A_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ ist daher eine Summe aus der gesuchten Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$ und weiteren Amplituden. Die weiteren Amplituden folgen aus der Wirkung der m -Teilchen-Operatoren \mathcal{H}_m ($m < n$). Da wir aber konkrete Zustände nutzen, können die ebenfalls unbekanntenen Amplituden aus den m -Teilchen-Operatoren \mathcal{H}_m rekursiv durch Zustände bestimmt werden, die nur die Plätze der m -Teilchen Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_m}^{\{\vec{j}\}_m}$ belegen. Wir werden dieses Schema im Folgenden formal notieren.

Durch die Einführung von Matrixelementen haben wir direkten Zugriff auf die noch unbekanntenen Amplituden $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n}$. Dazu subtrahieren wir von dem vollen Matrixelement 2.31 alle Amplituden, die nicht aus dem n -Teilchen-Operator \mathcal{H}_n kommen. Diese Amplituden $A_{\{\vec{i}\}_m}^{\{\vec{j}\}_m}$ gehören zu m -Teilchen-Operatoren und können rekursiv bestimmt werden, indem das passende Matrixelement zwischen den $|\{\vec{j}\}_m\rangle$ und $|\{\vec{i}\}_m\rangle$ berechnet wird. Das volle Matrixelement aus den Zuständen $|\{\vec{j}\}_m\rangle$ und $|\{\vec{i}\}_m\rangle$ ist wieder eine Summe aus der gesuchten Amplitude $A_{\{\vec{i}\}_m}^{\{\vec{j}\}_m}$ und weiteren Amplituden aus kleineren Teilchenkanälen. Dieses Schema kann bis zum Null-Teilchen-Beitrag iteriert werden und damit haben wir ein Subtraktionsschema definiert, dass die irreduziblen Amplituden über Matrixelemente auf endlichen Clustern bestimmt.

Wir betrachten ein Rechen-Cluster \mathcal{Q} , dass wir zur Vereinfachung als periodisch annehmen. Dieses Rechen-Cluster hat eine räumliche Ausdehnung in allen Raumdimensionen, die immer

größer ist, als die Ordnung die wir betrachten, denn so passt die Reichweite des Hamiltonoperators aufgrund der Nächste-Nachbar-Wechselwirkung auf das Rechen-Cluster. Auf dieses Cluster lassen wir den Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ wirken. Da der effektive Hamiltonoperator quasiteilchenzahlerhaltend ist, kann der Hamiltonoperator die Teilchen lediglich auf andere (oder die gleichen) Plätze verschieben. Nutzen wir dies, zusammen mit den Zuständen definiert in 2.27, ergeben sich die folgenden Matrixelemente für das Cluster \mathcal{Q}

$${}^{\mathcal{Q}}E_0 := \langle 0 | \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} | 0 \rangle \quad (2.32)$$

$${}^{\mathcal{Q}}A_{\vec{i}_1}^{\vec{j}_1} := \langle \vec{j}_1 | \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} | \vec{i}_1 \rangle \quad (2.33)$$

$${}^{\mathcal{Q}}A_{\vec{i}_2, \vec{i}_1}^{\vec{j}_2, \vec{j}_1} := \langle \vec{j}_1 \vec{j}_2 | \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} | \vec{i}_1 \vec{i}_2 \rangle \quad (2.34)$$

und analoge Definitionen für höhere Teilchen-Kanäle. Wir merken an, dass die Zustände auf der rechten Seite entsprechend auf dem endlichen Cluster \mathcal{Q} definiert sind.

Die Matrixelemente 2.32-2.34 entsprechen nun den vollen Matrixelementen, die wir zuvor immer als $A_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ bezeichnet haben. Damit schreibt sich das Subtraktionsschema als (siehe auch Quelle [123])

$$E_0 = {}^{\mathcal{Q}}E_0 \quad (2.35)$$

$$A_{\vec{i}_1}^{\vec{j}_1} = {}^{\mathcal{Q}}A_{\vec{i}_1}^{\vec{j}_1} - {}^{\mathcal{Q}}E_0 \delta_{\vec{j}_1, \vec{i}_1} := A_{\delta_{\vec{j}_1 - \vec{i}_1}}^{\delta_{\vec{j}_1 - \vec{i}_1}} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} A_{\vec{i}_2, \vec{i}_1}^{\vec{j}_2, \vec{j}_1} &= {}^{\mathcal{Q}}A_{\vec{i}_2, \vec{i}_1}^{\vec{j}_2, \vec{j}_1} - A_{\vec{i}_1}^{\vec{j}_1} \delta_{\vec{j}_2, \vec{i}_2} - A_{\vec{i}_2}^{\vec{j}_2} \delta_{\vec{j}_1, \vec{i}_1} - A_{\vec{i}_2}^{\vec{j}_1} \delta_{\vec{j}_2, \vec{i}_1} - A_{\vec{i}_1}^{\vec{j}_2} \delta_{\vec{j}_1, \vec{i}_2} \\ &\quad - {}^{\mathcal{Q}}E_0 \delta_{\vec{j}_1, \vec{i}_1} \delta_{\vec{j}_2, \vec{i}_2} - {}^{\mathcal{Q}}E_0 \delta_{\vec{j}_2, \vec{i}_1} \delta_{\vec{j}_1, \vec{i}_2} := A_{\delta_{\vec{j}_2 - \vec{i}_1}, \delta_{\vec{j}_1 - \vec{i}_1}}^{\delta_{\vec{j}_2 - \vec{i}_1}, \delta_{\vec{j}_1 - \vec{i}_1}}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Der Unterschied zwischen der vollen Amplitude aus dem Hamiltonoperator 2.12 und der irreduziblen Amplitude für den n -Teilchen-Beitrag im thermodynamischen Limes haben wir hier festgehalten, indem die irreduzible Amplitude den Index des Clusters \mathcal{Q} nicht tragen.

Bevor wir nun Kommentare zum Subtraktionsschema machen, betrachten wir zuerst die endlichen Rechen-Cluster \mathcal{Q} . Wir haben in den Gleichungen 2.35-2.37 zunächst eine Notation eingeführt, die nur sinnvoll ist, wenn das betrachtete Cluster translationsinvariant ist. Es sei erwähnt, dass in diesem Fall ein zweiter Cluster $\mathcal{Q}' > \mathcal{Q}$, dieselben irreduziblen Amplituden liefert. Praktisch kann durch Variation der Rechen-Cluster \mathcal{Q} überprüft werden, ob das Rechen-Cluster (bzw. die Rechnung) den thermodynamischen Limes einfängt, denn die Ergebnisse müssen unabhängig vom Rechen-Cluster sein. Das bedeutet auch, dass nur der relative Abstand der Belegungen $\{\vec{i}\}_n$ und $\{\vec{j}\}_n$ die Amplitude bestimmt. Die konkrete Belegung der Plätze ist physikalisch nicht relevant. Der irreduzible Beitrag ist vollständig definiert, greifen wir o.B.d.A \vec{i}_1 heraus und definieren die restlichen Plätze über ihren räumlichen Abstand zu diesem Platz. Diese Korrespondenz haben wir in 2.35 und 2.37 als Definition eingeführt.

Wir merken an, dass zur Bestimmung der irreduziblen n -Teilchen-Amplituden auch Rechen-Cluster \mathcal{Q} mit offenen Randbedingungen verwendet werden können. Dabei ist in der Rechnung darauf zu achten, dass die n belegten Plätze des Zustandes $\{\vec{i}\}_n$ hinreichend weit vom Rand

des Clusters entfernt sind. Trifft ein Beitrag einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz, der für die irreduzible Amplitude relevant ist, auf den Rand des Clusters, so wird ein Prozess des endlichen Systems beschrieben. Dieser Beitrag ist im thermodynamischen Limes nicht enthalten und der Beitrag verfälscht das Ergebnis der irreduziblen n -Teilchen-Amplitude. Um solche (meist) ungewollten Randeffekte auszuschließen, haben wir in dieser Arbeit, außer anders beschrieben, immer auf periodischen Clustern \mathcal{Q} gerechnet. Dabei kann allerdings auch auf periodischen Clustern ein ähnliches Problem auftreten. Wenn das Rechen-Cluster \mathcal{Q} zu klein gewählt wurde und ein zusammenhängender Prozess einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz das System vollständig in einer Raumdimension umschließt, entsteht ebenfalls ein Prozess des endlichen Clusters \mathcal{Q} .

Wir sehen, dass die Wahl des Clusters gegebenenfalls das Ergebnis verfälscht. Dabei können die Ergebnisse auf ihre Gültigkeit überprüft werden, indem Cluster \mathcal{Q} verschiedener Größe zur Bestimmung der irreduziblen n -Teilchen-Amplituden genutzt werden. Ist das Ergebnis unabhängig vom Cluster, so sind alle thermodynamisch relevanten Beiträge richtig erfasst. Hier ist aber auf das Problem einzugehen, dass sich die Größe des Clusters typischerweise exponentiell auf die Rechenzeit und den Speicher einer Rechnung auswirkt. Eine Möglichkeit hier methodisch dieses Problem zu umgehen, ist eine sogenannte Graphen-Zerlegung. Die Idee ist, die Rechnungen nicht auf einem endlichen Cluster durchzuführen, sondern eine Abstraktions-Stufe höher Graphen zu verwenden. Die CUT wird dann auf allen relevanten, endlichen Graphen angewendet und die Graphen müssen dann auf das Gitter eingebettet werden, das man beschreiben möchte [124]. Die Graphen-Zerlegung mit der CUT wird bereits auf dem Niveau der Flussgleichung eingeführt. So kann ein Graphen-basiertes CUT-Verfahren zur Bestimmung effektiver Modelle bestimmt werden, das in der Literatur als gCUT bekannt ist [125] [126]. Die gCUT arbeitet nicht-perturbativ und die Graphen-Zerlegung liefert ein methodisch verankertes Trunkierungsschema, ähnlich wie in der PCUT.

Wir kehren nun zum Subtraktionsschema zurück. Die Definitionen der Gleichungen 2.35-2.37 für höhere Teilchenkanäle sind analog. Betrachtet man die Reduktion auf einen m -Teilchen-Beitrag, so ist jede Permutation zu berücksichtigen, m ununterscheidbare Teilchen aus den n belegten Plätzen des Anfangszustandes, auf m Plätze aus den n Plätzen des Endzustandes, zu verteilen. Dabei sprechen wir hier die Verallgemeinerung nur an, dass die Positionen $\{\vec{i}\}_n$ um Flavour und andere Quantenzahlen erweitert werden können, wobei sich keine in diesem Unterkapitel getroffene Aussage ändert.

Das eben definierte Subtraktionsschema 2.35 -2.37 haben wir hier im Speziellen aus den Eigenschaften der PCUT gefolgert. Dabei haben wir motiviert, dass die Rechnungen auf Operator-Level zu umständlich sind und haben danach die Bestimmung des effektiven Hamiltonoperators 2.21 über Matrixelemente präsentiert. Dies hat uns zum gezeigten Subtraktionsschema geführt, dass wir für Matrixelemente auf endlichen Clustern formuliert haben. Dieses Subtraktionsschema kann aber auch allgemeiner auf Operator-Level (siehe auch [123]) bestimmt werden. Die Gültigkeit dieses Subtraktionsschemas auf Operator-Level wird zudem expliziter für den Null- und Ein-Teilchen-Raum in den Arbeiten [127] und [128] gezeigt. Weiter wird der Zusammenhang des Subtraktionsschemas und der irreduziblen Zwei-Teilchen-Amplituden in den Arbeiten [129]

[82] [130] [131] aufgegriffen und ausführlicher diskutiert. Ein wichtiger Begriff ist hierbei die Cluster-Additivität. Erfüllt eine perturbative Methode diese Eigenschaft, so können irreduzible Terme definiert werden [128]. Wir sind in der Beschreibung nur am Rande darauf eingegangen, aber die PCUT ist per Konstruktion ein cluster-additives Verfahren. Die Cluster-Additivität der PCUT-Methode erlaubt es nun, folgen wir Argumenten von Gelfand [127] [132] [128], die PCUT mit Methoden der Linked-Cluster-Expansion (LCE) zu behandeln.

Bei der LCE geht es im Wesentlichen darum (siehe auch [105] [101] [102] [103]), dass thermodynamisch relevante Größen einer perturbativen Rechnung, immer auf Rechen-Clustern endlicher Größe bestimmt werden können. Die Größe der Rechen-Cluster hängt typischerweise von der betrachteten Ordnung und der Teilchenzahl des irreduziblen Beitrags, der betrachtet werden soll, ab. Aufgrund des Subtraktionsschemas 2.35 tragen für die irreduziblen Beiträge nur zusammenhängende Cluster bei. Das ist darin begründet, dass sich in der Subtraktion die Beiträge der nicht-zusammenhängenden Cluster aufheben. Dies ist auch im sog. Linked-Cluster-Theorem verankert, dass kein Theorem im mathematischen Sinn ist. Das Theorem erklärt, dass für cluster-additive Größen nur zusammenhängende Cluster zu irreduziblen Beiträgen beitragen. Dieser Sachverhalt wird mit diesem Theorem als “Merkregel” zusammengefasst. Da nur zusammenhängende Cluster beitragen und jedes Cluster eine endliche Länge besitzt, hat auch der effektive Hamiltonoperator einer endlichen Ordnung auf einem Gitter nur eine endliche Reichweite. Also müssen Rechen-Cluster endlicher Größe ausreichen, alle Längenskalen der perturbativen Rechnung zu erfassen.

Wir haben das Linked-Cluster-Theorem und die LCE an dieser Stelle angesprochen, um noch einmal zu betonen, dass das Subtraktionsschema 2.35, dass wir hier speziell für die PCUT über Matrixelemente aufgestellt haben, ein allgemeiner methodischer Aspekt von Verfahren zur Bestimmung von Hochordnungs-Reihenentwicklungen ist.

Wir gehen nun auf die Berechnung von Observablen \mathcal{O} ein und beginnen damit, die allgemeine Struktur einer effektiven Observablen zu beschreiben. Die Notation der effektiven Observablen beruht auf denselben Annahmen, die wir auch für die Notation des Hamiltonoperators 2.21 getroffen haben. Wir erinnern daran, dass wir die Operatoren der effektiven Observablen aus lokalen Erzeuger-Operatoren und Vernichter-Operatoren aufbauen, die in der Besetzungs-Darstellung nach Eigenzuständen des ungestörten Hamiltonoperators \mathcal{H}_0 gegeben sind.

Die effektive Observable (2.17) erhält die Teilchenzahl nicht. Daher ist es zweckmäßig die Notation von \mathcal{H}_n für (irreduzible) n -Teilchen-Terme zu $\mathcal{O}_{m,n}$ für (irreduzible) Operator-Terme zu erweitern. Der Term $\mathcal{O}_{m,n}$ besteht aus m Erzeuger-Operatoren und n Vernichter-Operatoren.

Analog zu 2.20 ergibt sich die allgemeinste Schreibweise der effektiven PCUT-Observablen zu

$$\begin{aligned}
 \mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} &= \sum_{m,n}^{\infty} \mathcal{O}_{m,n} & (2.38) \\
 &= \mathcal{O}_{0,0} + \mathcal{O}_{1,0} + \mathcal{O}_{2,0} + \cdots \\
 &+ \mathcal{O}_{0,1} + \mathcal{O}_{1,1} + \mathcal{O}_{2,1} + \cdots \\
 &+ \mathcal{O}_{0,2} + \mathcal{O}_{1,2} + \mathcal{O}_{2,2} + \cdots \\
 &+ \cdots \cdots \cdots \\
 &+ \mathcal{O}_{0,\mathcal{N}} + \mathcal{O}_{1,\mathcal{N}} + \mathcal{O}_{2,\mathcal{N}} + \cdots \\
 &+ \cdots \cdots \cdots .
 \end{aligned}$$

Es ist darauf zu achten, dass sowohl die Anzahl der Vernichter-Operatoren als auch die Anzahl der Erzeuger-Operatoren nach oben unbegrenzt sind und auch der Fall unendlich vieler Operatoren vorliegt. Beschränken wir uns auf einen endlichen Unterraum der Beiträge, so dass höchstens \mathcal{N} Erzeuger- oder Vernichter-Operatoren vorkommen dürfen, so gibt es quadratisch viele Beiträge $\mathcal{O}_{m,n}$ in der effektiven Observablen. Vergleichen wir dies mit dem effektiven Hamiltonoperator, so wächst die Anzahl der Summanden \mathcal{H}_n in diesem Fall linear.

Nutzen wir die Annahmen, die wir für den effektiven PCUT-Hamiltonoperator getroffen haben, so können wir die Beiträge $\mathcal{O}_{m,n}$ aus 2.38 direkt angeben. Wir zeigen nur einige Beiträge explizit und geben die allgemeine Definition für $\mathcal{O}_{m,n}$ an

$$\mathcal{O}_{1,1} := \sum_{\vec{i}_1, \vec{j}_1} B_{\vec{i}_1}^{\vec{j}_1} b_{\vec{j}_1}^\dagger b_{\vec{i}_1} \quad (2.39)$$

$$\mathcal{O}_{1,3} := \sum_{\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3, \vec{j}_1} B_{\vec{i}_3, \vec{i}_2, \vec{i}_1}^{\vec{j}_1} b_{\vec{j}_1}^\dagger b_{\vec{i}_3} b_{\vec{i}_2} b_{\vec{i}_1} \quad (2.40)$$

$$\mathcal{O}_{3,1} := \sum_{\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3, \vec{j}_1} B_{\vec{i}_1}^{\vec{j}_3, \vec{j}_2, \vec{j}_1} b_{\vec{j}_1}^\dagger b_{\vec{j}_2}^\dagger b_{\vec{j}_3}^\dagger b_{\vec{i}_1} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{O}_{m,n} &:= \sum_{\{\vec{i}\}_n, \{\vec{j}\}_m} B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m} b_{\vec{j}_1}^\dagger \cdots b_{\vec{j}_m}^\dagger b_{\vec{i}_n} \cdots b_{\vec{i}_1} \\
 &= \sum_{\vec{i}_1, \dots, \vec{i}_n, \vec{j}_1, \dots, \vec{j}_m} B_{\vec{i}_n, \dots, \vec{i}_1}^{\vec{j}_m, \dots, \vec{j}_1} b_{\vec{j}_1}^\dagger \cdots b_{\vec{j}_m}^\dagger b_{\vec{i}_n} \cdots b_{\vec{i}_1} . \quad (2.42)
 \end{aligned}$$

Die Struktur der effektiven Observablen ist damit festgelegt und die weitere Vorgehensweise ist nun wieder, die Amplituden $B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m}$ aus Matrixelementen auf endlichen Clustern zu extrahieren. Wir lassen dazu die Operatoren $\mathcal{O}_{m,n}$ auf die Zustände der Besetzungs-Darstellung 2.27 wirken. Durch die normalgeordnete Struktur der Operatoren $\mathcal{O}_{m,n}$, muss der Zustand n oder mehr Teilchen enthalten, damit $\mathcal{O}_{m,n}$ einen endlichen Beitrag liefert.

Wir merken weiter an, dass die Terme in Gleichung 2.39-2.42 irreduzible Terme sind. Wirken wir mit der effektiven Observablen 2.38 auf einen Zustand, so ist das Matrixelement wieder das volle Matrixelement. Man erhält somit neben der gesuchten Amplitude noch Summanden, die

zu subtrahieren sind. Dabei kann man aber den Argumenten, die wir für den effektiven PCUT-Hamiltonoperator präsentiert haben, analog folgen. Die Beiträge aus den anderen Summanden der effektiven Observablen können mittels weiterer Matrixelemente bestimmt werden, so dass die gesuchte Amplitude wieder rekursiv durch ein Subtraktionsschema extrahiert werden kann.

Wir kommen zur konkreten Berechnung der effektiven Amplituden $B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m}$, die wir wieder auf endlichen Systemen durchführen können. Wir benötigen dazu ein Rechen-Cluster \mathcal{Q} , das groß genug ist, alle (endlichen) Längenskalen der Observablen zu erfassen. Die irreduziblen Amplituden, die durch Anwendung des Subtraktionsschemas für Observablen gewonnen werden, sind dann die thermodynamisch korrekten Amplituden. Der Grund ist analog zum Subtraktionsschema für den Hamiltonoperator 2.35. Die Anwendung der effektiven Observablen $\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ auf Zustände, definiert auf dem Rechen-Cluster \mathcal{Q} , liefert das folgende volle Matrixelement

$$\mathcal{Q}A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m} := \langle \vec{j}_1, \dots, \vec{j}_m | \mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} | \vec{i}_1, \dots, \vec{i}_n \rangle. \quad (2.43)$$

Dabei ergibt das Matrixelement mit dem Ansatz 2.42 wieder eine Summe von Amplituden, wobei man durch einfache Subtraktion die gesuchte Amplitude bestimmen kann. Wir können die irreduziblen Beiträge nun über das folgende Schema

$$\begin{aligned} B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m} &= \mathcal{Q}B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m} - \sum_{a,b} \mathcal{Q}B_{\{\vec{i}\}_{n-1}}^{\{\vec{j}\}_{m-1}} \delta_{\vec{j}_a, \vec{i}_b} \\ &\quad - \sum_{a,b,c,d} \mathcal{Q}B_{\{\vec{i}\}_{n-2}}^{\{\vec{j}\}_{m-2}} \left(\delta_{\vec{j}_a, \vec{i}_b} \delta_{\vec{j}_c, \vec{i}_d} + \delta_{\vec{j}_c, \vec{i}_b} \delta_{\vec{j}_a, \vec{i}_d} \right) - \dots \end{aligned} \quad (2.44)$$

berechnen. In dieser Formel ist die Amplitude $\mathcal{Q}B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m}$ die volle Amplitude auf dem Rechen-Cluster \mathcal{Q} . Diese wird mit Zuständen auf dem endlichen Cluster \mathcal{Q} , nach Definition 2.43 bestimmt. Die irreduzible Amplitude des entsprechenden Terms in $\mathcal{O}_{m,n}$ der effektiven Observablen 2.42 ist $B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m}$. Die Notation unterscheidet sich im Index \mathcal{Q} , um anzudeuten, dass es sich um die clusterunabhängige, irreduzible Amplitude handelt. Von der Amplitude $\mathcal{Q}B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m}$ sind die Beiträge aus den anderen irreduziblen Summanden $\mathcal{O}_{m-1,n-1}$, $\mathcal{O}_{m-2,n-2}$ usw. zu subtrahieren. Dabei sind alle Summanden $\mathcal{O}_{m-l,n-l}$ in Betracht zu ziehen, so dass weder $m-l$ noch $n-l$ einen negativen Wert annehmen. In den Prozessen des Summanden $\mathcal{O}_{m-l,n-l}$ befinden sich weniger Erzeuger- und Vernichter-Operatoren, wobei für jeden Erzeuger-Operator auch genau ein Vernichter-Operator weniger in den Prozessen auftreten, als im Prozess der Amplitude $\mathcal{Q}B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m}$. Diese Bedingung ist einzuhalten, da weitere Prozess aus anderen Summanden nicht zur vollen Amplitude $\mathcal{Q}B_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_m}$ beitragen können. Das liegt daran, dass mit der genannten Bedingung immer ein Zustand eines belegten Platz, sowohl im Anfangs-Zustand wie im End-Zustand, als Skalar-Produkt übrig bleiben. So entstehen die δ -Funktionen im Subtraktionsschema 2.44. Da aber die lokalen Zustände von belegten und unbelegten Plätzen immer orthogonal zueinander liegen, muss in der Durchführung des Subtraktionsschemas nur auf Amplitude $\mathcal{Q}B_{\{\vec{i}\}_{n-l}}^{\{\vec{j}\}_{m-l}}$ geachtet werden, wobei der entsprechende Operator der Amplitude aus der effektiven Observablen $m-l$ Erzeuger-Operatoren und $n-l$ Vernichter-Operatoren enthält.

Dabei haben wir in der Definition zwei konkreten Typen mit $l = 1$ und $l = 2$ explizit angegeben. Für die Amplituden $\mathcal{Q}_B^{\{\vec{j}\}_{m-1}}_{\{\vec{i}\}_{n-1}}$ des Summanden $\mathcal{O}_{m-1,n-1}$ ist darauf zu achten, dass alle nötigen Amplituden einbezogen werden. Für die Amplituden $\mathcal{Q}_B^{\{\vec{j}\}_{m-1}}_{\{\vec{i}\}_{n-1}}$ bedeutet das konkret, dass alle Amplituden subtrahiert werden müssen, die aus den Kombinationen folgen, $m - 1$ Plätze aus m Plätzen zu beachten und auch alle Möglichkeiten $n - 1$ Plätze aus n Plätzen zu belegen. Jede Kombination liefert eine zu subtrahierende Amplitude. Für den Beitrag mit $l = 1$ haben wir dieses Schema durch eine Summation über einen Platz a aus den Plätzen $\{\vec{j}\}_m$ und einen Platz b aus den Plätzen $\{\vec{i}\}_n$ eingeführt. Dies ist so zu lesen, dass in der Amplitude $\mathcal{Q}_B^{\{\vec{j}\}_{m-1}}_{\{\vec{i}\}_{n-1}}$ in den Indizes $\{\vec{j}\}_{m-1}$ und $\{\vec{i}\}_{n-1}$ jeweils der Index a bzw. b nicht auftritt. Dies ist für andere Werte von l für Terme der Beiträge $\mathcal{O}_{m-l,n-l}$ auf entsprechend viele Indizes zu erweitern. Deswegen treten die vier Indizes a, b, c und d in der Summe der Amplituden $\mathcal{Q}_B^{\{\vec{j}\}_{m-2}}_{\{\vec{i}\}_{n-2}}$ auf.

2.2 Klassische Näherung (CA)

2.2.1 Klassisches Spin-Funktional

Wir zeigen in diesem Unterkapitel, wie ein effektiver Hamiltonoperator aus Hardcore-Teilchen, allgemein definiert in 2.21 durch eine klassische Näherung behandelt werden kann. Das effektive Modell der Dimer-Phase des Shastry-Sutherland-Modells auf der 4-Bein-Röhre wird in Unterkapitel 3.2 explizit präsentiert und in Kapitel 4 folgen die Ergebnisse für dieses System aus der klassischen Näherung.

Die klassische Näherung ist eine Methode, Quanten-Spin-Modelle zu behandeln. Es ist ebenfalls möglich, (spinlose) Hardcore-Bosonen, wie sie im effektiven Modell der PCUT auftreten (siehe Kapitel 2.1.1), mit dieser Methode zu beschreiben. Dazu nutzt man die Matsubara-Matsuda-Transformation [148], die das Hardcore-Boson-Modell exakt auf ein (Pseudo-)Spin-1/2-Modell abbildet, welches mit der klassischen Näherung behandelt wird.

Wir beginnen mit der Diskussion der Matsubara-Matsuda-Transformation. Die Hardcore-Bosonen werden mit den Operatoren $b_{\vec{i}}^\dagger$ erzeugt bzw. $b_{\vec{i}}$ vernichtet und wir definieren den Zähl-Operator $n_{\vec{i}} = b_{\vec{i}}^\dagger \cdot b_{\vec{i}}$. Mit dieser Definition ist die Matsubara-Matsuda-Transformation für ein Boson am Platz \vec{i} gegeben durch

$$n_{\vec{i}} = \frac{1}{2} - S_{\vec{i}}^z \quad b_{\vec{i}} = S_{\vec{i}}^+ = S_{\vec{i}}^x + iS_{\vec{i}}^y \quad b_{\vec{i}}^\dagger = S_{\vec{i}}^- = S_{\vec{i}}^x - iS_{\vec{i}}^y, \quad (2.45)$$

wobei $S_{\vec{i}}^{x,y,z}$ die Spinoperatoren am Platz \vec{i} mit Spin 1/2 sind. Wir erinnern an die Relationen $S_{\vec{i}}^\pm = S_{\vec{i}}^x \pm iS_{\vec{i}}^y$ für Spinoperatoren. Der lokale Hilbertraum eines Hardcore-Bosons beinhaltet einen Zustand für einen besetzten ($|1\rangle$) bzw. unbesetzten ($|0\rangle$) Platz. Der lokale Hilbertraum eines Spins enthält den Spin-Up- ($|\uparrow\rangle$) und Spin-Down- ($|\downarrow\rangle$) Zustand, wobei für die Matsubara-Matsuda-Transformation 2.45 die Korrespondenzen $|0\rangle \leftrightarrow |\uparrow\rangle$ und $|1\rangle \leftrightarrow |\downarrow\rangle$ benutzt wurden.

Die Transformation 2.45 kann nun in das Hardcore-Boson-Modell 2.21 eingesetzt werden. Wir geben dafür nun exemplarisch vier Beispiele an, wobei die folgenden Terme im Verlauf dieser Arbeit relevante Operator-Typen im effektiven Modell sind. Wir präsentieren die Transformation einer Dichte $n_{\vec{i}}$, eines Hüpfterms eines Teilchens zwischen den Plätzen \vec{i} und $\vec{i} + \vec{\delta}$, einer Dichte-Dichte-Wechselwirkung und eines korrelierten Hüpfterms. Dabei ist ein korrelierter Hüpfterm eine Kombination aus einem Erzeuger-Operator, einem Zähleroperator und einem Vernichter-Operator, die bewirken dass ein Teilchen zwischen den Plätzen \vec{i} und $\vec{i} + \vec{\delta}_2$ hüpfert, wenn ein zweites Teilchen am Platz $\vec{i} + \vec{\delta}_1$ anwesend ist. Die Matsubara-Matsuda-Transformation 2.45 dieser vier Operator-Typen lautet

$$\begin{aligned} n_{\vec{i}} &= \frac{1}{2} - S_{\vec{i}}^z & (2.46) \\ b_{\vec{i}+\vec{\delta}}^\dagger b_{\vec{i}} + b_{\vec{i}}^\dagger b_{\vec{i}+\vec{\delta}} &= 2 \left(S_{\vec{i}}^x S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^x + S_{\vec{i}}^y S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^y \right) \\ n_{\vec{i}} n_{\vec{i}+\vec{\delta}} &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2} S_{\vec{i}}^z - \frac{1}{2} S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^z + S_{\vec{i}}^z S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^z \\ b_{\vec{i}+\vec{\delta}_2}^\dagger n_{\vec{i}+\vec{\delta}_1} b_{\vec{i}} + b_{\vec{i}}^\dagger n_{\vec{i}+\vec{\delta}_1} b_{\vec{i}+\vec{\delta}_2} &= 2 \left(S_{\vec{i}}^x S_{\vec{i}+\vec{\delta}_2}^x + S_{\vec{i}}^y S_{\vec{i}+\vec{\delta}_2}^y \right) \left(\frac{1}{2} - S_{\vec{i}+\vec{\delta}_1}^z \right). \end{aligned}$$

Die klassische Näherung besteht darin, die Quantenspins durch klassische Vektoren der Länge $1/2$ zu ersetzen. Formal setzen wir dazu die Wellenfunktion des Systems als einen Produktzustand an. Der lokale Zustand eines Spins $1/2$ ist durch eine kontinuierliche Bloch-Sphäre gegeben. Weiterhin wird eine Einheitszelle \mathcal{C} auf dem System definiert mit $N_{\mathcal{C}}$ Plätzen. Dabei ist das thermodynamische Verhalten eines klassischen Systems durch die Einheitszelle vollständig bestimmt, denn die Plätze der Einheitszelle entsprechen kristallographisch äquivalenten Plätzen. Ein System wird dazu gedanklich in die Einheitszellen zerlegt und jeder Platz im System erhält die Zuordnung zu einem Platz der Einheitszelle.

Die Wahl der Einheitszelle \mathcal{C} ist ein relevanter Bestandteil der Methode. Zu Beginn einer Rechnung wird die Form der Einheitszelle als Ansatz festgelegt. Dabei müssen verschiedene Ansätze für die Einheitszelle getestet werden und die Einheitszelle, die den Zustand minimaler Energie zeigt, wird als Ergebnis festgehalten. Der Bloch-Ansatz der klassischen Näherung lautet

$$|\varphi^{\text{System}}\rangle = \prod_{\vec{i} \in \mathcal{C}}^{N_{\mathcal{C}}} |\varphi_{\vec{i}}\rangle \quad \text{mit} \quad |\varphi_{\vec{i}}(\theta_{\vec{i}}, \phi_{\vec{i}})\rangle = e^{i\phi_{\vec{i}}/2} \sin(\theta_{\vec{i}}/2) |\downarrow_{\vec{i}}\rangle + e^{-i\phi_{\vec{i}}/2} \cos(\theta_{\vec{i}}/2) |\uparrow_{\vec{i}}\rangle \quad (2.47)$$

und der Zustand an jedem Platz $\vec{i} \in \mathcal{C}$ ist durch die zwei Winkel $\theta_{\vec{i}}$ und $\phi_{\vec{i}}$ charakterisiert.

Der Gesamtzustand der Einheitszelle ist dann durch alle $2N_{\mathcal{C}}$ Winkel bestimmt. Durch variationelle Minimierung der $2N_{\mathcal{C}}$ Winkel im zu minimierenden Funktional $E = \langle \varphi^{\text{System}} | \mathcal{H} | \varphi^{\text{System}} \rangle$ kann der Grundzustand bestimmt werden. Der Ansatz wirkt wie die Ersetzung der effektiven Quanten-Spin-1/2 $\vec{S}_{\vec{i}} = \left(S_{\vec{i}}^x, S_{\vec{i}}^y, S_{\vec{i}}^z \right)^T$ zu einem kontinuierlichen klassischen Vektor der Länge

1/2

$$\langle \varphi_{\vec{i}}(\theta_{\vec{i}}, \phi_{\vec{i}}) \mid \vec{S}_{\vec{i}} \mid \varphi_{\vec{i}}(\theta_{\vec{i}}, \phi_{\vec{i}}) \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sin(\theta_{\vec{i}}) & \cos(\phi_{\vec{i}}) \\ \sin(\theta_{\vec{i}}) & \sin(\phi_{\vec{i}}) \\ \cos(\theta_{\vec{i}}) & \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} S_{\vec{i}}^x \\ S_{\vec{i}}^y \\ S_{\vec{i}}^z \end{pmatrix}. \quad (2.48)$$

Die numerische Arbeit liegt nun im Minimieren des Funktionals $E = \langle \varphi^{\text{System}} \mid \mathcal{H} \mid \varphi^{\text{System}} \rangle$, in Abhängigkeit von den Winkeln $\theta_{\vec{i}}$ und $\phi_{\vec{i}}$.

Setzt man die klassische Ersetzung 2.48 in die Terme des Quanten-Spin-Hamiltonoperators 2.46 ein, liegen die folgenden klassischen Ausdrücke vor:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} - S_{\vec{i}}^z &\rightarrow \frac{1}{2} (1 - \cos \theta_{\vec{i}}) \\ 2 \left(S_{\vec{i}}^x S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^x + S_{\vec{i}}^y S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^y \right) &\rightarrow 2 \left(\sin \theta_{\vec{i}} \cos \phi_{\vec{i}} \sin \theta_{\vec{i}+\vec{\delta}} \cos \phi_{\vec{i}+\vec{\delta}} \right) \\ &\quad + 2 \left(\sin \theta_{\vec{i}} \sin \phi_{\vec{i}} \sin \theta_{\vec{i}+\vec{\delta}} \sin \phi_{\vec{i}+\vec{\delta}} \right) \\ \frac{1}{4} - \frac{1}{2} S_{\vec{i}}^z - \frac{1}{2} S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^z + S_{\vec{i}}^z S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^z &\rightarrow \frac{1}{4} \left(1 - \cos \theta_{\vec{i}} - \cos \theta_{\vec{i}+\vec{\delta}} + \cos \theta_{\vec{i}} \cos \theta_{\vec{i}+\vec{\delta}} \right) \\ 2 \left(S_{\vec{i}}^x S_{\vec{i}+\vec{\delta}_2}^x + S_{\vec{i}}^y S_{\vec{i}+\vec{\delta}_2}^y \right) \left(\frac{1}{2} - S_{\vec{i}+\vec{\delta}_1}^z \right) &\rightarrow \frac{1}{2} \left(\sin \theta_{\vec{i}} \cos \phi_{\vec{i}} \sin \theta_{\vec{i}+\vec{\delta}_2} \cos \phi_{\vec{i}+\vec{\delta}_2} \right) \left(1 - \cos \theta_{\vec{i}+\vec{\delta}_1} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\sin \theta_{\vec{i}} \sin \phi_{\vec{i}} \sin \theta_{\vec{i}+\vec{\delta}_2} \sin \phi_{\vec{i}+\vec{\delta}_2} \right) \left(1 - \cos \theta_{\vec{i}+\vec{\delta}_1} \right). \end{aligned}$$

Darüberhinaus haben wir die variationelle Wahl einer Einheitszelle \mathcal{C} bereits angesprochen. Da die Ergebnisse die Symmetrie des Clusters beinhalten, muss empirisch eine Auswahl an Klassen von Einheitszellen für einen festen Wert von J'/J minimiert werden. Die Einheitszelle geringster Energie ist dann der Grundzustandskandidat, wobei wir auf die Auswahl der Einheitszellen in dieser Arbeit im Unterkapitel 2.2.4 genauer eingehen.

2.2.2 Numerische Bemerkungen

In der numerischen Minimierung existieren im Wesentlichen zwei Klassen von Verfahren, abhängig davon, ob der Gradient der zu minimierenden Funktion vorliegt oder nicht. In dieser Arbeit haben wir mit beiden Verfahren erfolgreich gearbeitet. Wir stellen die Algorithmen kurz vor.

Das Minimieren ohne Gradienten ist in der Regel schlechter konditioniert. Um ein Minimum sicher zu finden, muss der Algorithmus üblicherweise mit mehreren verschiedenen, zufällig gewählten Startwerten durchgeführt werden, wobei die Anzahl der zufällig bestimmten Startwerte in $O(100)$ liegt. Dieser Algorithmus hat aber den Vorteil, dass er nicht so anfällig dafür ist, in lokalen Minima stecken zu bleiben. Er kann daher als Vor-Routine genutzt werden, um das globale Minimum einzuschränken und mit einem Gradienten-Verfahren genauer zu bestimmen.

Wir haben in dieser Arbeit den Simplex-Algorithmus von Nelder und Mead [149] verwendet, in der Implementierung der GSL, um ein Funktional ohne einen Gradienten zu minimieren. Es

handelt sich um einen heuristischen Algorithmus zur multidimensionalen Minimierung, der mit N (zu Beginn zufälligen) Phasenraum-Punkten arbeitet, wobei N für die Anzahl der Freiheitsgrade plus 1 steht.

Gedanklich spannen die N Punkte einen Simplex auf, woher der Name des Algorithmus herrührt. Die wesentliche Idee ist die iterative Optimierung der Punkte, die den Simplex aufspannen. Setzt man die N Punkte in die zu minimierende Funktion ein, zeigt ein Punkt den höchsten Wert und ist damit der Punkt, der am weitesten vom Minimum entfernt ist. Dieser Punkt wird, durch ein vom Algorithmus gegebenes Schema, an den anderen Punkten gespiegelt und gedreht, um neue Werte für den Eckpunkt des Simplex zu generieren. Derjenige Vorschlag für den Eckpunkt mit dem kleinsten Funktionswert wird als neuer Eckpunkt übernommen. Diesen Schritt iteriert man mit dem neuen Punkt höchster Funktionsauswertung, bis der Simplex das Minimum zur gewünschten Genauigkeit eingegrenzt hat. Typischerweise haben wir diese Genauigkeit bei unseren Berechnungen auf 10^{-6} festgelegt.

Die multidimensionale Minimierung mit einem Gradientenverfahren konvergiert in der Regel recht schnell, hat aber den Nachteil, dass dem Gradienten des Startwerts gefolgt wird. Ist der Startwert schlecht gewählt, kann es passieren, dass der Algorithmus einem lokalen Minimum folgt und das globale Minimum somit nicht findet. Dieses Problem kann durch die Verwendung mehrerer Startwerte oder der Verwendung einer Vor-Routine (die das Minimum einschränkt) behoben werden. Dabei verwendet unser Algorithmus einen Euler-Polynomzug der Schrittweite h (typischerweise 10^{-5}) zur Bestimmung des Minimums nach i Schritten an Hand der Formel

$$\begin{pmatrix} \{\theta_i\} \\ \{\phi_i\} \end{pmatrix}_{i+1} = \begin{pmatrix} \{\theta_i\} \\ \{\phi_i\} \end{pmatrix}_i + \left(\vec{\nabla} E(\{\theta_i\}, \{\phi_i\}) \right) . \quad (2.49)$$

Der Gradient kann aus den Ableitungen ∂_{θ_i} und ∂_{ϕ_i} der Ausdrücke 2.49 analytisch bestimmt werden.

2.2.3 Ordnungsparameter

Die in Unterkapitel 2.2.1 angesprochene klassische Näherung beschreibt per Konstruktion ein System im thermodynamischen Limes. Im thermodynamischen Limes kann im System spontane Symmetriebrechung auftreten. Eine gebrochene Symmetrie kann über einen passenden Ordnungsparameter festgestellt werden. Um eine Phase des Systems zu charakterisieren, muss die in dem Grundzustand gebrochene Symmetrie charakterisiert werden. Dies geschieht wie angesprochen durch die Berechnung eines Ordnungsparameters O . Der Ordnungsparameter O gibt an, ob eine spezielle Symmetrie gebrochen ist ($O \neq 0$) oder nicht ($O = 0$). Die Symmetrien des Shastry-Sutherland-Modells die uns in der klassischen Rechnung interessieren und die ein (klassischer) Zustand brechen kann, sind die diskrete Translations-Symmetrie und die kontinuierliche $U(1)$ -Symmetrie. In einer klassischen Rechnung ist der Bruch einer kontinuierlichen Symmetrie selbst in einem (quasi)-eindimensionalen System unproblematisch. Wir erinnern daran, dass im

Quanten-Fall eine kontinuierliche Symmetrie in einem eindimensionalen System, aufgrund des Mermin-Wagner-Theorems, nicht gebrochen werden kann.

Wir definieren einen (zweidimensionalen) Ortsvektor \vec{i} eines Gitterplatzes in einem System. Der Ortsvektor \vec{i} ist über $\vec{i} = i_1 \vec{a}_1 + i_2 \vec{a}_2 + \vec{r}$ gegeben, wobei die Vektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2 die Einheitszelle \mathcal{C} aufspannen (mit $N_{\mathcal{C}}$ Plätzen), die wir als Ansatz gewählt haben. Der Vektor \vec{r} durchläuft alle Ortsvektoren der Plätze innerhalb einer Einheitszelle ($\vec{r} \in \mathcal{C}$). Weiter definieren wir einen reziproken Gitter-Vektor über $\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2$. Wir schreiben diesen Vektor im Folgenden kurz als $\vec{k} = (k_1, k_2)^T$. Die Vektoren \vec{b}_i sind so bestimmt, dass die Gleichung $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{i,j}$ erfüllt ist.

Ein Bruch der Translationssymmetrie kann durch den statischen Strukturfaktor bestimmt werden. Wir nutzen in der folgenden Definition des statischen Strukturfaktors zwei Ortsvektoren $\vec{i} = i_1 \vec{a}_1 + i_2 \vec{a}_2 + \vec{r}$ und $\vec{j} = j_1 \vec{a}_1 + j_2 \vec{a}_2 + \vec{r}'$. Wir geben sowohl die allgemeine Definition als auch die klassische Definition an. Die klassische Definition ergibt sich aus der allgemeinen Definition, durch Einsetzen der klassischen Ersetzung 2.48 und der Voraussetzung, dass der Imaginärteil der Exponentialfunktion verschwinden muss, da der statische Strukturfaktor eine Messgröße ist. Die Definitionen des statischen Strukturfaktors $S_{\vec{k}}$ (mit $\vec{k} \neq 0$) sind

$$S_{\vec{k}}^{\text{allgemein}} = \frac{1}{N_{\mathcal{C}}^2} \sum_{(\vec{r}, \vec{r}') \in \mathcal{C}} S_{\vec{r}}^z S_{\vec{r}'}^z e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (2.50)$$

$$S_{\vec{k}}^{\text{klassisch}} = \frac{1}{N_{\mathcal{C}}^2} \sum_{(\vec{r}, \vec{r}') \in \mathcal{C}} \cos(\theta_{\vec{r}}) \cos(\theta_{\vec{r}'}) \cos\left(\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')\right). \quad (2.51)$$

Ein Bruch der $U(1)$ -Symmetrie entspricht einem endlichen Wert der Projektion der lokalen Orientierungen $(\theta_{\vec{i}}, \phi_{\vec{i}})$ in der x-y-Ebene, also einer endlichen transversalen Magnetisierung M_T , definiert durch

$$\langle M_T \rangle = \sqrt{\langle S^x \rangle^2 + \langle S^y \rangle^2} = \frac{1}{N_{\mathcal{C}}} \sqrt{\left(\sum_{\vec{i} \in \mathcal{C}} \sin(\theta_{\vec{i}}) \cos(\phi_{\vec{i}}) \right)^2 + \left(\sum_{\vec{i} \in \mathcal{C}} \sin(\theta_{\vec{i}}) \sin(\phi_{\vec{i}}) \right)^2}. \quad (2.52)$$

Wird die Translations-Symmetrie gebrochen ($S_{\vec{k}} \neq 0$), erwarten wir eine kristalline Phase, in der sich Teilchen zu periodischen Strukturen fester rationaler Dichte anordnen. Die Plateaus dieser Theorie werden durch die Minimierung der Wechselwirkungen zwischen den Triplets stabilisiert. Wir hatten in Kapitel 1.6 angesprochen, dass in der Literatur dieser Stabilisierungsmechanismus im Bereich kleiner Dichten im zweidimensionalen Modell als ausschlaggebend für die Physik angesehen wird. Dem vorherrschenden Bild, im Bereich kleiner Magnetisierung (lokalisierte Triplett-Anregungen, die kommensurable Phasen formen), wird mit der klassischen Näherung Rechnung getragen. Die klassische Näherung liefert also nur sinnvolle Ergebnisse, wenn dieses Bild der Physik stimmt. Je stärker die (Triplett-Triplett)-Wechselwirkungen sind (im Vergleich zu anderen Arten von Termen wie Hüpferten oder korrelierten Hüpferten), um so aussagekräftiger sind die klassischen Ergebnisse.

Ein endlicher Wert der x-y-Projektion der klassischen Vektoren ($M_T \neq 0$) entspricht im hardcore-bosonischen Bild einer kohärenten Bewegung der Teilchen im System, was einer supraflüssigen Phase entspricht. Die Dichte kann (wie die Winkel θ_i und ϕ_i selbst) kontinuierlich ansteigen und in der Magnetisierungskurve äußert sich diese Phase in einer kontinuierlichen Erhöhung der Magnetisierung. Es ist anzumerken, dass ein Zustand beide Symmetrien gleichzeitig brechen kann ($M_T \neq 0$ und $S_k \neq 0$), was einer suprakristallinen Phase entspricht. Diese Phasen sind in der Magnetisierungskurve ebenfalls durch eine kontinuierlich ansteigende Magnetisierung gekennzeichnet.

Wir kommen nochmals auf das Mermin-Wagner-Theorem zurück. Die klassische Näherung bildet gerade ein Quanten-System auf ein klassisches System ab. In einem klassischen System kann die erwähnte (kontinuierliche) $U(1)$ -Symmetrie unabhängig von der Dimension des Systems gebrochen werden. In einer klassischen Phase mit $M_T \neq 0$ zeigt der entsprechende Quanten-Zustand nun ebenfalls eine gebrochene $U(1)$ -Symmetrie, wenn wir weder ein eindimensionales System bei $T = 0$ noch ein zweidimensionales System bei endlicher Temperatur betrachten. Wir hatten in Kapitel 2 bereits die Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre angesprochen. Diese quasi-eindimensionale Realisierung des Shastry-Sutherland-Modells wird uns in einem Großteil dieser Arbeit beschäftigen. Die 4-Bein-Röhre zeigt aufgrund der Raumdimension das eben angesprochene Problem. Der Bruch der kontinuierlichen Symmetrie kann in dem 4-Bein-System nur im klassischen System vorliegen.

2.2.4 Einheitszellen der 4-Bein-Röhre

Wir werden in dieser Arbeit insbesondere die Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre diskutieren. Diese werden wir auch mit der klassischen Näherung behandeln. Wir hatten bereits gesagt, dass die Einheitszellen variiert werden müssen. Da die Vektoren einer Einheitszelle immer um die x-Achse und/oder y-Achse gespiegelt werden können, lassen wir nur die Orientierung der Einheitszellen zu, wie sie in Kapitel 3 in Formel 3.19 definiert sind. Im Wesentlichen werden also alle thermodynamischen Cluster betrachtet, die mit der 4-Bein-Röhren-Geometrie vereinbar sind. Alle in dieser Arbeit betrachteten Einheitszellen sind in Abbildung 2.1 zu sehen. Dabei treten viele kleinere Einheitszellen nicht auf, da die gezeigten Cluster viele kleinere Einheitszellen bereits mit enthalten, so dass das präsentierte Set übrig bleibt.

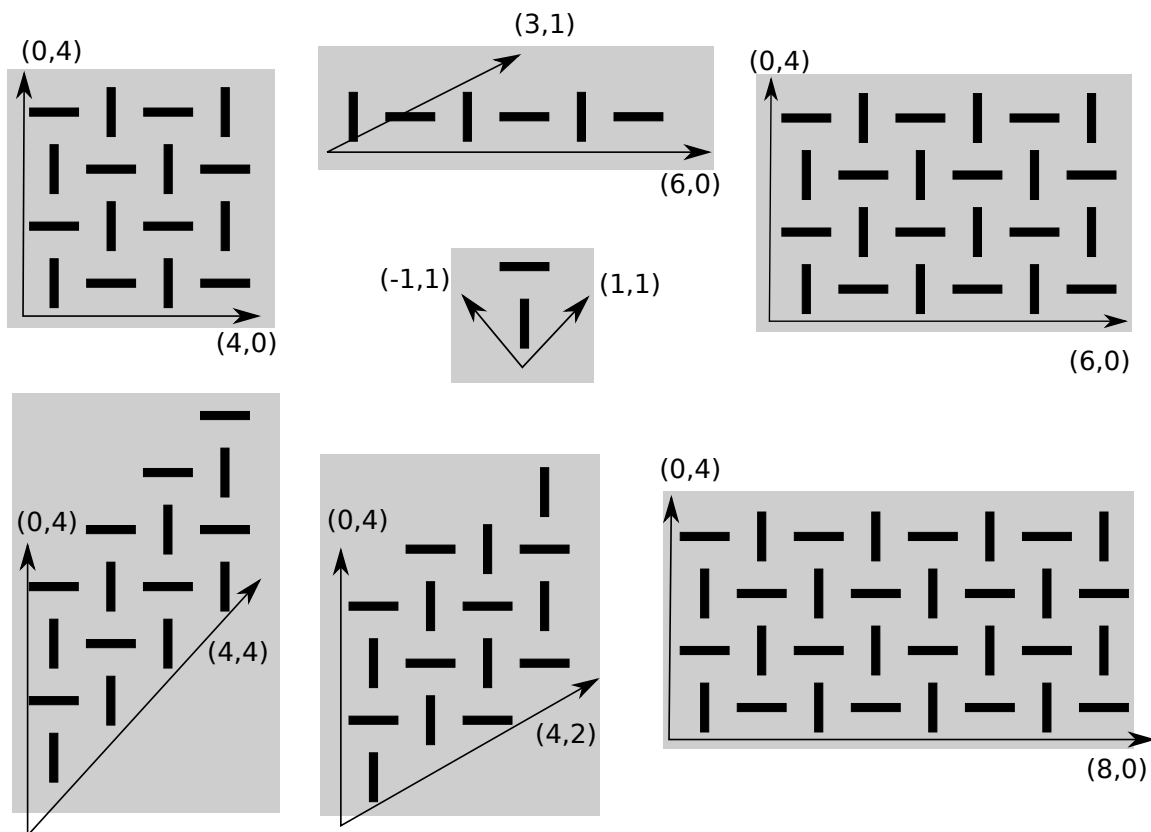


Abbildung 2.1: Der verwendete Satz von Einheitszellen, welcher mit der Geometrie der 4-Bein-Röhre vereinbar ist. Dieser Satz bleibt übrig, da viele Einheitszellen durch Symmetrie-Operationen in die gezeigten Einheitszellen übergehen. Da die Vervielfachung einer kleineren Einheitszelle immer auf eine der gezeigten Einheitszellen führt, reduziert sich der Satz an Einheitszellen weiter, so dass nur die gezeigten, relativ großen Einheitszellen zu nutzen sind.

Kapitel 3

Effektives Modell

3.1 Das effektive Modell des Shastry-Sutherland-Modells in der Dimer-Phase

In Kapitel 2 haben wir die PCUT eingeführt und den modellunabhängigen Teil der Methode betrachtet. Insbesondere wurde der effektive Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} = \mathcal{H}_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{\substack{|\mathbf{m}|=k \\ M(\mathbf{m})=0}} C(\mathbf{m}) T(\mathbf{m}) \quad (3.1)$$

bestimmt, wobei λ der Störparameter ist.

Wir erinnern daran, dass die $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen aus T_m -Operatoren bestehen. Der modellabhängige Teil der PCUT besteht darin, diese Operatoren für das Shastry-Sutherland-Modell zu bestimmen und auszuwerten. In diesem Unterkapitel (3.1) wenden wir uns diesem Punkt zu. Dazu betrachten wir in Unterkapitel 3.1.1 den ungestörten Anteil des Shastry-Sutherland-Hamiltonoperators. Im folgenden Unterkapitel 3.1.2 definieren wir dann das effektive Gitter und behandeln in Unterkapitel 3.1.3 die Störung. In Unterkapitel 3.1.4 folgen einige numerische Kommentare, welche die Durchführung der LCE konkretisieren. Diese Diskussionen werden für den feldfreien Fall durchgeführt. Dabei kann die Beschreibung des Systems im endlichen Feld sehr einfach aus der Betrachtung des feldfreien Systems durchgeführt werden. Auf diesen Punkt gehen wir ebenfalls in Unterkapitel 3.1.4 ein. Weiterhin diskutieren wir das effektive Modell in führender Ordnung in Unterkapitel 3.1.5. Bei den diskutierten Punkten in den Unterkapiteln 3.1.1 bis 3.1.5 handelt es sich meist um Modell-Eigenschaften, die noch losgelöst sind von der Geometrie des Gitters.

In Unterkapitel 3.2 wird dann das effektive Modell und die effektive Magnetisierung zu hoher Ordnung, konkret für die Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre vorgestellt. Das effektive Modell wird in dieser Form in den Ergebnis-Kapiteln 4 und 5 genutzt und mit verschiedenen Methoden gelöst.

Wir zeigen in den Unterkapiteln 3.2.1 bis 3.2.6 die relevanten Terme des effektiven Modells auf und diskutieren die Konvergenz der Amplituden der verschiedenen Terme des Modells.

3.1.1 Physik des ungestörten Anteils und Quasi-Teilchen-Bild

Wir behandeln das Shastry-Sutherland-Modell in der Dimer-Phase (mit dem Singulett-Dimer-Grundzustand) mit der PCUT-Methode. Das Modell schreibt sich

$$\mathcal{H}_{\text{Shastry-Sutherland}} = J \sum_{(\vec{i}, \vec{j})} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} + J' \sum_{[\vec{i}, \vec{j}]} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} \quad (3.2)$$

mit den antiferromagnetischen Kopplungen J und J' . Dabei sind die Spin-Plätze \vec{i} und \vec{j} der ersten Summe immer zwei Spins, die einen Dimer bilden und die Plätze \vec{i} und \vec{j} der zweiten Summe sind Gitterplätze die zwei Spins verschiedener Dimere koppeln. Dies entspricht der Definition der Kopplungen aus Bild 1.11 in Kapitel 1.5. Um Störungstheorie anwenden zu können, müssen wir uns zuerst darauf verständigen, um welchen Anteil wir entwickeln und welcher Teil des Hamiltonoperators die Störung darstellt. In der Dimer-Phase ist die Physik der J -Kopplungen sehr einfach. Die beiden Spins binden zu einem Dimer und wir haben einen vier-dimensionalen Zustandsraum pro dimerisierter J -Kopplung. Wir identifizieren die Inner-Dimer-Kopplungen J mit dem ungestörten Hamiltonian \mathcal{H}_0 und die Zwischen-Dimer-Kopplung J' mit der Störung \mathcal{V}

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{allgemein}} &= (\mathcal{H}_0) + \lambda (\mathcal{V}) \\ \mathcal{H}_{\text{Shastry-Sutherland}} &= \underbrace{\left(\sum_{(\vec{i}, \vec{j})} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} \right)}_{\mathcal{H}_0} + \frac{J'}{J} \underbrace{\left(\sum_{[\vec{i}, \vec{j}]} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} \right)}_{\mathcal{V}} . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Zusätzlich zu der Zuordnung von \mathcal{H}_0 und \mathcal{V} haben wir in der letzten Formel noch den Hamiltonoperator auf $J = 1$ normiert. Damit hat die Inner-Dimer-Kopplung der zwei Spins eines Dimers nun die Stärke 1 und der Störparameter vor der Zwischen-Dimer-Kopplung ist die normierte Kopplung $\lambda = J'/J$. Damit ist der Hamiltonoperator eine dimensionslose Größe. Wir heben die Normierung des Hamiltonoperators noch einmal hervor. Durch diese Normierung sind Energien E und Hamiltonoperatoren \mathcal{H} im Verlauf der vorliegenden Arbeit immer angegeben, so dass wir immer von normierten, dimensionslosen Zahlenwerten ausgehen werden. Damit gilt formell $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}/J$ $E \equiv E/J$, soweit nicht anders beschrieben. Wir befassen uns nun genauer mit dem ungestörten Teil des Hamiltonoperators \mathcal{H} . Das Spektrum eines Dimers beschreibt den lokalen Hilbertraum des Systems. Das Spektrum ist im linken Bild von Abbildung 3.1 zu sehen .

Setzen wir im Shastry-Sutherland-Modell aus Formel 3.2 die Zwischen-Dimer-Kopplung $J' = 0$, so reduziert sich der Hamiltonoperator auf \mathcal{H}_0 . Dabei beschreibt \mathcal{H}_0 ein Netzwerk aus ungekoppelten Dimeren, die orthogonal zueinander liegen. An jedem Dimer ist ein Bindungszustand aus zwei Spin 1/2 mit Kopplungsstärke J zu finden. Der Eigenraum ist durch die vier Drehimpuls-Eigenzustände mit der Notation $|S, S_z\rangle$ gegeben. Die beiden Spin 1/2 sind durch hochgestellte

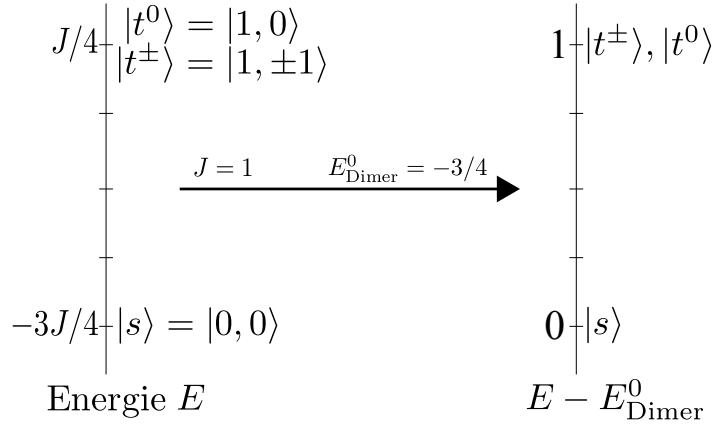


Abbildung 3.1: Auf der linken Seite ist das Spektrum eines Dimers zu sehen. Hier ist der Hamiltonoperator noch unnormiert und das Spektrum hängt von der Inner-Dimer-Kopplung J ab. Der Singulett-Zustand hat die Energie $E_{\text{Singulett}} = -3J/4$ und die drei Triplett-Zustände haben die Energie $E_{\text{Triplett}} = J/4$. Wir normieren zunächst den Hamiltonoperator auf $J = 1$ und definieren die normierte Energie des Singuletts $E_{\text{Singulett}} = -3/4$ als Grundzustandsenergie des Dimers E_{Dimer}^0 . Verschieben wir das Spektrum um den Grundzustandsbeitrag bietet sich folgende Teilchensprache an: Entweder ist der Dimer unbesetzt und hat die Kosten Null oder ein Teilchen mit drei möglichen Flavourn und der Energie 1 liegt vor. Wir skizzieren dies im rechten Teil des Bildes. Im Folgenden werden wir immer vom Spektrum auf der rechten Seite ausgehen, wenn wir einen Dimer betrachten.

Indizes (1) und (2) gekennzeichnet:

$$\begin{aligned}
 |s\rangle &= |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right) \\
 |t^+\rangle &= |1, 1\rangle = |\uparrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \\
 |t^0\rangle &= |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle + |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right) \\
 |t^-\rangle &= |1, -1\rangle = |\downarrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Das Spektrum ist auf der linken Seite des Bildes 3.1 dargestellt. Hier betrachten wir zunächst noch das nicht normierte Spektrum. Der Singulett-Zustand $|s\rangle$ hat die Energie $E_{\text{Singulett}} = -3J/4$ und ist der Zustand mit geringster Energie (der Grundzustand). Da die Energie des Systems später oft auf die Anzahl von Spins im System N_S normiert ist, sei angemerkt, dass jeder Spin dann die halbe Grundzustandsenergie $E_{\text{Spin}}^0 = -3J/8$ hat. In dieser Arbeit wird N_S immer die Anzahl der Spins im System bezeichnen. Weiter haben wir die drei Triplett-Anregungen mit einer Energie von $E_{\text{Triplett}} = J/4$. Lokal ist jeder Dimer mit der Besetzung in einen dieser vier Zustände charakterisiert, die wir als $m_{\vec{i}}$ mit $m_{\vec{i}} \in [s, t^+, t^0, t^-]$ zusammenfassen. Diese Besetzungsbasis verwenden wir, um das Gesamtsystem zu beschreiben.

Nehmen wir alle Belegungen der Singulettts und Triplettts $\{m_{\vec{i}}\}$ auf N_D Dimere, so ergibt sich eine vollständige Basis zur Beschreibung des Systems $\{\{m_{\vec{i}}\}\}$. In dieser Arbeit beschreibt N_D die Anzahl der Dimere im System. Wir greifen vorweg, dass die konkrete Anzahl an Dimer-Plätzen

in einem endlichen Cluster \mathcal{C} von uns als $N_{\mathcal{C}}$ bezeichnet wird. Die eben definierte Basis $\{|\{m_{\vec{i}}\}\rangle\}$ ist die Eigen-Basis des ungestörten Hamiltonoperators \mathcal{H}_0 . Wir definieren einen Zustand $|\{m_{\vec{i}}\}\rangle$ der Basis $\{|\{m_{\vec{i}}\}\rangle\}$ formal als

$$|\{m_{\vec{i}}\}\rangle = \bigotimes_{\vec{i}}^{N_D} |m_{\vec{i}}\rangle \quad \text{mit } m_{\vec{i}} \in [s_{\vec{i}}, t_{\vec{i}}^+, t_{\vec{i}}^0, t_{\vec{i}}^-] \quad , \quad (3.5)$$

wobei \vec{i} die Positionen der einzelnen Dimere auf einem Gitter durchläuft. Diesbezüglich gehen wir auf einige Details des Gitters im nächsten Unterkapitel 3.1.2 ein.

Wir betrachten nun das Spektrum eines Dimers, wie es im rechten Teil von Bild 3.1 zu sehen ist. Der Grundzustandsbeitrag eines lokalen Zustandes an einem Gitterplatz \vec{i} ist als $E_{\text{Dimer}}^0 = -3/4$ definiert. Dieser Beitrag liegt immer vor, unabhängig davon, in welchem Zustand der Dimer sich befindet. Spaltet man den Grundzustandsbeitrag ab, so sind die Energien für Singulett und Triplett $E_{\text{Singulett}} = 0$ und $E_{\text{Triplett}} = 1$, wie auf der rechten Seite von Abbildung 3.1 skizzenhaft dargestellt ist. Diese Interpretation motiviert nun, den ungestörten Hamiltonoperator \mathcal{H}_0 als Summe des Grundzustandsbeitrags und der Anzahl an Triplets

$$(\mathcal{H}_0)_{\text{Site } \vec{i}} = -\frac{3}{4} + (t_{\vec{i}}^+)^{\dagger} t_{\vec{i}}^+ + (t_{\vec{i}}^0)^{\dagger} t_{\vec{i}}^0 + (t_{\vec{i}}^-)^{\dagger} t_{\vec{i}}^- \quad (3.6)$$

zu bestimmen und zu charakterisieren. Die Operatoren $(t^{\alpha})^{\dagger}$ und t^{α} (mit $\alpha \in [+, 0, -]$) definieren wir als Erzeuger-Operatoren und Vernichter-Operatoren von Triplets mit den entsprechenden Flavourn $+, 0, -$ über die Gleichungen

$$\begin{aligned} |s_{\vec{i}}\rangle &= |\text{Vakuum am Gitterplatz } \vec{i}\rangle \\ |t_{\vec{i}}^+\rangle &= (t_{\vec{i}}^+)^{\dagger} |s_{\vec{i}}\rangle \quad \hat{t}_{\vec{i}}^+ |t_{\vec{i}}^+\rangle = |s_{\vec{i}}\rangle \\ |t_{\vec{i}}^-\rangle &= (t_{\vec{i}}^-)^{\dagger} |s_{\vec{i}}\rangle \quad \hat{t}_{\vec{i}}^- |t_{\vec{i}}^-\rangle = |s_{\vec{i}}\rangle \\ |t_{\vec{i}}^0\rangle &= (t_{\vec{i}}^0)^{\dagger} |s_{\vec{i}}\rangle \quad \hat{t}_{\vec{i}}^0 |t_{\vec{i}}^0\rangle = |s_{\vec{i}}\rangle \quad . \end{aligned} \quad (3.7)$$

Der Singulett-Zustand $|s_{\vec{i}}\rangle$ am Gitterplatz \vec{i} kann also als ein Zustand ohne eine Teilchen-Anregung interpretiert werden und die Triplets entsprechen dann Teilchen-Anregungen im System. Die Eigenwerten des Zähloperators $n_{\vec{i}}$ bestimmen dann, ob ein Teilchen (eines beliebigen Flavours) vorhanden ist. Der Zähloperator ist definiert als

$$n_{\vec{i}} = (t_{\vec{i}}^+)^{\dagger} t_{\vec{i}}^+ + (t_{\vec{i}}^0)^{\dagger} t_{\vec{i}}^0 + (t_{\vec{i}}^-)^{\dagger} t_{\vec{i}}^- \quad (3.8)$$

und erfüllt die Eigenwert-Gleichungen

$$n_{\vec{i}} |s_{\vec{i}}\rangle = 0 |s_{\vec{i}}\rangle = 0 \quad \Big| \quad n_{\vec{i}} |t_{\vec{i}}^+\rangle = 1 |t_{\vec{i}}^+\rangle \quad \Big| \quad n_{\vec{i}} |t_{\vec{i}}^0\rangle = 1 |t_{\vec{i}}^0\rangle \quad \Big| \quad n_{\vec{i}} |t_{\vec{i}}^-\rangle = 1 |t_{\vec{i}}^-\rangle \quad . \quad (3.9)$$

Diese anschauliche Interpretation, die im Bild 3.1 skizzenhaft dargestellt ist, kann auch auf das globale Gesamtsystem erweitert werden. Die Summe der lokalen Grundzustandsbeiträge E_{Dimer}^0

der verschiedenen Dimere addieren sich zur Grundzustandsenergie des Gesamtsystems E_{Total}^0

$$E_{\text{Total}}^0 = \sum_{\vec{i}}^{N_{\text{D}}} E_{\text{D}}^0 = -\frac{3}{4} N_{\text{D}} \quad (3.10)$$

auf. Für jedes Triplet im System erhöht sich die Gesamtenergie um 1. Wir bekommen ein äquidistantes Spektrum von Anregungs-Energien $1, 2, \dots, N$ wenn sich entsprechend viele Teilchen im Gesamtsystem befinden. Die Energie des Gesamtsystems ergibt sich dann, wenn man zur Anregungsenergie noch die Grundzustandsenergie E_{Total}^0 addiert.

Wir betonen, dass die klare Analogie zwischen der Gesamtenergie im System und der Anzahl an Triplets im System, eine Teilchen-Interpretation erlaubt und die Verwendung der PCUT erst ermöglicht. Für Systeme mit einem nicht-äquidistanten Spektrum müssen andere störungstheoretische Methoden als die PCUT verwendet werden. Übergänge zwischen zwei Energie-Niveaus haben dann eine Energiedifferenz, die in keinem Zusammenhang zu der Teilchenzahl in den Niveaus steht. Die Identifikation eines Triplets im Shastry-Sutherland-Modell als Teilchen ist ein Beispiel für die Quasi-Teilchen-Interpretation eines System, das ein äquidistantes Spektrum zeigt. Das Teilchen-Bild ist nur eine Interpretation, denn die Begriffe Teilchen und Triplet sind für das Shastry-Sutherland-Modell natürlich vollständig äquivalent und zeigen dieselbe Physik.

Definieren wir weiter den globalen Zähleroperator Q , der die Summe der lokalen Zähleroperatoren $n_{\vec{i}}$ (3.8) ist

$$Q = \sum_{\vec{i}} n_{\vec{i}}, \quad (3.11)$$

so können wir die Gesamtanzahl an Teilchen im System bestimmen. Damit kann die Gesamtenergie $E^{\text{Total}} = E_{\text{Total}}^0 + Q$ im ungestörten System bestimmt werden. Wir können die Diskussion des ungestörten Anteils abschließen, indem wir auf die Zuordnung

$$\mathcal{H}_0 = E_0 + Q = \sum_{\vec{i}}^{N_{\text{Dimere}}} \left(-\frac{3}{4} + n_{\vec{i}} \right) \quad (3.12)$$

hinweisen, die eine globale Verallgemeinerung der lokalen Gleichung 3.6 darstellt. Ein System bei fester Teilchen-Anzahl enthält aber soweit keine Dynamik. Wir werden in den nächsten Unterkapiteln sehen, dass die Störung eine Änderung der Teilchenanzahl im Gesamtsystem bewirkt und zwischen den Zuständen des äquidistanten Spektrums des (ungestörten) Gesamtsystems vermittelt.

3.1.2 Effektives Gitter, Cluster und Randbedingungen

Bevor wir uns der Störung \mathcal{V} zuwenden, sehen wir uns zuerst noch den Übergang von der Spin-Sprache zur Teilchen-Sprache auf dem Gitter genauer an. In der Teilchen-Sprache befinden sich unsere Freiheitsgrade (die vier Zustände eines Dimers) auf Dimeren. Dem soll auch auf dem

Gitter Rechnung getragen werden, indem die beiden Spin-Gitterplätze, die den Dimer bilden zu einem Dimer-Gitterplatz vereint werden. Man spricht diesbezüglich auch von einem effektiven Gitterplatz. Da wir aber bisher immer nur Kopplungen eines Hamiltonoperator definiert haben, werden wir die Einbettung der Kopplungen auf ein Gitter nun festlegen.

Wir beginnen damit, die Einheitszelle des Shastry-Sutherland-Gitters anzugeben. Im Shastry-Sutherland-Gitter hat man eine Einheitszelle bestehend aus vier Spins. Die Einheitszelle ist in Bild 3.2 dargestellt. Die Vektoren der Einheitszelle sind

$$\vec{a}_1^{\text{Einheitszelle}} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2^{\text{Einheitszelle}} = a \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (3.13)$$

In der Teilchen-Beschreibung befinden sich die Freiheitsgrade auf den Dimeren, die in Bild 3.2 durch die beiden Spins gebildet werden, welche durch die rot markierten Inner-Dimer-Kopplungen verbunden sind. Wir vereinen daher die beiden Spins an einer Inner-Dimer-Kopplung zu einem effektiven Gitterplatz und lokalisieren den Dimer-Freiheitsgrad auf diesen effektiven Gitterplatz. Die Einheitszelle hat dann zwei Dimer-Gitterplätze. Die zwei verschiedenen effektiven Plätze der Einheitszelle unterscheiden gerade die zwei Orientierungen des Dimers, der vertikal und horizontal vorliegen kann. Wir sehen weiter, dass beide Spins eines Dimers gemeinsam an einen Spin eines Nachbar-Dimers koppeln. Da die Spins des Dimers nun einen effektiven Dimer-Platz bilden, ist es sinnvoll, die beiden Kopplungen zu einer effektiven Kopplung zusammenzufassen, was wir gleich noch expliziter beschreiben.

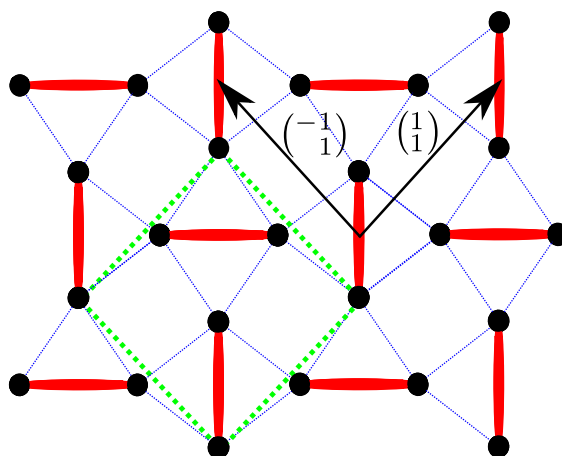


Abbildung 3.2: Wir zeigen die Einheitszelle des Shastry-Sutherland-Modells. Spins sind als schwarze Punkte gekennzeichnet. Die roten und blauen Linien zeigen die Inner-Dimer und Zwischen-Dimer-Kopplungen mit Amplitude 1 und J'/J . Die Vektoren der Einheitszelle sind eingezeichnet (siehe auch Gleichung 3.13). Die Einheitszelle ist als grün umrandetes Gebiet in dem dargestellten Shastry-Sutherland-Gitter markiert. Die Einheitszelle enthält vier Spins bzw. zwei Dimere, wobei je ein Dimer vertikal und horizontal orientiert ist.

Wir haben die Störung bisher immer allgemein als

$$J' \sum_{[\vec{i}, \vec{j}]}^{N_S} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} \quad (3.14)$$

geschrieben, wobei diese Schreibweise die konkret beteiligten Spins des Gitters nicht explizit angibt und nur bekannt ist, dass \vec{i} und \vec{j} auf verschiedenen Dimeren liegen. Um anzudeuten, dass es sich um eine Summe aus Nächste-Nachbar-Spin-Spin-Wechselwirkungen handelt, lassen wir die Summe über alle N_S Spins im System laufen.

Wir gehen nun dazu über, die Störung als eine Summe über alle (effektiven) Dimer-Plätze im System aufzufassen ($\sum^{N_S} \rightarrow \sum^{N^D}$). Um eine mehrfache Zählung von Kopplungen zwischen Dimeren zu vermeiden, lassen wir für einen Dimer am Ort \vec{i} nur Wechselwirkungen mit dem Dimer rechts daneben bei $\vec{i} + \vec{\delta}_r$ oder darüber bei $\vec{i} + \vec{\delta}_o$ zu. Die Abstands-Vektoren $\vec{\delta}_r$ und $\vec{\delta}_o$ sind folglich definiert als

$$\vec{\delta}_r = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{\delta}_o = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad . \quad (3.15)$$

Die Definition der Abstands-Vektoren $\vec{\delta}_o$ und $\vec{\delta}_r$ legt die Orientierung der Wechselwirkung auf einem Gitter fest.

Wir haben uns auf eine Orientierung der Wechselwirkungen geeinigt und kommen nun auf die angesprochenen effektiven Kopplungen zurück. Betrachten wir die Einheitszelle in Bild 3.2 erneut, so sehen wir zwei Typen von Wechselwirkungen. Beide Spins des vertikalen Dimers wechselwirken mit dem Dimer an Ort $\vec{i} + \vec{\delta}_r$ und auch beide Spins des horizontalen Dimers wechselwirken mit einem Nachbar-Dimer, der am Ort $\vec{i} + \vec{\delta}_o$ liegt. Beide Dimere haben aber auch eine Wechselwirkung, in der nur einer der Dimer-Spins mit beiden Nachbar-Spins wechselwirkt. Konkret wechselwirkt der obere Spin des vertikalen Dimers mit beiden Spins des Dimers an Ort $\vec{i} + \vec{\delta}_o$. Des Weiteren wechselwirkt der rechte Spin eines horizontalen Dimers mit beiden Spins des Dimers am Ort $\vec{i} + \vec{\delta}_r$. Beschreibt die effektive Kopplung eine Wechselwirkung von beiden Spins des Dimers (am Ort \vec{i}), so sprechen wir von einer effektiven Kopplung vom Typ Null. Liegt hingegen eine Wechselwirkung zwischen nur einem Spin vom Dimer am Ort \vec{i} und beiden Spins des Nachbar-Dimers vor, so handelt es sich um eine effektive Kopplung vom Typ Eins. Wir sehen, dass die Definition der Abstandsvektoren die Definition der effektiven Kopplungen zwischen zwei Typen bestimmt. Wir geben die Matrixelemente der Störung im nächsten Unterkapitel an und nehmen vorweg, dass die beiden Typen verschiedene Matrixelemente zeigen, weswegen die klar definierte Festlegung der zwei Typen von effektiven Kopplungen auf dem Gitter notwendig ist.

Wir müssen für die Eindeutigkeit der Störung, neben der Definition der Abstands-Vektoren, zudem die Orientierung der Spins festlegen. Dies ist notwendig, da der Singulett-Zustand orientiert ist. Werden auf einem Dimer am Platz \vec{p} , auf dem sich ein Singulett befindet, der Spin mit dem Index (1) und der Spin mit dem Index (2) vertauscht, so dreht sich das Vorzeichen der

Wellenfunktion um

$$\begin{aligned}
 |s_{\vec{p}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle_{\vec{p}} - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle_{\vec{p}} \right) \stackrel{1 \leftrightarrow 2}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(2)}\downarrow^{(1)}\rangle_{\vec{p}} - |\downarrow^{(2)}\uparrow^{(1)}\rangle_{\vec{p}} \right) \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle_{\vec{p}} - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle_{\vec{p}} \right) = -|s_{\vec{p}}\rangle \quad . \quad (3.16)
 \end{aligned}$$

Wir sehen also, dass wir eine Singulett-Orientierung (bzw. Spin-Orientierung) zu Beginn definieren müssen um die Vorzeichen bei Dimeren im Singulett-Zustand zu setzen. Wir merken an, dass alle Ergebnisse in dieser Arbeit mit den eben definierten Abstandsvektoren 3.15 sowie der angegebenen Spin-Orientierung erzielt wurden.

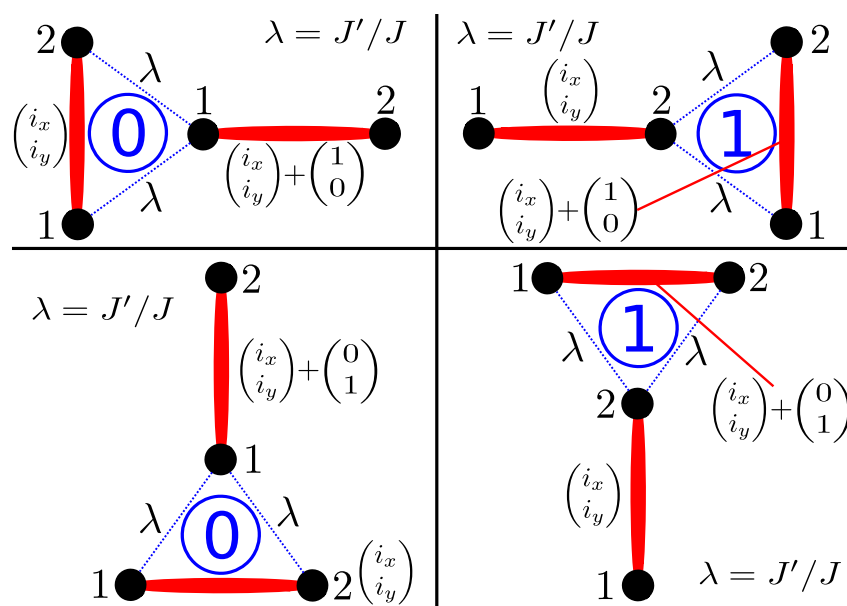


Abbildung 3.3: Die graphische Darstellung der vier kristallographisch äquivalenten Kopplungen der Störung mit Kopplungs-Konstante $\lambda = J'/J$ ist skizziert. Um die Störung definiert in ein Gitter einbetten zu können, müssen Abstands-Vektoren der Dimere $\vec{\delta}$ und Spin-Orientierung ((1) und (2)) definiert werden. Die Abstands-Vektoren führen dazu, dass zwei Typen von effektiven Kopplungen, Typ Null und Typ Eins (blau eingekreiste Zahlen im Bild), unterschieden werden müssen. Wir verwenden die Definitionen wie im Bild vermerkt für alle Rechnungen in dieser Arbeit.

Die Zuordnung der Spins zu den beiden Spin-Plätzen eines Dimers und die Orientierung des Dimers sollen im hochgestellten Index eines Spinoperators S angegeben werden. Wir kürzen vertikal mit v und horizontal mit h ab. Der hochgestellte Index (1) eines Spinoperators bezeichnet den linken Spin, falls der Dimer horizontal orientiert ist und den unteren Spin, falls der Dimer vertikal orientiert ist. Entsprechend werden der rechte bzw. obere Spin mit dem Index (2) gekennzeichnet. Damit definieren wir den Singulett-Zustand $|s_{\vec{p}}\rangle$ auf einem Dimer an Ort \vec{p} als

$$|s_{\vec{p}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle_{\vec{p}} - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle_{\vec{p}} \right) \quad . \quad (3.17)$$

Betrachten wir die Einheitszelle mit zwei Dimeren und beachten, dass beide Dimere jeweils zwei verschiedene effektive Kopplungen haben, so kann die Störung insgesamt über vier Summen kristallographisch gleicher effektiver Kopplungen erfasst werden. Dabei fasst eine Summe alle

Wechselwirkungen vom Typ Null aller vertikalen Dimere zusammen und eine zweite Summe durchläuft alle Wechselwirkungen vom Typ Eins aller vertikalen Dimere. Zusätzlich gibt es zwei analoge Summen für Typ Null- und Eins-Kopplungen von horizontalen Dimeren. Wir fassen die getroffenen Orientierungen für die Abstands-Vektoren und die Spin-Orientierung der Störung in Bild 3.3 zusammen, in dem wir jeweils ein Beispiel für die vier kristallographisch äquivalenten effektiven Kopplungen zeigen.

Trennen wir nun die Summe aller Dimere \vec{i} in der Störung 3.14 in die Summe aller vertikalen Dimere \vec{i}_v und horizontalen Dimere \vec{i}_h , so zerlegt sich die Störung wie folgt

$$\begin{aligned} \sum_{[\vec{i}, \vec{j}]}^{N_S} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} &= \sum_{\vec{i}_v}^{N_D^{(v)}} \left(\vec{S}_{\vec{i}_v}^{v,(1)} + \vec{S}_{\vec{i}_v}^{v,(2)} \right) \vec{S}_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} + \vec{S}_{\vec{i}_v}^{v,(2)} \left(\vec{S}_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_o}^{h,(1)} + \vec{S}_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_o}^{h,(2)} \right) \\ &+ \sum_{\vec{i}_h}^{N_D^{(h)}} \left(\vec{S}_{\vec{i}_h}^{h,(1)} + \vec{S}_{\vec{i}_h}^{h,(2)} \right) \vec{S}_{\vec{i}_h + \vec{\delta}_o}^{v,(1)} + \vec{S}_{\vec{i}_h}^{h,(2)} \left(\vec{S}_{\vec{i}_h + \vec{\delta}_r}^{v,(1)} + \vec{S}_{\vec{i}_h + \vec{\delta}_r}^{v,(2)} \right) . \end{aligned} \quad (3.18)$$

Dabei haben wir die Anzahl der vertikalen und horizontalen Dimere im System mit den Bezeichnungen $N_D^{(v)}$ und $N_D^{(h)}$ eingeführt. Die Anzahl der vertikalen ($N_D^{(v)}$) und horizontalen ($N_D^{(h)}$) Dimere ergeben summiert die gesamte Anzahl an Dimeren im System ($N_D = N_D^{(v)} + N_D^{(h)}$). Diese Schreibweise der Zwischen-Dimer-Kopplung stellt die vollständig orientierte Schreibweise dar, wobei diese Darstellung eine Konsequenz der Definition 3.15 und der getroffenen Wahl der Spin-Orientierung ist.

Wir fassen den Übergang zum effektiven Gitter hier kurz zusammen. Das effektive Gitter ist aus den Dimer-Gitterplätzen geformt, die alle gleichwertig sind und ein effektives Quadrat-Gitter formen. Die Dimer-Gitterplätze sind mit Nächste-Nachbar-Kopplungen verbunden, wobei zwei verschiedene Kopplungstypen auftreten. Die Einheitszelle des effektiven Gitters enthält zwei Plätze. Der durchgeführte Übergang ist schematisch in Abbildung 3.4 zu sehen. Im linken Bild ist das ursprüngliche Shastry-Sutherland-Gitter zu sehen. Dann werden, wie im mittleren Bild skizziert, die Nächste-Nachbar-Orientierung $\vec{\delta}$ und die Spin-Orientierung auf das Gitter gesetzt. Die Richtungen im mittleren Teil von Abbildung 3.4 entsprechen den zuvor getroffenen Definitionen (Nachbarn nach 3.15; Spin (1) links bzw. unten, Spin (2) entsprechend). Zuletzt werden Dimere als Gitterplätze zusammengefasst und die effektiven Kopplungen mit den passenden Typen gekennzeichnet. Für Bild 3.4 entspricht im mittleren Bild ein Pfeil von einem Dimer zu einem cyan-farbenen Spin, dem Kopplungs-Typen 0 im rechten Bild und Kopplungs-Typ 1 im rechten Bild findet sich für einen Pfeil von einem grauen Spin zu einem Dimer im mittleren Bild.

Wir gehen nun kurz auf effektive Cluster \mathcal{C} ein. Allgemein sind Cluster als eine endliche Menge von Gitterplätzen mit den dazugehörigen Kopplungen der Gitterplätze gegeben. Die effektiven Cluster \mathcal{C} folgen allen bis jetzt eingeführten Regeln und Orientierungen für effektive Gitter. Im Folgenden führen wir speziell effektive Clustern ein, die sich über Cluster-Vektoren beschreiben lassen. Dies umfasst sowohl die (periodischen) Cluster, die in Kapitel 6 für das zweidimensionale

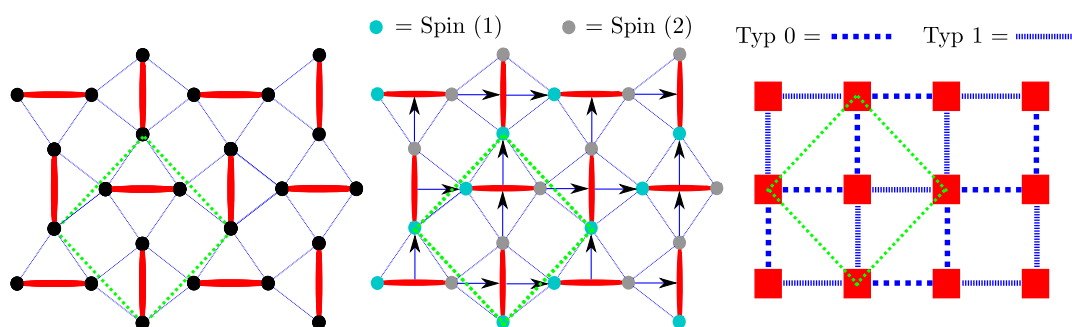


Abbildung 3.4: Der Übergang vom Shastry-Sutherland-Gitter zum effektiven Quadrat-Gitter ist zu sehen. In Shastry-Sutherland-Modell, links abgebildet, sind die Freiheitsgrade auf den schwarzen Punkten lokalisiert, die den Spin 1/2 tragen. Wir orientieren die Singulettts und die Kopplungen auf dem Gitter, was im mittleren Bild dargestellt ist, wobei die Pfeile die Einführung von Abstandsvektoren zeigen und die Einfärbung in grau und cyan die Spin-Orientierung darstellen. Es zeigen sich zwei Typen von effektiven Kopplungen. Werden die Dimere nun als effektive Gitterplätze behandelt, die mit den beiden Kopplungs-Typen verbunden sind, haben wir den definierten Übergang ins effektive Quadrat-Gitter vollzogen. Beim Übergang bleibt die Einheitszelle, die als grünes Quadrat mit eingezeichnet ist, unverändert.

Modell verwendet werden, als auch die offenen und geschlossenen 4-Bein-Röhren-Cluster, die wir in Kapitel 4 und Kapitel 5 nutzen werden.

Zuerst weisen wir auf eine Vereinfachung von Bild 3.4 hin. In einem Cluster sind die Dimer-Gitterplätze \vec{i} für Rechnungen durchnummeriert. Wählt man die Durchnummerierung der Dimere von unten nach oben und links nach rechts, so ist das gleichbedeutend mit der getroffenen Definition der Abstands-Vektoren $\vec{\delta}$. Darüberhinaus sehen wir in Bild 3.4, dass die Kopplungen gleichen Typs immer eine Zick-Zack-Kurve bilden, die nach rechts-oben orientiert ist. Beachtet man diese Punkte beim Erstellen eines effektiven Clusters, so sind die Orientierungen den zuvor erläuterten Definitionen entsprechend, im effektiven Cluster richtig implementiert. Damit kann ein effektives Cluster direkt erstellt werden, ohne einen expliziten Übergang, wie in Bild 3.4 gezeigt, durchführen zu müssen. Diesbezüglich zeigen wir ein Beispiel für ein effektives Cluster in Bild 3.5. Dieses Cluster wurde auf dem eben beschriebenen Weg erstellt und ist damit mit den zuvor getroffenen Orientierungen kompatibel.

Wird in einem makroskopischen System die Translationssymmetrie gebrochen, liegt eine Einheitszelle vor. Man erreicht über Translation um einen Gittervektor translationssymmetrisch äquivalenten Punkten des Systems, so dass das makroskopische System beschrieben wird. Auf die gleiche Art definieren wir nun (periodische) Cluster über Vektoren, die translationssymmetrische Punkte in einem makroskopischen System beschreiben sollen. Hier hilft die Vorstellung, dass man ein Cluster aus einem unendlich großen System ausschneidet, mit dem man das System dann überdecken kann. Das Cluster \mathcal{C} beinhaltet dann alle Plätze, die durch die Fläche der zwei Vektoren aufgespannt wird. Eine Verschiebung entlang der Cluster-Vektoren führt auf translationssymmetrisch gleiche Gitterplätze. Der Rand des Cluster kann aufgrund der Konstruktion immer periodisch diskutiert werden. Offene Randbedingungen für diese Cluster sind auch möglich. Natürlich geht im offenen Cluster die Interpretation der Gitterplätze als kristallographische

Punkte eines Gesamtsystems verloren. Im offenen System behindern zudem Randeffekte die Aussagen über den thermodynamischen Limes. Wir merken an, dass im Quantenfall sowohl in einem periodischen als auch offenen Cluster zudem finite-size-Effekte auftreten, wenn das System quantenmechanisch vollständig beschrieben wird. Typischerweise muss der thermodynamische Limes dann durch eine $1/N_C$ -Skalierung aus Clustern unterschiedlicher Größe gewonnen werden.

Die Vektoren, die das Cluster begrenzen, seien definiert als

$$\vec{a}_1^{\text{Cluster}} = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{\text{Cluster}} \\ a_{1,2}^{\text{Cluster}} \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2^{\text{Cluster}} = a \begin{pmatrix} a_{2,1}^{\text{Cluster}} \\ a_{2,2}^{\text{Cluster}} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

und sollen sich als Superposition der Einheitszellen-Vektoren 3.13 schreiben lassen. Dadurch ist garantiert, dass die Verschiebung eines Dimer-Platzes \vec{i} um den Vektor $\vec{a}_1^{\text{Cluster}}$ oder $\vec{a}_2^{\text{Cluster}}$ immer auf einen gleich-orientierten Platz zuweist und ein gültiges effektives Gitter entsteht.

Die Vektoren des Clusters schließen N_C Gitterplätze ein. N_C bestimmt sich aus dem Kreuz-Produkt der beiden Cluster-Vektoren zu

$$N = |\vec{a}_1^{\text{Cluster}} \times \vec{a}_2^{\text{Cluster}}| = a_{1,1}^{\text{Cluster}} a_{2,2}^{\text{Cluster}} - a_{1,2}^{\text{Cluster}} a_{2,1}^{\text{Cluster}} \quad (3.20)$$

wobei N_C wegen der Konstruktion aus Einheitszellen immer gerade ist.

Da in einem großen Teil dieser Arbeit die 4-Bein-Röhre besprochen wird, definieren wir die Cluster der 4-Bein-Röhre mit den eben beschriebenen Cluster-Vektoren separat. Die Cluster-Vektoren einer 4-Bein-Röhre haben die folgende Gestalt

$$\vec{a}_1^{\text{Cluster}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2^{\text{Cluster}} = a \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (3.21)$$

Die Vektoren des Clusters umranden immer einen rechteckig geformten Bereich. Dabei hat das Cluster stets eine Höhe von vier Gitterplätzen und eine Breite von x Dimer-Plätzen. Damit die Anzahl an Plätzen gerade ist, soll x immer einen geraden Integer-Wert annehmen. Da es sich um rechteckige Cluster handelt, führen wir die Schreibweise

$$\mathcal{C}^{x-4, \text{Randbedingung}} \quad (3.22)$$

ein. Der Rand in x -Richtung soll offen oder periodisch gewählt werden können und der Rand in y -Richtung soll immer periodisch sein. Diese beiden Möglichkeiten fassen wir zusammen mit den zwei möglichen Randbedingungen y und xy . Eine hilfreiche Vorstellung der 4-Bein-Röhre entsteht, wenn man sich der Topologie eines Zylinders für diese Cluster bewusst wird. Die 4-Bein-Röhre $\mathcal{C}^{16-4,xy}$ ist in Bild 3.5 gezeigt. Zur Erhöhung der Übersicht sind die Kopplungstypen als Zahlen 0 und 1 ausgeschrieben und an den Dimer-Plätzen sind zudem die vertikale bzw. horizontale Dimer-Orientierungen zu sehen.

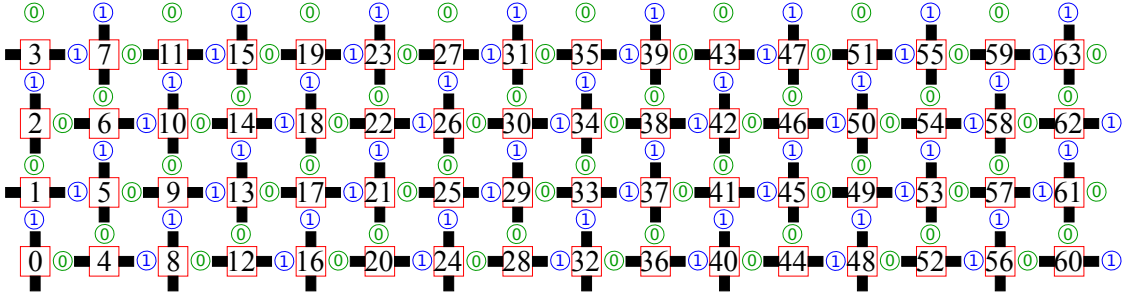


Abbildung 3.5: Das Cluster $\mathcal{C}^{16-4,xy}$ der Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre ist gezeigt. Kopplungs-Typen und Dimer-Orientierung sind für eine bessere Übersicht eingezeichnet. 4-Bein-Röhren sind immer rechteckig, wobei eine Röhre vier Plätze in y-Richtung umfasst und sich periodisch in diese Raumrichtung fortsetzt. Das gezeigte Cluster ist 16 Plätze in x-Richtung breit. Der Rand in x-Richtung ist ebenfalls periodisch und demnach bezeichnen wir die Randbedingung des Clusters als xy .

3.1.3 Physik der Störung

Wir betrachten nun, was die Störung konkret auf einem Paar von Nächste-Nachbar-Dimeren bewirkt. Wir beginnen mit einer einzelnen, festen Kopplung vom Kopplungstyp 0. Dazu konzentrieren wir uns auf die benachbarten Plätze bei \vec{i}_v und \vec{j}_h , genauso wie in Bild 3.3 oben links abgebildet. Der vertikale Dimer am Gitterplatz \vec{i}_v wechselwirkt mit seinen beiden Spins mit dem Dimer rechts daneben ($\vec{\delta}_r = (1, 0)^T$), wobei beide Spins von \vec{i}_v an den Spin (1) des rechten Dimers am Platz $\vec{j}_h = \vec{i}_v + \vec{\delta}_r$ koppeln. Diesen speziell herausgegriffenen Teil der Störung bezeichnen wir mit $\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0}$ ¹. Wir werden die Kopplung für diesen Fall ein weiteres Mal angeben. Dazu achten wir zunächst nur auf den Stör-Operator und vernachlässigen die Kopplungskonstante J'/J . Wir nutzen die hilfreiche Darstellung der Spin-Aufsteiger- und Spin-Absteiger-Operatoren $\vec{S}_i^+ \vec{S}_j^- = 1/2 \left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) + S_i^z S_j^z$, um die Störung $\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0}$ wie folgt zu schreiben:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} &= \left(S_{\vec{i}_v}^{v,(1)} + S_{\vec{i}_v}^{v,(2)} \right) S_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} = S_{\vec{i}_v}^{v,(1)} S_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} + S_{\vec{i}_v}^{v,(2)} S_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} \\ &= \frac{1}{2} \left(S_{\vec{i}_v}^{v,(1)} \right)^+ \left(S_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} \right)^- + \frac{1}{2} \left(S_{\vec{i}_v}^{v,(1)} \right)^- \left(S_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} \right)^+ + \left(S_{\vec{i}_v}^{v,(1)} \right)^z \left(S_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} \right)^z \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(S_{\vec{i}_v}^{v,(2)} \right)^+ \left(S_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} \right)^- + \frac{1}{2} \left(S_{\vec{i}_v}^{v,(2)} \right)^- \left(S_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} \right)^+ + \left(S_{\vec{i}_v}^{v,(2)} \right)^z \left(S_{\vec{i}_v + \vec{\delta}_r}^{h,(1)} \right)^z . \end{aligned} \quad (3.23)$$

Dabei sind die Spinoperatoren über ihre Darstellung als Paulimatrizen beschrieben, was die gebräuchlichste Art ist, die Spin-Algebra darzustellen. Wir definieren einen Spin hoch als $|\uparrow\rangle = (1, 0)^T$ und einen Spin runter als $|\downarrow\rangle = (0, 1)^T$. Damit sind die eben eingeführten Operatoren in

¹Die folgenden Rechnungen sind für die Wechselwirkung $\mathcal{V}_{\vec{i}_h, \vec{\delta}_o}^{\text{Typ } 0}$ (unten links in Bild 3.3) analog. Es sind lediglich die Indizes für vertikal und horizontal zu vertauschen.

der gewünschten Darstellung über

$$S^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = S^x + i S^y \quad \left| \quad S^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = S^x - i S^y \quad \left| \quad S^z = \frac{1}{2}\sigma^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (S^+ + S^-) \quad \left| \quad S^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2i} (S^+ - S^-)$$

gegeben. Weiterhin gilt

$$S^+|\uparrow\rangle = 0, S^+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \quad \left| \quad S^-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, S^-|\downarrow\rangle = 0 \quad \left| \quad S^z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle, S^z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle. \quad (3.25)$$

Wie im Kapitel über den ungestörten Anteil beschrieben, sind unsere Dimere in einem der vier Zustände $|s\rangle, |t^+\rangle, |t^0\rangle$ und $|t^-\rangle$. Da beide Dimere den lokalen Hilbertraum der Dimension vier haben, hat man für zwei Dimere einen Hilbertraum der Dimension 16. Wir sehen uns nun ein Beispiel für die Störung $\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0}$ an. Beginnen werden wir mit dem Zustand, in dem der Dimer auf Platz \vec{i}_v im Zustand $|t_{\vec{i}_v}^0\rangle$ ist und der Dimer auf Platz $\vec{j}_h = \vec{i}_v + \vec{\delta}_r$ im Zustand $|s_{\vec{j}_h}\rangle$ vorliegt. Lässt man die Störterm auf diesen Zustand wirken bekommt man

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^0\rangle |s_{\vec{j}_h}\rangle &= \frac{1}{2} S_{\vec{i}_v}^{+(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle + |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{i}_v} S_{\vec{j}_h}^{-(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{j}_h} \\ &+ \frac{1}{2} S_{\vec{i}_v}^{-(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle + |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{i}_v} S_{\vec{j}_h}^{+(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{j}_h} \\ &+ \frac{1}{2} \sigma_{\vec{i}_v}^{z(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle + |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{i}_v} \sigma_{\vec{j}_h}^{z(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{j}_h} \\ &+ \frac{1}{2} S_{\vec{i}_v}^{+(2)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle + |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{i}_v} S_{\vec{j}_h}^{-(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{j}_h} \\ &+ \frac{1}{2} S_{\vec{i}_v}^{-(2)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle + |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{i}_v} S_{\vec{j}_h}^{+(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{j}_h} \\ &+ \frac{1}{2} \sigma_{\vec{i}_v}^{z(2)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle + |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{i}_v} \sigma_{\vec{j}_h}^{z(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)}\downarrow^{(2)}\rangle - |\downarrow^{(1)}\uparrow^{(2)}\rangle \right)_{\vec{j}_h} \\ &= \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^+\rangle |t_{\vec{j}_h}^-\rangle - |t_{\vec{i}_v}^-\rangle |t_{\vec{j}_h}^+\rangle \right) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Nun da wir eine Beispielrechnung explizit durchgeführt haben, können die restlichen 15 Matrixelemente von Typ 0 an der Kopplung zwischen den beiden Plätzen \vec{i}_v und \vec{j}_h analog bestimmt werden. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^\pm\rangle |t_{\vec{j}_h}^\pm\rangle &\rightarrow \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^\pm\rangle |t_{\vec{j}_h}^\pm\rangle \right) \\ \mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^+\rangle |t_{\vec{j}_h}^-\rangle &\rightarrow \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^0\rangle |t_{\vec{j}_h}^0\rangle - |t_{\vec{i}_v}^+\rangle |t_{\vec{j}_h}^-\rangle + |t_{\vec{i}_v}^0\rangle |s_{\vec{j}_h}^-\rangle \right) \\ \mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^-\rangle |t_{\vec{j}_h}^+\rangle &\rightarrow \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^0\rangle |t_{\vec{j}_h}^0\rangle - |t_{\vec{i}_v}^-\rangle |t_{\vec{j}_h}^+\rangle - |t_{\vec{i}_v}^0\rangle |s_{\vec{j}_h}^+\rangle \right) \\ \mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^\pm\rangle |t_{\vec{j}_h}^0\rangle &\rightarrow \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^0\rangle |t_{\vec{j}_h}^\pm\rangle \pm |t_{\vec{i}_v}^\pm\rangle |s_{\vec{j}_h}^\pm\rangle \right) \\ \mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^0\rangle |t_{\vec{j}_h}^\pm\rangle &\rightarrow \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^\pm\rangle |t_{\vec{j}_h}^0\rangle \mp |t_{\vec{i}_v}^\pm\rangle |s_{\vec{j}_h}^\pm\rangle \right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^0\rangle |t_{\vec{j}_h}^0\rangle &\rightarrow \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^+\rangle |t_{\vec{j}_h}^-\rangle + |t_{\vec{i}_v}^-\rangle |t_{\vec{j}_h}^+\rangle \right) \\
\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^+\rangle |s_{\vec{j}_h}^-\rangle &\rightarrow \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^+\rangle |t_{\vec{j}_h}^0\rangle - |t_{\vec{i}_v}^0\rangle |t_{\vec{j}_h}^1\rangle \right) \\
\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^-\rangle |s_{\vec{j}_h}^-\rangle &\rightarrow \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^0\rangle |t_{\vec{j}_h}^-\rangle - |t_{\vec{i}_v}^-\rangle |t_{\vec{j}_h}^0\rangle \right) \\
\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |t_{\vec{i}_v}^0\rangle |s_{\vec{j}_h}^-\rangle &\rightarrow \frac{1}{2} \left(|t_{\vec{i}_v}^+\rangle |t_{\vec{j}_h}^-\rangle - |t_{\vec{i}_v}^-\rangle |t_{\vec{j}_h}^+\rangle \right) \\
\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |s_{\vec{i}_v}^-\rangle |t_{\vec{j}_h}^{\pm, 0}\rangle &\rightarrow 0 \\
\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} |s_{\vec{i}_v}^-\rangle |s_{\vec{j}_h}^-\rangle &\rightarrow 0 \quad .
\end{aligned}$$

Erinnern wir uns an die Definition der Erzeuger- und Vernichter-Operatoren der Teilchen (3.7), so können wir die Störung $\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0}$ der Kopplung der Plätze \vec{i}_v und \vec{j}_h als Summe der eben gezeigten Matrixelemente darstellen, wobei die folgende Reihenfolge der Reihenfolge in 3.27 entspricht

$$\begin{aligned}
2\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} &= \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^+ \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \hat{t}_{\vec{j}_h}^+ + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^- \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^- \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^- \hat{t}_{\vec{j}_h}^- + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^0 \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \hat{t}_{\vec{j}_h}^- \\
&- \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^- \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \hat{t}_{\vec{j}_h}^- + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \hat{t}_{\vec{j}_h}^- + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^0 \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^- \hat{t}_{\vec{j}_h}^+ \\
&- \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^- \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^+ \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^- \hat{t}_{\vec{j}_h}^+ + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^- \hat{t}_{\vec{j}_h}^+ + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^+ \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \hat{t}_{\vec{j}_h}^0 \\
&+ \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \hat{t}_{\vec{j}_h}^0 + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^- \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^- \hat{t}_{\vec{j}_h}^0 - \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^- \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^- \hat{t}_{\vec{j}_h}^0 \\
&+ \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^0 \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \hat{t}_{\vec{j}_h}^+ - \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \hat{t}_{\vec{j}_h}^+ + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^- \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^0 \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \hat{t}_{\vec{j}_h}^- \\
&+ \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^- \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \hat{t}_{\vec{j}_h}^- + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^- \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \hat{t}_{\vec{j}_h}^0 + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^- \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^+ \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \hat{t}_{\vec{j}_h}^0 \\
&+ \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^0 \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^+ - \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^+ \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^+ + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^- \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^- \\
&- \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^- \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^0 \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^- + \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^+ \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^- \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^0 - \left(\hat{t}_{\vec{i}_v}^- \right)^\dagger \left(\hat{t}_{\vec{j}_h}^+ \right)^\dagger \hat{t}_{\vec{i}_v}^0 \quad . \quad (3.28)
\end{aligned}$$

Der Operator $\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0}$ kann in drei Teile zerlegt werden. Diese drei Summanden unterscheiden sich in der Differenz von erzeugten und vernichteten Teilchen. Wir schreiben für die Störung an der betrachteten Kopplung

$$\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0} = \left(\mathcal{T}_{-1}^{\text{Typ } 0} \right)_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r} + \left(\mathcal{T}_0^{\text{Typ } 0} \right)_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r} + \left(\mathcal{T}_{+1}^{\text{Typ } 0} \right)_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r} \quad . \quad (3.29)$$

Der Teil $\left(\mathcal{T}_0^{\text{Typ } 0} \right)_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}$ enthält alle Terme aus jeweils zwei Vernichter- und Erzeuger-Operatoren. Physikalisch interpretiert, handelt es sich um Wechselwirkungen. Ein Wechselwirkungs-Prozess kann die Flavour zweier benachbarter Teilchen ändern. Aufgrund der Symmetrie der Heisenberg-Wechselwirkungen im ursprünglichen Shastry-Sutherland-Spin-Modell, ändern die Matrixelemente der Wechselwirkung die Gesamtspin-Quantenzahl nicht. Konkret erhalten die Matrixelemente der Kopplung der beiden Triplets den Gesamt-Spin \vec{S}_{Tot} und die totale Magnetisierung in z-Richtung S_z .

Die Prozesse $\left(\mathcal{T}_{+1}^{\text{Typ } 0} \right)_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}$ beinhalten alle Terme mit zwei Erzeuger- und einem Vernichter-Operator. Diese Prozesse erzeugen also auf einem freien Platz ein Triplet im System, wenn sich bereits ein Triplet auf einem der beiden wechselwirkenden Plätze befindet. Hier sei auf

die Drehimpuls-Erhaltung hingewiesen. Diese Prozesse erzeugen zwar ein weiteres Triplet, aber der Gesamtspin \vec{S}_{Tot} des System-Zustandes wurde nicht geändert. In einem klassischen und sehr rudimentären Bild, teilen sich nun beide Triplets den Drehimpuls, den das einzelne Triplet vor dem Prozess hatte. Dabei ist auf die Orientierung zu achten. Für den Kopplungstyp 0 gilt im Speziellen, dass das Triplet auf dem Platz \vec{i} sitzen muss. Die Störung des Kopplungstypen 0 zeigt ansonsten keine Matrixelemente, die ein Triplet am Ort \vec{j} einfügen. Weiter sei angemerkt, dass die Gesamt-Magnetisierung S^z beider Teilchen ebenfalls erhalten ist. Die Prozesse $(\mathcal{T}_{-1}^{\text{Typ } 0})_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}$ sind die hermitesch konjugierten Prozesse zu $(\mathcal{T}_1^{\text{Typ } 0})_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}$. Die Prozesse entfernen ein Triplet aus dem System, wenn die Störung auf zwei besetzte Plätze angewendet wird.

Wir haben eine feste Kopplung $\mathcal{V}_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}^{\text{Typ } 0}$ des Kopplungs-Typen 0 in das Teilchen-Bild überführt (siehe Gleichung 3.28). Dabei sind wir bereits auf die Einteilung in die Blöcke $(\mathcal{T}_{\pm 1, 0}^{\text{Typ } 0})_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r}$ eingegangen. Es handelt sich um die Kopplung oben links aus Bild 3.3. Die Kopplung $\mathcal{V}_{\vec{i}_h, \vec{\delta}_o}^{\text{Typ } 0}$ ergibt sich daraus trivial, wenn man den Dimer bei \vec{i} horizontal wählt und diesen Platz an den oberen Nachbarn ($\vec{\delta} = \vec{\delta}_o$) koppelt. Nun fehlen uns noch die beiden Kopplungen vom Typ 1 aus Bild 3.3. Wir fassen die Matrixelemente des Kopplungstypen 1 in Tabelle 3.1 zusammen. Der zu Formel 3.28 analoge Operator wird nicht explizit angegeben, denn es treten keine neuen physikalischen Prozesse auf. Die Rechnungen und Interpretationen sind analog zu dem präsentierten Vorgehen für Kopplungstyp 0. Der eigentliche Unterschied zwischen Typ 0 und Typ 1 findet sich in den beiden Blöcken $(\mathcal{T}_{\pm 1}^{\text{Typ } x})_{\vec{i}, \vec{j}}$. Bei Typ 0 muss das Teilchen auf Platz \vec{i} vorliegen, damit der Platz \vec{j} mit einem Triplet belegt wird. Beim Kopplungstypen 1 gibt es dagegen nur die analogen Matrixelemente, die ein Teilchen auf den Plätzen \vec{i} einfügen, wenn am Ort \vec{j} ein Teilchen vorliegt.

Wir schließen die Behandlung der Störung des Hamiltonoperators nun ab, indem wir die Brücke zur PCUT, definiert in Formel 3.1, schlagen. Wir müssen noch die globalen Operatoren T_{+1} , T_0 und T_{-1} nach Formel

$$\mathcal{V} = T_{-1} + T_0 + T_{+1} \quad (3.30)$$

definieren, die an jeder Kopplung des Clusters den passenden lokalen Operator $(\mathcal{T}_{\pm 1, 0}^{\text{Typ } x})_{\vec{i}, \vec{j}}$ wirken lassen. Diese Operatoren ergeben sich aber einfach durch eine Summe über alle vertikalen und horizontalen Gitterplätze. Dabei werden die Kopplungen zu den Nachbar-Dimeren, wie eingeführt, summiert. Damit sind die in Kapitel 2 eingeführten Operatoren T_{+1} , T_0 und T_{-1} für das Shastry-Sutherland-Modell gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{V} = T_{-1} + T_0 + T_{+1} &= \sum_{n \in \{+1, 0, -1\}} T_n \quad \text{mit} \\ T_n &= \sum_{\vec{i}_v} (\mathcal{T}_n^{\text{Typ } 0})_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_r} + (\mathcal{T}_n^{\text{Typ } 1})_{\vec{i}_v, \vec{\delta}_o} \\ &\quad + \sum_{\vec{i}_h} (\mathcal{T}_n^{\text{Typ } 1})_{\vec{i}_h, \vec{\delta}_r} + (\mathcal{T}_n^{\text{Typ } 0})_{\vec{i}_h, \vec{\delta}_o} \quad . \end{aligned}$$

$2\mathcal{T}_{+1}^{\text{Typ } 0}$			$2\mathcal{T}_{+1}^{\text{Typ } 1}$		
$ t^+\rangle s\rangle$	\rightarrow	$ t^+\rangle t^0\rangle$	$ s\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$ t^+\rangle t^0\rangle$
$ t^+\rangle s\rangle$	\rightarrow	$- t^0\rangle t^+\rangle$	$ s\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$- t^0\rangle t^+\rangle$
$ t^-\rangle s\rangle$	\rightarrow	$ t^0\rangle t^-\rangle$	$ s\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$ t^0\rangle t^-\rangle$
$ t^-\rangle s\rangle$	\rightarrow	$- t^-\rangle t^0\rangle$	$ s\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$- t^-\rangle t^0\rangle$
$ t^0\rangle s\rangle$	\rightarrow	$ t^+\rangle t^-\rangle$	$ s\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$ t^+\rangle t^-\rangle$
$ t^0\rangle s\rangle$	\rightarrow	$- t^-\rangle t^+\rangle$	$ s\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$- t^-\rangle t^+\rangle$
$2\mathcal{T}_0^{\text{Typ } 0}$			$2\mathcal{T}_0^{\text{Typ } 1}$		
$ t^\pm\rangle t^\pm\rangle$	\rightarrow	$ t^\pm\rangle t^\pm\rangle$	$ t^\pm\rangle t^\pm\rangle$	\rightarrow	$ t^\pm\rangle t^\pm\rangle$
$ t^\pm\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$ t^0\rangle t^\pm\rangle$	$ t^\pm\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$ t^0\rangle t^\pm\rangle$
$ t^0\rangle t^\pm\rangle$	\rightarrow	$ t^\pm\rangle t^0\rangle$	$ t^0\rangle t^\pm\rangle$	\rightarrow	$ t^\pm\rangle t^0\rangle$
$ t^+\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$ t^0\rangle t^0\rangle$	$ t^+\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$ t^0\rangle t^0\rangle$
$ t^+\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$- t^+\rangle t^-\rangle$	$ t^+\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$- t^+\rangle t^-\rangle$
$ t^-\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$ t^0\rangle t^0\rangle$	$ t^-\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$ t^0\rangle t^0\rangle$
$ t^-\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$- t^-\rangle t^+\rangle$	$ t^-\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$- t^-\rangle t^+\rangle$
$ t^0\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$ t^+\rangle t^-\rangle$	$ t^0\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$ t^+\rangle t^-\rangle$
$ t^0\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$ t^-\rangle t^+\rangle$	$ t^0\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$ t^-\rangle t^+\rangle$
$2\mathcal{T}_{-1}^{\text{Typ } 0}$			$2\mathcal{T}_{-1}^{\text{Typ } 1}$		
$ t^+\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$ t^+\rangle s\rangle$	$ t^+\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$ s\rangle t^+\rangle$
$ t^-\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$- t^-\rangle s\rangle$	$ t^-\rangle t^0\rangle$	\rightarrow	$- s\rangle t^-\rangle$
$ t^0\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$- t^+\rangle s\rangle$	$ t^0\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$- s\rangle t^+\rangle$
$ t^0\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$ t^-\rangle s\rangle$	$ t^0\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$ s\rangle t^-\rangle$
$ t^+\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$ t^0\rangle s\rangle$	$ t^+\rangle t^-\rangle$	\rightarrow	$ s\rangle t^0\rangle$
$ t^-\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$- t^0\rangle s\rangle$	$ t^-\rangle t^+\rangle$	\rightarrow	$- s\rangle t^0\rangle$

Tabelle 3.1: Prozesse der Störung \mathcal{V} im Teilchen-Bild sortiert nach Erzeugung und Vernichtung von Teilchen. Diese Prozesse sind direkt relevant für die PCUT. Die Tabelle ist so zu lesen, dass der linke Zustand jeweils den Zustand des Dimer am Ort \vec{i} zeigt. Der rechte Zustand gibt den Zustand des Dimers am Ort \vec{j} an. Dabei gehen wir von den Typen der effektiven Kopplungen und den Definitionen des Ortes \vec{j} aus, die in Bild 3.3 zu sehen sind.

Die Herleitung eines effektiven Modells bzw. die Bestimmung einer effektiven Observablen mit der PCUT haben wir in zwei Teile aufgespalten. Der erste Teil war modellunabhängig und besteht im Wesentlichen darin, einen noch modellunabhängige Formulierung des effektiven Hamiltonoperators bzw. der effektiven Observablen zu finden. Diesen Teil der PCUT haben wir im Kapitel 2 durchgeführt. Der modellabhängige Teil besteht darin, für das konkrete Modell die Operatoren T_{-1} , T_0 und T_{+1} zu bestimmen. Diese Operatoren werden sowohl im effektiven Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ (siehe Formel 2.12) als auch in der effektiven Observablen $\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ (siehe Formel 2.17) verwendet. Da die effektive Observable aber die Anzahl an Quasi-Teilchen nicht erhält, ist auch eine Zerlegung der Observablen in die Quasi-Teilchenzahl verändernden Bestandteile sinnvoll.

In dieser Arbeit befassen wir uns mit dem Verhalten des Shastry-Sutherland-Modells im transversalen Magnetfeld. Im endlichen Feld erwarten wir eine Magnetisierung des Systems. Die entsprechende Observable, die die transversale Magnetisierung misst, ist die z-Komponente des Spins S^z . Um die Beschreibung der Störung vollständig abzuschließen, geben wir nun für das Shastry-Sutherland-Modell die Zerlegung der relevanten Observable $S_i^z = \sum_{m=-\mathcal{N}'}^{\mathcal{N}'} (T_m^i)_{\vec{i}}$ an.

Die Rechnungen und Definitionen, die wir für die Zerlegung der Observablen nutzen, sind analog

$\mathcal{T}_{+1}^{\text{Spin 1}}$		$\mathcal{T}_{+1}^{\text{Spin 2}}$	
$ s\rangle$	\rightarrow	$1/2$	$ t^0\rangle$
$ s\rangle$	\rightarrow	$-1/2$	$ t^0\rangle$
$\mathcal{T}_0^{\text{Spin 1}}$		$\mathcal{T}_0^{\text{Spin 2}}$	
$ t^+\rangle$	\rightarrow	$1/2$	$ t^+\rangle$
$ t^+\rangle$	\rightarrow	$1/2$	$ t^+\rangle$
$ t^-\rangle$	\rightarrow	$1/2$	$ t^-\rangle$
$ t^-\rangle$	\rightarrow	$1/2$	$ t^-\rangle$
$\mathcal{T}_{-1}^{\text{Spin 1}}$		$\mathcal{T}_{-1}^{\text{Spin 2}}$	
$ t^0\rangle$	\rightarrow	$1/2$	$ s\rangle$
$ t^0\rangle$	\rightarrow	$-1/2$	$ s\rangle$

Tabelle 3.2: Prozesse des lokalen Operators $\mathcal{O} = S_i^z$ im Teilchen-Bild nach Erzeugung und Vernichtung von Teilchen sortiert.

zu denen für die Störung des Hamiltonoperators. Dabei ist die z-Komponente des Spins einfach durch $S_i^z = 1/2 \sigma_i^z$ (siehe Gleichung 3.24) gegeben. Die Observable ergibt sich durch einen lokalen Operator für einen festen Platz \vec{i} . Wir fassen die Magnetisierung an Spin (1) und Spin (2) am Ort \vec{i} als Operator $S_{\vec{i}}^{z,(\beta)}$ mit $\beta \in (1), (2)$ zusammen und definieren

$$S_{\vec{i}}^{z,(\beta)} = \left(T_{-1}'^{(\beta)}\right)_{\vec{i}} + \left(T_0'^{(\beta)}\right)_{\vec{i}} + \left(T_{+1}'^{(\beta)}\right)_{\vec{i}} = \sum_{m \in \{+1,0,1\}} \left(T_m'^{(\beta)}\right)_{\vec{i}} \quad \text{mit} \quad (3.31)$$

$$\left(T_m'^{(\beta)}\right)_{\vec{i}} = \left(\mathcal{T}_m^{\text{Spin } (\beta)}\right)_{\vec{i}} \quad .$$

Wir gehen an dieser Stelle nicht explizit auf die Berechnung der Matrixelemente ein. Da der Operator lokal ist, sind die Rechnungen trivial. Wir fassen die auftretenden Matrixelemente in Tabelle 3.2 zusammen. Die Zuordnung der Spins (1) und (2) auf einem Dimer an Platz \vec{i} ist wie zuvor definiert.

Nun haben wir alle Komponenten zusammen, um die PCUT für den Hamiltonoperator und die Magnetisierung in z-Richtung anzuwenden. Wir sind auf allgemeine methodische Aspekte bereits in Kapitel 2 eingegangen. In diesem Zusammenhang haben wir die Struktur des effektiven Modells präsentiert und die Fragestellung der PCUT auf die Bestimmung von Amplituden physikalischer (n -Teilchen-)Prozesse reduziert. Dabei sind wir bereits darauf eingegangen, wie und warum die nötigen Amplituden auf endlichen Clustern bestimmt werden können. Da wir nun die nötigen Operatoren $T_{\pm 1,0}$ bestimmt haben, gehen wir im nächsten Unterkapitel darauf ein, wie sich die Physik der $T_{\pm 1,0}$ -Operatoren im PCUT-Verfahren konkret äußert.

3.1.4 Linked-Cluster-Entwicklung für das Shastry-Sutherland-Modell

Die Linked-Cluster-Entwicklung haben wir in 2.1.2 bereits allgemein eingeführt. Wir erinnern daran, dass das effektive Modell die allgemeine Form

$$\mathcal{H}_0 := E_0 \quad (3.32)$$

$$\mathcal{H}_n := \sum_{\{\vec{i}\}_n, \{\vec{j}\}_n} A_{\{\vec{i}\}_n, \{\vec{j}\}_n} b_{\vec{j}_1}^\dagger \cdots b_{\vec{j}_n}^\dagger b_{\vec{i}_n} \cdots b_{\vec{i}_1} \quad (3.33)$$

besitzt (siehe auch Kapitel 2.1.2 Formel 2.21). Die Definitionen 3.32 beschreiben den effektiven Hamiltonoperator als Summe über irreduzible n -Teilchen-Prozesse. Die Aufgabe der Linked-Cluster-Entwicklung besteht darin, die noch unbekanntenen Amplituden $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n} b_{\vec{j}_1}^\dagger$ des effektiven Modells auf endlichen Systemen zu bestimmen. Dabei ist die Bestimmung der Amplituden über die Linked-Cluster-Entwicklung der effektivste Weg, die Amplituden zu gewinnen (siehe Kapitel 2.21). Wir erinnern daran, dass ein endliches System zur Bestimmung der thermodynamischen Amplituden reicht, weil der effektive Hamiltonoperator der PCUT (siehe Formel 2.12) cluster-additiv ist. Daher tragen nur zusammenhängende Prozesse bei, die eine endliche Reichweite haben.

Wie beschrieben können die Amplituden $A_{\{\vec{i}\}_n}^{\{\vec{j}\}_n} b_{\vec{j}_1}^\dagger$ über Matrixelemente auf endlichen Systemen (konkreter endlichen Clustern \mathcal{C} mit $N_{\mathcal{C}}$ -Dimer-Plätzen) bestimmt werden (siehe Kapitel 2.1.2). Die vollen Matrixelemente eines endlichen Clusters \mathcal{C} sind definiert als

$$\langle \{\vec{j}\}_n | \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} | \{\vec{i}\}_n \rangle = {}^{\mathcal{C}} A_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} \quad . \quad (3.34)$$

Wir betonen, dass die Zustände $|\{\vec{i}\}_n\rangle$ und $|\{\vec{j}\}_n\rangle$ auf dem endlichen Cluster \mathcal{C} definiert sind.

Im vorherigen Kapitel haben wir die Störung als Summe der lokalen Operatoren $\left(\mathcal{T}_{\pm 1,0}^{\text{Typ } 0,1}\right)_{\vec{i},\vec{j}}$ bestimmt und die konkreten Matrixelemente angegeben. Dabei haben wir besonders hervorgehoben, dass die Matrixelemente die Symmetrie des Shastry-Sutherland-Modells erfüllen. Konkret sind der Gesamtspin S und die Magnetisierung in z -Richtung S^z Erhaltungsgrößen des Modells. Wir werden uns mit dem Verhalten im transversalen Magnetfeld $\vec{B} = B_z \vec{e}_z$ in dieser Arbeit beschäftigen. Der Hamiltonoperator im Feld schreibt sich gemäß

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Gesamt}} &= \mathcal{H}_{\text{Shastry-Sutherland}} + \mathcal{H}_{\text{Magnetfeld}} \Leftrightarrow \\ \mathcal{H}_{\text{Gesamt}} &= \sum_{(\vec{i},\vec{j})} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} + \frac{J'}{J} \sum_{[\vec{i},\vec{j}]} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} + \frac{B_z}{J} \sum_{\vec{i}} S_{\vec{i}}^z \\ &= \sum_{(\vec{i},\vec{j})} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} + \lambda \sum_{[\vec{i},\vec{j}]} \vec{S}_{\vec{i}} \vec{S}_{\vec{j}} + h \sum_{\vec{i}} S_{\vec{i}}^z \quad , \end{aligned} \quad (3.35)$$

wobei der Hamiltonoperator des Feldes die Amplitude $h = B_z/J$ hat.

Im endlichen Feld profitiert das t^+ -Tripletts von einem Energie-Gewinn, auf den wir gleich zu sprechen kommen werden. Zustände mit einer unterschiedlichen Anzahl an t^+ -Tripletts korrespondieren zu (per Symmetrie getrennten) Magnetisierungs-Zuständen mit Quantenzahl $S_{\text{Total}}^z \propto n_{t^+}$. Hier ist $n_{t^+} = N_{t^+}/N_{\mathcal{C}}$ die Dichte von t^+ -Tripletts mit der absoluten Anzahl von t^+ -Tripletts N_{t^+} . Die Zustände verschiedener Magnetisierung bzw. verschiedener Dichte n_{t^+} mischen daher aufgrund der Erhaltung der Symmetrie nicht mit den Kanälen anderer Magnetisierung bzw. anderer Dichte. Sollte es möglich sein, einen Kanal als relevant zu bestimmen, so könnten wir das effektive Modell 3.32 auf Terme dieses Kanals beschränken und die gesamte Niederenergie-Physik in einem reduzierten effektiven Modell erfassen. Dieser Fall liegt gerade vor, wenn wir das Shastry-Sutherland-Modell im endlichen Feld betrachten. Wir werden für die gesamte Arbeit

das effektive Modell des Kanals mit maximalem Gesamtspin S und maximaler Magnetisierung S_z nutzen. Nun gehen wir auf die Argumente ein, warum die relevante Niederenergie-Physik im endlichen Feld in dem genannten Kanal liegen sollte.

Aus Symmetriegründen können wir die Terme des effektiven Modells weiter in die verschiedenen magnetischen Kanäle aufspalten. Dabei haben wir angedeutet, dass der Kanal mit maximalem Drehimpuls und maximaler Magnetisierung der relevante Kanal für das Shastry-Sutherland-Modell im endlichen Magnetfeld ist. Im endlichen Feld liegt zwischen diesen Kanälen eine energetische Lücke. Dazu betrachten wir Bild 3.6, dass die Zeeman-Aufspaltung des lokalen Spektrums des ungestörten Hamiltonoperators \mathcal{H}_0 demonstriert. Das t^+ -Tripletts erfährt einen Energie-Gewinn, der proportional ist zur dominanten Inner-Dimer-Wechselwirkung. Bezeichnen wir nun alle Positionen mit Tripletts in einem System (mit beliebigen Flavourn) als $\{\vec{i}\}_n$, so zeigen die Zustände $|\{\vec{i}\}_n\rangle$ eine signifikante Energie-Reduktion für jedes t^+ -Tripletts des Zustandes. Das (normierte) ungestörte Spektrum zeigt eine Kopplungskonstante von 1. Die Tripletts gewinnen linear mit dieser Kopplungskonstante an Energie $E_{\text{Feld}} = -N_{t^+} \cdot h$. Die Störung liegt hingegen in einer Energieskala von J'/J .

Betrachten wir dieses Argument nun für kleine Störparameter J'/J , so liegen die Quantenfluktuationen, die von der Störung induziert werden in einer geringeren Energieskala. Die Quantenfluktuationen können also die Energiedifferenz der (per Symmetriehaltung getrennten) Magnetisierungs-Kanäle nicht schließen. Entsprechend muss in einem endlichen Feld für kleine J'/J der Grundzustand im Unterraum mit maximalem Drehimpuls S und maximaler Magnetisierung S_{Total}^z liegen. Daher reicht es also, für das effektive Modell nur die Beiträge genau dieses Kanals zu betrachten.

Wir betrachten das eben genannte Argument für Störparameter, die in der Größenordnung von $J'/J = 0.5$ bis 0.7 liegen, also der Größenordnung, die auch in Material $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ vorliegt. Zwischen den magnetischen Kanälen liegt noch immer eine Lücke in der Größenordnung der Inner-Dimer-Wechselwirkung vor. Die Quantenfluktuationen, die von der Störung induziert werden, haben nun eine deutlich größere Energieskala. Es kann daher zu Überschneidungen kommen, so dass die eben genannte Energie-Hierarchie der magnetischen Kanäle nicht mehr vorhanden ist. Ein Beispiel für so einen Fall liegt in der Shastry-Sutherland-Zwei-Bein-Röhre vor (siehe Kapitel 1.6 oder Quelle [98]). Hier wird ein Plateau der Dichte $1/5$ für $J'/J \approx 0.6$ bis $J'/J \approx 0.7$ gefunden. In diesem Plateau lokalisieren gebundene Zustände. Der gebunden Zustand hat gerade die Quantenzahlen $S^{\text{Tot}} = 3$ und $S^z = 2$.

Wir erinnern uns an den aktuellen Forschungsstand des zwei-dimensionalen Modells aus Kapitel 1.3 für das Experiment und aus Kapitel 1.6 für die Theorie. Im zwei-dimensionalen Modell findet sich kein Hinweis darauf, dass Quantenfluktuationen einen Zustand stabilisieren, der nicht aus dem Kanal maximaler Magnetisierung kommt. Das angesprochene Argument der Energie-Hierarchie, die von den Quantenfluktuationen nicht verletzt wird, scheint zu halten. Wir betonen,

dass dies selbst für nennenswerte Energieskalen von J'/J gegeben ist. Sowohl die Magnetisierungsplateaus aus lokalisierten Triplets [86] [87] [90] [81] und die neuartigen Plateaus aus lokalisierten gebundenen Zuständen [92] (für den Bereich niedriger Magnetisierung), als auch die Streifen-Strukturen (für mittlere Magnetisierung) liegen im Kanal maximalem Gesamtspins und maximaler Magnetisierung. Für das zwei-dimensionale Modell sehen wir keine Hinweise darauf, dass das präsentierte Bild des reduzierten effektiven Modells (aufgrund der Energieskalen) die Physik nicht beschreibt. Wir treffen an dieser Stelle die Annahme, dass dies auch in der Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre der Fall ist, da dieses System sehr nah am zwei-dimensionalen Modell ist. Wir beschränken uns daher auf den erwähnten Kanal maximaler Magnetisierung im effektiven Modell der 4-Bein-Röhre.

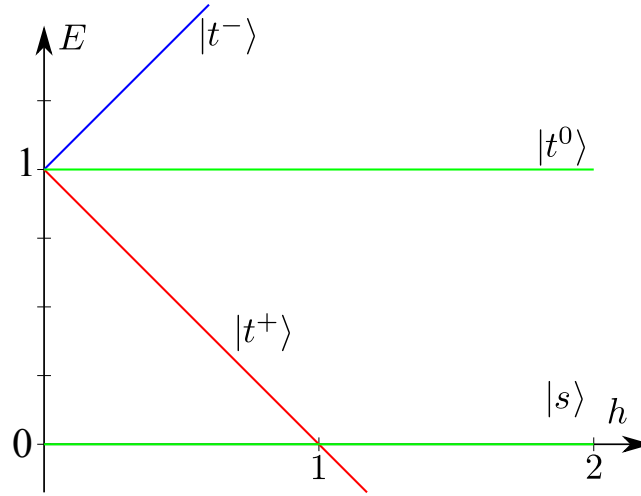


Abbildung 3.6: Das lokale Spektrum eines Dimers im Magnetfeld $h = B_z/J$ am Ort \vec{i} . Entsprechend der Magnetisierung S^z des Zustandes erhöht oder senkt sich die Energie des Zustandes. Das t^+ -Triplet gewinnt linear die Energie $E_{\vec{i}, m_{\vec{i}}=t^+}^{\text{Feld}} = -h$ und das t^- -Triplet verliert entsprechend die Energie $E_{\vec{i}, m_{\vec{i}}=t^-}^{\text{Feld}} = h$. Die unmagnetischen Zustände (das Singulett und das t^0 -Triplet) bleiben energetisch konstant für jedes endliche Magnetfeld h .

Wir gehen an dieser Stelle auf das Argument der Energie-Hierarchie ein. Wir werden argumentieren, dass die Energie-Hierarchie der magnetischen Kanäle des ungestörten Hamiltonoperators \mathcal{H}_0 für jedes endliche J'/J weiterhin gilt. Dies ist wiederum eine Konsequenz der Symmetrienerhaltung der Störung des Shastry-Sutherland-Modells. Ein Zustand, der die Quantenfluktuationen der Störung enthält ($\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}|\{\vec{i}\}_n\rangle$) oder während der Rechnung durch die Wirkung verschiedener Operatoren ($\mathcal{T}_{\pm 1,0}^{\text{Typ } 0,1}$) $_{\vec{i},\vec{j}}$ entstanden ist, hat immer dieselbe totale Magnetisierung S_{Total}^z wie der Zustand $|\{\vec{i}\}_n\rangle$. Das bedeutet, dass die Energiereduktion im endlichen Feld immer gleich ist, da die relevante Quantenzahl S_{Total}^z , die für die Energiereduktion im Magnetfeld sorgt, per Symmetrie erhalten ist. In dieser Beobachtung liegt ein sehr wichtiger Punkt, der die Berechnungen deutlich erleichtert.

Die Magnetisierung im System kann im endlichen Feld nicht geändert werden, was physikalisch daran liegt, dass der Shastry-Sutherland-Hamiltonoperator mit dem Magnetfeld-Hamiltonoperator kommutiert. Da die Magnetisierung nicht geändert wird, kann man die Rechnungen für das

Shastry-Sutherland-Modell zunächst im feldfreien Fall im gewünschten Drehimpuls-Kanal durchführen. Dies liefert die feldfreie Grundzustandsenergie $E_{n_{t^+}}^{h=0}$ im magnetischen Kanal $S^z \propto n_{t^+}$. Die energetische Verschiebung $E_{n_{t^+}}^{\text{Feld}}$ im endlichen Magnetfeld kann nachträglich addiert werden. Damit ergibt sich die Energie im Magnetfeld $E_{n_{t^+}}^{h \neq 0}$ für den magnetischen Kanal $S^z \propto n_{t^+}$ zu

$$\begin{aligned} E_{n_{t^+}}^{h \neq 0} &= E_{n_{t^+}}^{h=0} - h \cdot N_{t^+} = E_{n_{t^+}}^{h=0} - h \cdot g \mu_{\text{Bohr}} S_{\text{Total}}^z \\ \frac{E_{n_{t^+}}^{h \neq 0}}{N_C} &= \frac{E_{n_{t^+}}^{h=0}}{N_C} - h \cdot n_{t^+} \quad . \end{aligned} \quad (3.36)$$

Das Magnetfeld nachträglich bzw. unabhängig zu betrachten ist aufgrund der Symmetrienerhaltung exakt. Daher werden wir uns im Folgenden mit den Eigenschaften des Kanals mit maximalem Drehimpuls im feldfreien Fall beschäftigen. Der Fall für endliches Feld ergibt sich durch eine triviale Verschiebung der Energie und das endliche Feld beeinflusst den Zustand des Systems nicht weiter.

Aus den eben beschriebenen Gründen, interessieren uns nur die Terme des effektiven Hamiltonoperators 3.32, die maximalen Drehimpuls und maximale Magnetisierung aufweisen. Dies ist gleichbedeutend damit, dass es sich bei allen Triplets im System um t^+ -Triplets handeln muss. Die Zustände des Clusters für die Matrixelemente 3.34 sollen aus dem Unterraum $m_{\vec{i}} \in [s, t^+]$ stammen. Entsprechend nutzen wir den folgenden Unterraum von Zuständen der Eigen-Basis des ungestörten Systems

$$|0\rangle \quad \text{Grundzustand bzw. Teilchen-Vakuum} \quad (3.37)$$

$$|0\rangle = \bigotimes_{\vec{i} \in \mathcal{C}}^{N_C} |s_{\vec{i}}\rangle$$

$$|\vec{i}_1\rangle \quad \text{Zustand mit einem } t^+\text{-Triplet am Platz } \vec{i}_1 \quad (3.38)$$

$$|\vec{i}_1\rangle = \bigotimes_{\vec{i} \in \mathcal{C}, \vec{i} \neq \vec{i}_1}^{N_C-1} |s_{\vec{i}}\rangle \otimes |t_{\vec{i}_1}^+\rangle$$

$$|\vec{i}_1 \vec{i}_2\rangle \quad \text{Zustand mit zwei } t^+\text{-Triplets an den Plätzen } \vec{i}_1 \text{ und } \vec{i}_2 \quad (3.39)$$

$$|\vec{i}_1 \vec{i}_2\rangle = \bigotimes_{\vec{i} \in \mathcal{C}, \vec{i} \neq \{\vec{i}_1, \vec{i}_2\}}^{N_C-2} |s_{\vec{i}}\rangle \otimes |t_{\vec{i}_1}^+\rangle \otimes |t_{\vec{i}_2}^+\rangle$$

$$|\{\vec{i}\}_n\rangle \quad \text{Zustand mit } n \text{ } t^+\text{-Triplets an den Plätzen } \vec{i}_1, \vec{i}_2, \dots, \vec{i}_n \quad (3.40)$$

$$|\{\vec{i}\}_n\rangle = \bigotimes_{\vec{i} \in \mathcal{C}, \vec{i} \neq \{\vec{i}\}_n}^{N_C-n} |s_{\vec{i}}\rangle \bigotimes_{\{\vec{i}\}_n}^n |t_{\vec{i}_n}^+\rangle \quad .$$

Diese Basis entspricht der allgemeinen Definition der Basis des ungestörten Systems \mathcal{H}_0 (siehe auch Gleichung 2.27 aus Kapitel 2.1.2).

Es ist zu beachten, dass die reduzierte Basis nur die Zustände auf der linken und rechten Seite des Matrixelementes 3.34 darstellt. Wirken wir mit einem $(\mathcal{T}_{\pm 1,0}^{\text{Typ } 0,1})_{\vec{i},\vec{j}}$ -Operator, so können natürlich virtuell Triplets mit den Flavourn t^0 und t^- auftreten. Der Vollständigkeit halber geben

wir daher eine allgemeine Definition einer Basis an. Wir kombinieren die allgemeine Definition einer Basis für Hardcore-Bosonen (Gleichung 2.27) aus dem allgemeinen Kapitel zur Linked-Cluster-Entwicklung 2.1.2, mit der konkreten Eigen-Basis der Dimere des ungestörten Shastry-Sutherland-Modells (Gleichung 3.5), die vier lokale Zustände enthält ($m_{\vec{i}} \in [s_{\vec{i}}, t_{\vec{i}}^+, t_{\vec{i}}^0, t_{\vec{i}}^-]$). Die Idee besteht wieder darin, nur die n Plätze $\{\vec{i}\}_n$ zu notieren, die ein Triplet tragen (nach Basis 2.27). Der Index des Platzes ist zusätzlich um den Flavour zu erweitern ($\vec{i} \rightarrow m_{\vec{i}}$). Die Basis, die in den Rechnungen verwendet werden muss, ist daher gegeben durch

$$|0\rangle \quad \text{Grundzustand bzw. Teilchen-Vakuum} \quad (3.41)$$

$$|0\rangle = \bigotimes_{\vec{i} \in \mathcal{C}}^{N_{\mathcal{C}}} |s_{\vec{i}}\rangle$$

$$|m_{\vec{i}_1}\rangle \quad \text{Zustand mit einem Triplet am Platz } \vec{i}_1 \quad (3.42)$$

$$|m_{\vec{i}_1}\rangle = \bigotimes_{\vec{i} \in \mathcal{C}, \vec{i} \neq \vec{i}_1}^{N_{\mathcal{C}}-1} |s_{\vec{i}}\rangle \otimes |m_{\vec{i}_1}\rangle$$

$$|m_{\vec{i}_1} m_{\vec{i}_2}\rangle \quad \text{Zustand mit zwei Triplets an den Plätzen } \vec{i}_1 \text{ und } \vec{i}_2 \quad (3.43)$$

$$|m_{\vec{i}_1} m_{\vec{i}_2}\rangle = \bigotimes_{\vec{i} \in \mathcal{C}, \vec{i} \neq \{\vec{i}_1, \vec{i}_2\}}^{N_{\mathcal{C}}-2} |s_{\vec{i}}\rangle \otimes |m_{\vec{i}_1}\rangle \otimes |m_{\vec{i}_2}\rangle$$

$$|\{m_{\vec{i}}\}_n\rangle \quad \text{Zustand mit } n \text{ Triplets an den Plätzen } \vec{i}_1, \vec{i}_2, \dots, \vec{i}_n \quad (3.44)$$

$$|\{m_{\vec{i}}\}_n\rangle = \bigotimes_{\vec{i} \in \mathcal{C}, \vec{i} \neq \{\vec{i}\}_n}^{N_{\mathcal{C}}-n} |s_{\vec{i}}\rangle \bigotimes_{\{\vec{i}\}_n}^n |m_{\vec{i}_n}\rangle \quad .$$

Dabei sollen die Flavour $m_{\vec{i}}$ eines Basis-Zustandes immer einem Triplet-Flavour $m_{\vec{i}} \in [t_{\vec{i}}^+, t_{\vec{i}}^0, t_{\vec{i}}^-]$ entsprechen. Es gilt $m_{\vec{i}} = s_{\vec{i}}$ für alle nicht angegebenen Plätze. Wir merken an, dass es sich zudem immer um Zustände eines Unterraums der Basis des ungestörten Hamiltonoperators handelt, denn die Zustände haben während der Rechnung alle dieselbe Magnetisierung S_{Total}^z .

Wir kommen nun zu der Physik des effektiven Modells und beginnen damit, die irreduziblen Ein-Einteilchen-Amplituden des (reduzierten) effektiven Modells zu diskutieren. Dabei können wir die Bestimmung des Grundzustandsbeitrags überspringen. Der Grundzustand des feldfreien Modells (die vollständige Belegung mit Singulets) ist ein exakter Eigenzustand mit Energie $E_0 = -3/4 N_{\mathcal{C}}$. Diese (bekannte) Modell-Eigenschaft lässt sich in den Matrixelementen der Tabelle 3.1 wiederfinden. Es existieren in keinem Operator-Block $T_{\pm 1,0}$ Prozesse, die auf zwei benachbarte Singulett-Zustände wirken.

Betrachten wir einen Zustand $|\vec{i}\rangle$, so tragen wie erläutert nur zusammenhängende Prozesse zur irreduziblen Ein-Teilchen-Amplitude bei. Wie sich dies konkret für das Shastry-Sutherland-Modell und die Ein-Teilchen-Amplituden äußert, haben wir in Bild 3.7 für einfache Operator-Sequenzen $T(\mathbf{m})$ zusammengefasst. Zunächst einmal muss eine Operator-Sequenz $T(\mathbf{m})$ mit einem oder mehreren T_{+1} -Operatoren beginnen. Alle anderen Matrixelemente verschwinden. Das Bild 3.7

zeigt, dass sich dadurch zusammenhängende Cluster aus benachbarten Triplets bilden. An Tabelle 3.1 sehen wir dann, dass die Matrixelemente aus den Blöcken des Operators T_0 nur zwischen zwei Triplets vermitteln. Dabei wirkt der Operator an einer Kopplung, die bereits von einem T_{+1} -Operator berührt wurde. Dasselbe gilt für einen T_{-1} -Operator. Diese Operatoren enthalten die hermitesch konjugierten Prozesse zu den Operatoren T_{+1} , d. h. dass nach der Wirkung von einem T_{-1} -Operator, wieder ein zusammenhängendes Cluster von Triplets übrig bleibt. Wir sehen an dieser simplen Zusammenfassung der Eigenschaften der Matrixelemente der Störung, dass nur zusammenhängende Cluster von Triplets während der Anwendung aller Operatoren der Sequenz $T(\mathbf{m})$ auftreten. Diese zusammenhängenden Cluster entsprechen den zusammenhängenden Prozessen, die in die irreduzible Ein-Teilchen-Amplitude einfließen.

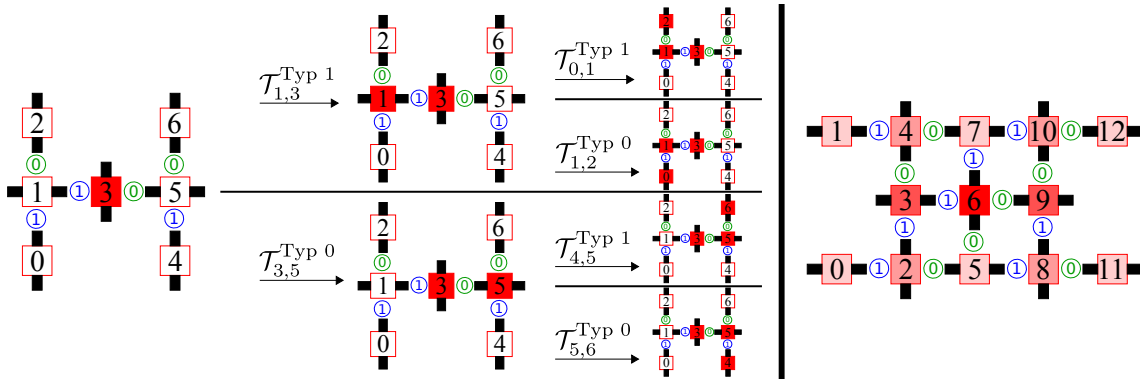


Abbildung 3.7: Wir zeigen die Auswirkungen der Operator-Sequenz $T(\mathbf{m}) = \dots T_{+1}T_{+1}$ auf einen Ein-Teilchen-Zustand $|3\rangle$ des linken Clusters. Aufgrund der Symmetrie des ersten Operators T_{+1} , gibt es nur Matrixelemente die auf den benachbarten Plätzen 1 und 5 ein weiteres Triplet erzeugen. Wir vernachlässigen hier zunächst die konkreten Flavour und möchten vielmehr demonstrieren, wie die zusammenhängenden Prozesse, nötig zur Berechnung von Ein-Teilchen-Amplituden des effektiven Modells, aussehen. Folgt in der Operator-Sequenz $T(\mathbf{m})$ ein weiterer T_{+1} -Operator, so bilden sich zusammenhängende Cluster aus drei Triplets, die den zusammenhängenden Prozessen entsprechen. Im rechten Teil des Bildes zeigen wir alle zusammenhängenden Prozesse die entstehen, wenn ein dritter T_{+1} -Operator wirkt. Die Größe der Cluster ist so angepasst, dass alle Prozesse auf das Cluster passen.

Wir haben zuvor bereits angedeutet, dass eine Kopplung, die von einem Operator $\left(\mathcal{T}_{+1}^{\text{Typ } 0,1}\right)_{\vec{i},\vec{j}}$ eine Wirkung erfahren hat, im Verlauf der Sequenz (mindestens) eine weitere Wirkung mit einem Operator erfahren wird. Die meisten Prozesse, die auf eine Kopplung ein zweites Mal wirken, führen den hermitesch konjugierten Prozess auf der Kopplung durch, so dass $T(\mathbf{m})|\vec{i}\rangle = A(\mathbf{m})|\vec{i}\rangle$ gilt. Diese Prozesse tragen zum Matrixelement des chemischen Ein-Teilchen-Potenzials $\mu = A_{\vec{i}}^{\vec{i}} = \langle \vec{i} | H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} | \vec{i} \rangle$ bei. Wir sehen, dass die Matrixelemente des Shastry-Sutherland-Modells erst in recht hohen Ordnungen einen Bruch mit dieser Einschränkung erlauben. Dies haben wir für einen Prozess der Operator-Sequenz $T(\mathbf{m}) = T_{-1}T_{-1}T_{-1}T_{+1}T_{+1}T_{+1}$ in Bild 3.8 dargestellt. In diesem Bild sehen wir, dass diese Operator-Sequenz in sechster Ordnung, zum ersten Mal einen Beitrag zu einer nicht-diagonalen irreduziblen Ein-Teilchen-Amplitude liefert. Dabei tritt in der Rechnung der Fall auf, dass zwei Triplets an einer Kopplung liegen, die zuvor noch keine Wirkung erfahren hat. Nun können weitere Matrixelemente an dieser Kopplung wirken. Eine explizite doppelte Wirkung an allen Kopplungen, die eine Wirkung erfahren haben, liefert daher nicht alle Prozesse. Dabei handelt es sich konkret um die Amplitude des diagonalen

Ein-Teilchen-Hüpfers. Aufgrund der Eigenschaften der Matrixelemente der $T_{\pm 1,0}$ -Operatoren ist dies auch der einzige Prozess mit endlicher Amplitude in sechster Ordnung (neben dem chemischen Potenzial). Die Tatsache, dass die Matrixelemente des Shastry-Sutherland-Modells zu einem reduzierten Ein-Teilchen-Hüpfen führen, wurde bereits in Arbeit [85] gezeigt und die PCUT reproduziert dieses perturbative Argument.

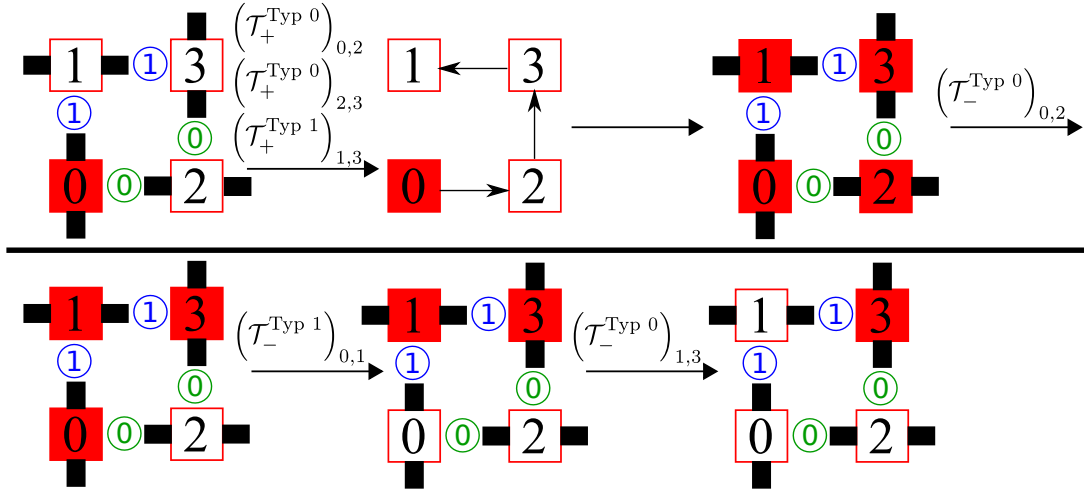


Abbildung 3.8: Es wird die Operator-Sequenz $T(m) = T_{-1}T_{-1}T_{-1}T_{+1}T_{+1}T_{+1}$ auf den Zustand $|0\rangle$ des Clusters mit vier Plätzen, wie oben links gezeigt, angewendet. Die ersten drei T_{+1} -Operatoren liefern u. a. das gezeigte zusammenhängende Cluster aus drei Tripletts. An den Plätzen 0 und 1 liegen nun zwei Tripletts an einer Kopplung. Die nun folgenden drei T_{-1} -Operatoren können auch an der Kopplung zwischen Platz 0 und 1 angreifen. Wir haben die konkreten Flavour vernachlässigt, aber die präsentierte Reihenfolge der T_{-1} -Operatoren ist möglich. Effektiv kann so ein Tripletts in sechster Ordnung diagonal hüpfen (siehe auch Quelle [85]).

Wir gehen nun kurz darauf ein, wie sich die zusammenhängenden Prozesse in Mehr-Teilchen-Amplituden äußern. In Ein-Teilchen-Amplituden haben wir die Bildung von zusammenhängenden Clustern gesehen. Das analoge Phänomen für Mehr-Teilchen-Prozesse ist erneut die Ausbildung von zusammenhängenden Clustern von Tripletts. Ein zusammenhängendes Cluster, das für die irreduzible n -Teilchen-Amplitude relevant ist, bildet im Laufe der Rechnung ein zusammenhängendes Cluster der n Tripletts an den ursprünglichen n belegten Plätzen $\{\vec{i}\}_n$ des Start-Zustandes $|\{\vec{i}\}_n\rangle$. Bilden sich zusammenhängende Cluster, aber es werden nicht alle n Teilchen im Laufe der Rechnung verbunden, so subtrahieren sich diese Beiträge bei der Anwendung des Subtraktions-Schemas (siehe Gleichung 2.35).

Wir haben uns kurz mit den Eigenschaften der Shastry-Sutherland-Modells hinsichtlich der Linked-Cluster-Entwicklung befasst. Dabei sind wir von Rechen-Clustern ausgegangen, die groß genug sind, die endlichen Reichweiten der zusammenhängenden Prozesse der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen zu erfassen. Die sich so ergebenden Amplituden sind die thermodynamisch relevanten Amplituden, die unabhängig vom Rechen-Cluster sind. Damit kann ein translationsinvariantes effektives Modell im thermodynamischen Limes abgeleitet werden. In den bisherigen Betrachtungen haben wir einen Punkt nicht explizit betrachtet, auf den wir nun aber hinweisen. Die PCUT kann ebenfalls dazu genutzt werden ein effektives Modell für ein endliches Cluster \mathcal{C} abzuleiten, worauf wir nun nachträglich eingehen.

Ist man nun explizit an den Eigenschaften eines Clusters \mathcal{C} interessiert, kann ein effektives Modell für das Cluster \mathcal{C} mit der PCUT ableitet werden. Dabei werden Randeﬀekte des Systems bzw. des Clusters \mathcal{C} explizit betrachtet. Die wesentliche Idee ist, die vollen Matrixelemente der PCUT 3.34 auch als Matrixelemente zu nutzen. Die PCUT führt so zu einer effektiven Matrix \mathcal{M} , die über

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_1^1 & \mathcal{M}_2^1 & \mathcal{M}_3^1 & \dots & \mathcal{M}_{d_{\mathcal{C}}}^1 \\ \mathcal{M}_1^2 & \mathcal{M}_2^2 & \dots & \dots & \mathcal{M}_{d_{\mathcal{C}}}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathcal{M}_1^{d_{\mathcal{C}}} & \mathcal{M}_2^{d_{\mathcal{C}}} & \dots & \dots & \mathcal{M}_{d_{\mathcal{C}}}^{d_{\mathcal{C}}} \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

definiert ist. Die Matrixelemente der Matrix \mathcal{M} sind über

$${}^{\mathcal{C}}\langle\beta|\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}|\alpha\rangle^{\mathcal{C}} = \mathcal{M}_{\alpha}^{\beta} \quad (3.46)$$

gegeben. Wir haben an dieser Stelle eine Durchnummerierung der (endlichen) Basis-Zustände des ungestörten Hamiltonoperators \mathcal{H}_0 auf dem Cluster \mathcal{C} angenommen. Dabei gilt nun $\alpha \in 1, 2, \dots, d_{\mathcal{C}}$ und $\beta \in 1, 2, \dots, d_{\mathcal{C}}$. Die Dimension $d_{\mathcal{C}}$ ist die volle Dimension der Matrix die sich ergibt, wenn man die Symmetrieerhaltung außer Acht lässt. Es gilt dann, dass $d_{\mathcal{C}}^{\text{voll}} = 4^{N_{\mathcal{C}}}$ ist, wenn wir alle vier lokalen Zustände in der Basis erlauben. Soll das System nachträglich im Magnetfeld diskutiert werden, so können wir uns wieder lokal auf zwei Zustände beschränken, so dass die Matrix die Dimension $d_{\mathcal{C}}^{\text{reduziert}} = 2^{N_{\mathcal{C}}}$ hat. Da der effektive Hamiltonoperator der PCUT, wie angesprochen, alle Symmetrien des Hamiltonoperators und zudem die Teilchenzahl erhält, kann eine effektive Matrix für die verschiedenen Quantenzahlen bestimmt werden, was die Dimension der Matrix wiederum deutlich reduziert.

Beim Aufstellung der Matrix \mathcal{M} ist es nicht nötig, alle Matrixelemente separat zu berechnen. Die Matrix kann aufgestellt werden, indem das Produkt des effektiven Hamiltonoperators $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ mit alle Basis-Zustände $|\alpha\rangle$ berechnet wird. Für den Zustand $|\alpha\rangle$ liefert die Rechnung die α -te Spalte der effektiven Matrix \mathcal{M} . Als Formel geschrieben, kann die Spalte der Matrix bestimmt werden über

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} |\alpha\rangle = \sum_{\beta=1}^{d_{\mathcal{C}}} \mathcal{M}_{\alpha}^{\beta} |\beta\rangle \quad . \quad (3.47)$$

Die Bestimmung einer effektiven Matrix \mathcal{M} für ein Cluster \mathcal{C} kann sinnvoll sein, wenn man einen Vergleich zu einer anderen Methode aufstellen, die nur Ergebnisse auf endlichen Systemen bestimmt. Nun haben wir ein definiertes Verfahren um aus einem Cluster \mathcal{C} mit Hilfe der PCUT ein effektives Modell in Form einer effektiven Matrix \mathcal{M} abzuleiten. Die Matrix kann dann über Diagonalisierungsverfahren gelöst werden. Die Herleitung der effektiven Matrix \mathcal{M} sieht vor, die gesamte Matrix dafür im RAM-Speicher zu bestimmen. Die Diagonalisierungs-Routine wird dann auf die Matrix im Speicher angewendet. Da es keine Möglichkeit gibt, dieses Verfahren abstrakter zu formulieren, kann die Speicherung der Matrix \mathcal{M} im RAM-Speicher nicht umgangen

werden. Aufgrund des Speicherverbrauchs und des exponentiell anwachsenden Hilbertraums mit der Cluster-Größe, können nur kleine endliche Cluster \mathcal{C} auf die präsentierte Art gelöst werden.

3.1.5 Effektives Modell in 2. Ordnung

Wir leiten das effektive (thermodynamische) Modell des Shastry-Sutherland-Modells in zweiter Ordnung im Störparameter J'/J ab. Das bedeutet, dass wir im effektiven Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ (siehe Gleichung 3.1) nur $T(\mathbf{m})$ -Operator-Sequenzen der Länge $|\mathbf{m}| < 3$ betrachten. Der effektive Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ schreibt sich in zweiter Ordnung als

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} = E_0 + Q + \frac{J'}{J} T_0 + \left(\frac{J'}{J}\right)^2 (T_{+1}T_{-1} - T_{-1}T_{+1}) \quad . \quad (3.48)$$

Die Koeffizienten der $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen sind $C(m) = 1$ bei $T(m) = T_0$ und $T(m) = T_{+1}T_{-1}$, sowie $C(m) = -1$ bei $T(m) = T_{-1}T_{+1}$ (siehe auch Tabelle 2.1).

Die Diskussion des effektiven Modells in zweiter Ordnung ist damit motiviert, dem Leser ein Gefühl für die auftretenden Terme zu geben und damit für die dominanten Prozesse des Modells. Dabei werden wir kinetische Prozesse in Form von korreliertem Hüpfen und Wechselwirkungen kennenlernen. Repulsive Dichte-Dichte-Wechselwirkungen haben hierbei die stärksten Amplituden. Plateau-Strukturen aus lokalisierten Triplets werden diese Wechselwirkungen daher grundsätzlich vermeiden. Die konkrete Struktur eines Plateaus aus lokalisierten Triplets bei kleiner Dichte muss dann durch die langreichweitigen Wechselwirkungen bestimmt werden, die erst in höheren Ordnungen auftreten.

Eine weitere Motivation das effektive Modell in zweiter Ordnung genauer zu diskutieren, ist die Idee, dass sich der Zustand eines Systems in führender Ordnung verstehen und erklären lassen muss. Terme mit kleineren Amplituden dienen dann als Korrekturen zu dem Bild der dominanten Prozesse. Wir merken an, dass die folgenden Terme eine sehr geringe Reichweite haben. Die folgenden Aussagen werden in ihrer Allgemeinheit sowohl für ein zweidimensionales Gitter gelten, als auch für die quasi-eindimensionale 4-Bein-Röhre. Nur bei der Anwendung auf eingeschränkte eindimensionale Systeme, wie einer Shastry-Sutherland-Kette oder der Shastry-Sutherland-2-Bein-Röhre, ist das folgende Modell anzupassen.

Bei dem effektiven Modell 3.48 handelt es sich um ein Modell im thermodynamischen Limes, bestimmt im Kanal des maximalen Gesamt-Spins S_{Total}^z . Die Prozesse beschränken sich daher ausschließlich auf t^+ -Triplets. Wir werden daher im Folgenden die Erzeuger-Operatoren und Vernichter-Operatoren der Triplets dieses Flavours mit b statt t^+ abkürzen. Konkret re-definieren wir den Erzeuger-Operator eines t^+ -Triplets am Ort \vec{i} zu $(t^+)_{\vec{i}}^{\dagger} \rightarrow b_{\vec{i}}^{\dagger}$ und den Vernichter-Operator eines t^+ -Triplets am Ort \vec{i} zu $(t^+)_{\vec{i}} \rightarrow b_{\vec{i}}$. Der Dichte-Operator $n_{\vec{i}}$ am Ort \vec{i} ist dann definiert über $n_{\vec{i}} = b_{\vec{i}}^{\dagger} b_{\vec{i}}$.

Da das ursprüngliche Shastry-Sutherland-Modell translationsinvariant ist, muss auch das effektive Modell diese Eigenschaft haben. Es ist aber zwischen den zwei Plätzen innerhalb der Einheitszelle des Modells zu unterscheiden. Wir werden im Folgenden die Orientierung des Dimer-Platzes mit einem vorangestellten Index (O) für eine Amplitude zusammenfassen, wobei (O) = (v) für vertikale Dimere und (O) = (h) für horizontale Dimere steht.

Wir geben an dieser Stelle daher eine explizite Re-Definition der Amplituden in einer translationsinvarianten Form an, die wir in Kapitel 2.1.2 in Formel 2.35 bereits angedeutet haben. Für die Amplituden nutzen wir die Notation

$$A_{\{\vec{i}\}_n, \{\vec{j}\}_n} \rightarrow (O) A_{\{\vec{\delta}_{\vec{j}-\vec{i}_1}^{\vec{j}}\}_n, \{\vec{\delta}_{\vec{i}-\vec{i}_1}^{\vec{i}}\}_{n-1}} \equiv (O) A_{\{\vec{\delta}^{\vec{j}}\}_n, \{\vec{\delta}\}_{n-1}} = (O) A_{\delta_n^{\delta_1^{\delta_1^{\delta_1^{\delta_1}}}, \dots, \delta_1^{\delta_1}} \dots, \delta_1} \quad (3.49)$$

Hier sind die Abstandsvektoren $\vec{\delta}_{\vec{j}-\vec{i}_1}^{\vec{j}}$ auf den Platz \vec{i}_1 bezogen, so dass $\vec{\delta}_{\vec{j}-\vec{i}_1}^{\vec{j}} = \vec{j} - \vec{i}_1$ gilt. Meistens werden wir den Index des Abstandsvektors als $\{\vec{\delta}_{\vec{j}-\vec{i}_1}^{\vec{j}}\}_{n-1} = \{\vec{\delta}\}_{n-1}$ schreiben. Dabei haben wir für den optischen Unterschied der Abstände der belegten Plätze der Erzeuger-Operatoren $\vec{\delta}_{\vec{j}-\vec{i}_1}^{\vec{j}}$ einen Apostroph eingeführt. Die Beiträge eines irreduziblen n -Teilchen-Hamiltonoperators können dann mit $\vec{\delta}_{\vec{j}-\vec{i}_1}^{\vec{j}} + \vec{i}_1 = \vec{j}$ in einer translationsinvarianten Form geschrieben werden

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_n &:= \sum_{\{\vec{i}\}_n, \{\vec{j}\}_n} A_{\{\vec{i}\}_n, \{\vec{j}\}_n} b_{j_1}^\dagger \cdots b_{j_n}^\dagger b_{i_n} \cdots b_{i_1} \\ &\rightarrow \sum_{(O), \{\vec{\delta}^{\vec{j}}\}_n, \{\vec{\delta}\}_{n-1}} (O) A_{\{\vec{\delta}_{\vec{j}-\vec{i}_1}^{\vec{j}}\}_n, \{\vec{\delta}\}_{n-1}} \sum_{\vec{i} \in (O)} b_{\vec{i}+\vec{\delta}_1}^\dagger \cdots b_{\vec{i}+\vec{\delta}_n}^\dagger b_{\vec{i}+\vec{\delta}_{n-1}} \cdots b_{\vec{i}+\vec{\delta}_1} b_{\vec{i}} \quad (3.50) \end{aligned}$$

Man beachte, dass die Linked-Cluster-Entwicklung zur Bestimmung der Amplituden unverändert bleibt.

Um die translationsinvariante Notation zu klären, betrachten wir die Amplitude eines translationsinvarianten 2-Teilchen-Terms. Nach Definition 3.49 schreibt sich die Amplitude eines (irreduziblen) 2-Teilchen-Prozesses $(O) A_{\vec{\delta}_1}^{\vec{\delta}_2, \vec{\delta}_1}$. Die Amplitude gehört zu einem Prozess, der an den Orten \vec{i} und $\vec{i} + \vec{\delta}_1$ zwei Teilchen vernichtet. Der Dimer am Ort \vec{i} hat die Orientierung (O). Der Prozess erzeugt dann zwei t^+ -Triplets an den Orten $\vec{i} + \vec{\delta}_1$ und $\vec{i} + \vec{\delta}_2$. Ist das Triplet am Ort \vec{i} im Prozess eine lokale Dichte, so sieht man dies daran, dass der Abstand $\vec{\delta}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ist. Dieser Index findet sich in der Notation oben rechts und die 2-Teilchen-Amplitude hat die Gestalt $(O) A_{\vec{\delta}_1}^{\vec{\delta}_2, (0,0)}$. Liegt eine zweite Dichte im System vor, so gilt $\vec{\delta}_2 = \vec{\delta}_1 = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$. Diese beiden Abstände stehen in der Notation aber direkt übereinander und es ist leicht zu erkennen, wenn der Prozess eine weitere lokale Dichte enthält. Die Amplitude schreibt sich dann $(O) A_{(x,y)}^{(x,y), \vec{\delta}_1}$. Die Abstände des Prozesses der Amplituden $(O) A_{\vec{\delta}_1}^{\vec{\delta}_2, \vec{\delta}_1}$ sind so angeordnet, dass mögliche Dichte-Operatoren im Prozess gut zu erkennen sind.

Das effektive Modell in zweiter Ordnung enthält chemische Ein-Teilchen-Potenziale für Triplets auf vertikalen und horizontalen Dimeren. Weiter sind zwei Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen und eine Drei-Teilchen-Wechselwirkung im Modell enthalten. Es treten zudem zwei korrelierte Hüpf-terme auf. Bei korreliertem Hüpfen handelt es sich um irreduzible 2-Teilchen-Prozesse, die aus

einem Erzeuger-Operator, einem Dichte-Operator und einem Vernichter-Operator bestehen. Diese Terme beschreiben (außer anders angegeben), dass ein Triplet am Ort \vec{i} auf einen Platz $\vec{i} + \vec{\delta}_1^i$ springt, wenn am Ort $\vec{i} + \vec{\delta}_2^i$ eine lokale Dichte vorliegt. Die Amplitude schreibt sich nach unseren Definitionen ${}^{(v)}A_{\delta_2^i}^{\delta_1^i}$. In Bild 3.9 sind die eben genannten Terme des effektiven Modells in Ordnung zwei skizziert.

Der effektive Hamiltonoperator $H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ in Ordnung zwei ist explizit gegeben als ²

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} = & {}^{(v)}A^{0,0} \sum_{\vec{i}_v} \hat{n}_{\vec{i}_v} + {}^{(h)}A^{0,0} \sum_{\vec{i}_h} \hat{n}_{\vec{i}_h} \\
& + {}^{(v)}A_{(1,0)}^{(1,0),(0,0)} \sum_{\vec{i}_v} \hat{n}_{\vec{i}_v} \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{1}{0}} + {}^{(h)}A_{(1,0)}^{(1,0),(0,0)} \sum_{\vec{i}_h} \hat{n}_{\vec{i}_h} \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{1}{0}} \\
& + {}^{(v)}A_{(0,1)}^{(0,1),(0,0)} \sum_{\vec{i}_v} \hat{n}_{\vec{i}_v} \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{0}{1}} + {}^{(h)}A_{(0,1)}^{(0,1),(0,0)} \sum_{\vec{i}_h} \hat{n}_{\vec{i}_h} \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{0}{1}} \\
& + {}^{(v)}A_{(2,0)}^{(2,0),(0,0)} \sum_{\vec{i}_v} \hat{n}_{\vec{i}_v} \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{2}{0}} + {}^{(h)}A_{(0,2)}^{(0,2),(0,0)} \sum_{\vec{i}_h} \hat{n}_{\vec{i}_h} \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{0}{2}} \\
& + {}^{(v)}A_{(2,0),(1,0)}^{(2,0),(1,0),(0,0)} \sum_{\vec{i}_v} \hat{n}_{\vec{i}_v} \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{1}{0}} \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{2}{0}} + {}^{(h)}A_{(0,2),(1,0)}^{(0,2),(1,0),(0,0)} \sum_{\vec{i}_h} \hat{n}_{\vec{i}_h} \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{0}{1}} \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{0}{2}} \\
& + {}^{(h)}A_{(1,0)}^{(1,0),(0,1)} \sum_{\vec{i}_h} b_{\vec{i}_h + \binom{0}{1}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{1}{0}} b_{\vec{i}_h} + {}^{(h)}A_{(-1,0)}^{(-1,0),(0,-1)} \sum_{\vec{i}_h} b_{\vec{i}_h + \binom{0}{-1}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{-1}{0}} b_{\vec{i}_h} + \text{h.c.} \\
& + {}^{(h)}A_{(-1,0)}^{(-1,0),(0,1)} \sum_{\vec{i}_h} b_{\vec{i}_h + \binom{0}{1}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{-1}{0}} b_{\vec{i}_h} + {}^{(h)}A_{(1,0)}^{(1,0),(0,-1)} \sum_{\vec{i}_h} b_{\vec{i}_h + \binom{-1}{0}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{1}{0}} b_{\vec{i}_h} + \text{h.c.} \\
& + {}^{(v)}A_{(0,1)}^{(0,1),(1,0)} \sum_{\vec{i}_v} b_{\vec{i}_v + \binom{1}{0}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{0}{1}} b_{\vec{i}_v} + {}^{(v)}A_{(0,-1)}^{(0,-1),(-1,0)} \sum_{\vec{i}_v} b_{\vec{i}_v + \binom{-1}{0}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{0}{-1}} b_{\vec{i}_v} + \text{h.c.} \\
& + {}^{(v)}A_{(0,-1)}^{(0,-1),(1,0)} \sum_{\vec{i}_v} b_{\vec{i}_v + \binom{1}{0}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{0}{-1}} b_{\vec{i}_v} + {}^{(v)}A_{(0,1)}^{(0,1),(-1,0)} \sum_{\vec{i}_v} b_{\vec{i}_v + \binom{-1}{0}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{0}{1}} b_{\vec{i}_v} + \text{h.c.} \\
& + {}^{(h)}A_{(1,0)}^{(1,0),(2,0)} \sum_{\vec{i}_h} b_{\vec{i}_h + \binom{2}{0}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_h + \binom{1}{0}} b_{\vec{i}_h} + \text{h.c.} \\
& + {}^{(v)}A_{(0,1)}^{(0,1),(0,2)} \sum_{\vec{i}_v} b_{\vec{i}_v + \binom{0}{2}}^\dagger \hat{n}_{\vec{i}_v + \binom{0}{1}} b_{\vec{i}_v} + \text{h.c.} \quad .
\end{aligned} \tag{3.51}$$

Wir geben die konkrete J'/J -Abhängigkeit der Amplituden des effektiven Hamiltonoperators 3.51 nun an. Dabei zeigen wir auch die hermitesch konjugierten Amplituden des korrelierten Hüpfens in Klammern, die im Modell 3.51 nur als h. c. bezeichnet sind

$$\begin{aligned}
\mu & \equiv {}^{(v)}A^{(0,0)} = {}^{(h)}A^{(0,0)} = 1 - J^2 \\
V_1 & \equiv {}^{(v)}A_{(1,0)}^{(1,0),(0,0)} = {}^{(h)}A_{(1,0)}^{(1,0),(0,0)} = {}^{(v)}A_{(0,1)}^{(0,1),(0,0)} = {}^{(h)}A_{(0,1)}^{(0,1),(0,0)} = \frac{J}{2} + \frac{J^2}{2} \\
V_3 & \equiv {}^{(v)}A_{(2,0)}^{(2,0),(0,0)} = {}^{(h)}A_{(0,2)}^{(0,2),(0,0)} = \frac{J^2}{2} \\
W_1 & \equiv {}^{(v)}A_{(2,0),(1,0)}^{(2,0),(1,0),(0,0)} = {}^{(h)}A_{(0,2),(0,1)}^{(0,2),(0,1),(0,0)} = -\frac{J^2}{2}
\end{aligned} \tag{3.52}$$

²Für eine verbesserte Übersicht haben wir horizontale Linien eingeführt, die jeweils die verschiedenen Wechselwirkungen und Hüpfsterme voneinander abgrenzen.

$$\begin{aligned}
 C_1 &\equiv {}^{(h)}A_{(1,0)}^{(1,0),(0,1)} = -{}^{(h)}A_{(-1,0)}^{(-1,0),(0,1)} = -{}^{(h)}A_{(1,0)}^{(1,0),(0,-1)} = {}^{(h)}A_{(-1,0)}^{(-1,0),(0,-1)} = \frac{J^2}{4} \\
 &\quad \left(= {}^{(v)}A_{(1,-1)}^{(1,-1),(0,-1)} = -{}^{(v)}A_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(0,-1)} = -{}^{(v)}A_{(1,1)}^{(1,1),(0,1)} = {}^{(v)}A_{(-1,1)}^{(-1,1),(0,1)} \right) \\
 C_2 &\equiv {}^{(v)}A_{(0,1)}^{(0,1),(1,0)} = -{}^{(v)}A_{(0,1)}^{(0,1),(-1,0)} = -{}^{(v)}A_{(0,-1)}^{(0,-1),(1,0)} = {}^{(v)}A_{(0,-1)}^{(0,-1),(-1,0)} = \frac{J^2}{4} \\
 &\quad \left(= {}^{(h)}A_{(-1,1)}^{(-1,1),(-1,0)} = -{}^{(h)}A_{(1,1)}^{(1,1),(1,0)} = -{}^{(h)}A_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(-1,0)} = {}^{(h)}A_{(1,-1)}^{(1,-1),(1,0)} \right) \\
 C_3 &\equiv {}^{(h)}A_{(1,0)}^{(1,0),(2,0)} \quad \left(= {}^{(h)}A_{(-1,0)}^{(-1,0),(-2,0)} \right) = \frac{J^2}{4} \\
 C_4 &\equiv {}^{(v)}A_{(0,1)}^{(0,1),(0,2)} \quad \left(= {}^{(v)}A_{(0,-1)}^{(0,-1),(0,-2)} \right) = \frac{J^2}{4} \quad .
 \end{aligned}$$

Da es sich bei den Termen im effektiven Modell, wie wir weiter unten sehen werden, um relevante Prozesse handelt, haben wir für die Amplituden eine spezifische Kennzeichnung eingeführt. Das chemische Ein-Teilchen-Potenzial wird als μ bezeichnet. Die beiden Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen haben die Namen V_1 und V_3 . Wir definieren an dieser Stelle noch die Wechselwirkung V_2 , die zu den Wechselwirkungen mit den Amplituden ${}^{(v)}A_{(1,1)}^{(1,1),(0,0)}$, ${}^{(v)}A_{(-1,1)}^{(-1,1),(0,0)}$, ${}^{(v)}A_{(1,-1)}^{(1,-1),(0,0)}$, ${}^{(v)}A_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(0,0)}$ sowie ${}^{(h)}A_{(1,1)}^{(1,1),(0,0)}$, ${}^{(h)}A_{(-1,1)}^{(-1,1),(0,0)}$, ${}^{(h)}A_{(1,-1)}^{(1,-1),(0,0)}$, ${}^{(h)}A_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(0,0)}$ gehören. Diese Wechselwirkung tritt erst in Ordnung drei auf. Die Bezeichnungen der Wechselwirkungen mit V_1 , V_2 und V_3 ist mit dem absoluten Abstand motiviert, den die beiden Dichte-Operatoren der Wechselwirkung haben. Analog haben wir die Drei-Teilchen-Wechselwirkung mit W_1 bezeichnet und die vier korrelierten Hüpfsterme sind mit C_1 bis C_4 gekennzeichnet.

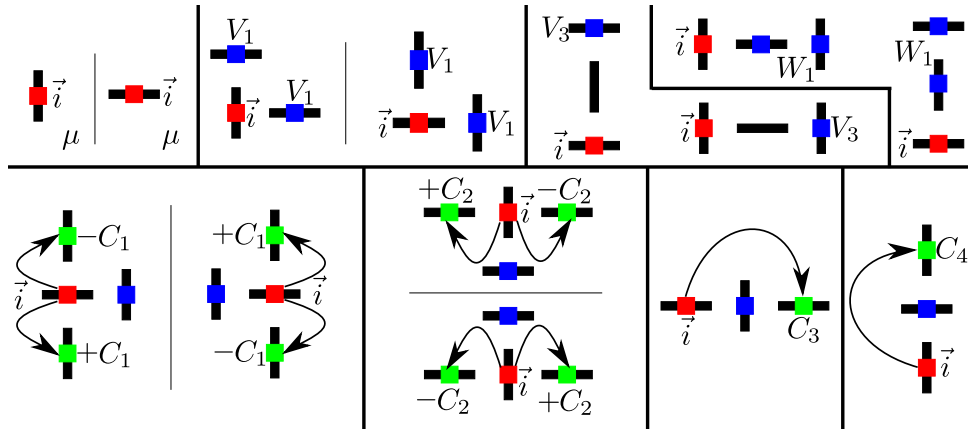


Abbildung 3.9: Alle Prozesse des effektiven Modells zweiter Ordnung aus Gleichung 3.51. Teilchen werden als farbige Quadrate gekennzeichnet. Die roten Quadrate indizieren das Teilchen an Platz \vec{i} . Blaue Quadrate zeigen die Dichten in Wechselwirkungen und korrelierten Hüpfstermen. Die grünen Quadrate zeigen die Plätze, auf die das Teilchen in korrelierten Hüpfstermen springen kann. Die hermitesch konjugierten korrelierten Hüpfsterme ergeben sich, durch Vertauschung des Teilchens vor dem Sprung (rotes Quadrat) und des belegten Platzes nach dem Sprung (grünes Quadrat).

Die Wechselwirkung V_1 beschreibt die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen, die auf benachbarten Dimer-Plätzen liegen. Dabei spielt es für die Amplitude keine Rolle, ob der Dimer am Ort \vec{i} vertikal oder horizontal orientiert ist. Weiter unterscheidet sich die Amplitude für die Abstände $\vec{\delta}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (das zweite Teilchen liegt rechts vom Ort \vec{i}) und $\vec{\delta}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

(das zweite Teilchen liegt oberhalb vom Ort \vec{i}) nicht. Interessanterweise zeigt die Wechselwirkung V_3 diese Symmetrie nicht. Die Wechselwirkung V_3 beschreibt die Wechselwirkung zwischen Teilchen auf gleich-orientierten, belegten Dimere, wobei die Wechselwirkung V_3 nur für vertikale (horizontale) Dimere im Abstand $\vec{\delta}'_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$ ($\vec{\delta}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}$) wirksam ist. Die Amplituden ${}^{(v)}A_{(0,2)}^{(0,2),(0,0)}$ und ${}^{(h)}A_{(2,0)}^{(2,0),(0,0)}$ gehören zu Wechselwirkungen, die die Rolle der vertikalen und horizontalen Dimere austauschen. Diese Amplituden beginnt erst in Ordnung sechs. Die Wechselwirkung V_3 zeigt damit ein interessantes Verhalten. Analoges gilt auch für die attraktive Drei-Teilchen-Wechselwirkung.

Zuletzt gehen wir noch auf eine Besonderheit der korrelierten Hüpfsterme C_1 und C_2 ein. Betrachtet man z. B. die korrelierten Hüpfsterme C_1 , so findet man acht Prozesse. Dabei haben wir in Bild 3.9 vier korrelierte Hüpfsterme angegeben. Diese ergeben sich, wenn ein Teilchen im Bild auf einem rot eingefärbten Platz liegt und auf einen grün eingefärbten Platz springt. Die blau eingefärbten Plätze im Bild zeigen, wo sich das zweite Teilchen für diesen korrelierten Hüpfsterm befinden muss. An den grünen Plätzen haben wir zudem die Amplitude des Terms notiert. Betrachtet man die dazu komplex konjugierten Prozesse, so liegen acht mögliche korrelierte Hüpfsterme C_1 vor. Es handelt sich bei allen acht Prozessen um denselben Typ von korreliertem Hüpfsterm. Betrachten wir aber die Zusammenfassung der Amplituden in den Gleichungen 3.52 genauer, so sind die Amplitude dieser acht Prozesse nur vom Betrag her gleich. Die Vorzeichen der Amplituden sind hingegen richtungsabhängig. Wir betrachten diesen Punkt nun näher und geben physikalische Argumente, dass die genannten Amplituden sogar in beliebiger Ordnung vom Betrag gleich sind.

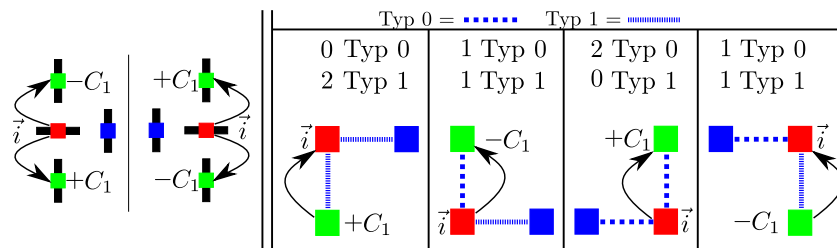


Abbildung 3.10: Die korrelierten Hüpfsterme C_1 aus 3.9 sind erneut zu sehen. Wir zeigen die Kopplungen des zusammenhängenden Prozesses, die eine Wirkung erfahren in Ordnung zwei erfahren haben. Da sich die Prozesse $\mathcal{T}_{\pm 1}^{\text{Typ } 0}$ und $\mathcal{T}_{\pm 1}^{\text{Typ } 1}$ der beiden effektiven Kopplungen nur im Vorzeichen unterscheiden, entscheidet die Häufigkeit der Wirkung auf die effektiven Kopplungen vom Typ 0 oder 1 über das Vorzeichen des korrelierten Hüpfsterms C_1 .

Es gibt zwei Typen von effektiven Kopplungen zwischen Dimeren (siehe Kapitel 3.1.3), wobei sich Matrixelemente nur durch Vorzeichen unterscheiden. In Kapitel 3.1.5 haben wir zudem die Linked-Cluster-Entwicklung konkretisierter angesprochen. Der wichtige Punkt ist hier, dass alle Kopplungen zwischen den Plätzen eine Wirkung erfahren müssen. Die (zwei) Kopplungen, die für die korrelierten Hüpfsterm C_1 in Ordnung zwei eine Wirkung erfahren, sind in Bild 3.10 zu sehen. Wir sehen in dem Bild, dass die Spiegelung um eine Achse bewirkt, dass einmal eine effektive Kopplung eines anderen Typs eine Wirkung erfährt, was zu der Vorzeichen-Änderung führt. Spiegeln wir nun ein zusammenhängendes Cluster von C_1 in hoher Ordnung, so ändern sich erneut die Anzahl der Wirkungen auf einige Typen von effektiven Kopplungen. Dabei tritt

immer der Fall auf, dass eine Vorzeichen-Änderung vorliegt. Folglich tritt beim korrelierten Hüpfterm C_1 tatsächlich ein globales Vorzeichen auf und die Amplituden sind vom Betrag in allen Ordnungen gleich.

Wir diskutieren zum Ende dieses Unterkapitels noch eine Verallgemeinerung des eben dargestellten Vorzeichen-Wechsel der korrelierten Hüpfsterme C_1 . Beim korrelierten Hüpfsterm C_1 springt ein Teilchen von einem vertikalen auf einen horizontalen Dimer oder umgekehrt. Die globale Vorzeichen-Änderung tritt bei allen korrelierten Hüpfstermen auf, die einen Hüpfsterm zwischen Dimeren mit verschiedener Orientierung darstellen. Beschreibt der korrelierte Hüpfsterm einen Sprung zwischen zwei Dimeren gleicher Orientierung, so ist das Vorzeichen hingegen fest. Bei einer Spiegelung eines Prozesses der genannten korrelierten Hüpfsterme auf dem Gitter ändern immer eine gerade Anzahl n von Kopplungen ihren effektiven Typen. Dadurch ist die Vorzeichen-Änderung der korrelierten Hüpfsterme zwischen Dimeren gleicher Orientierung insgesamt $(-1)^n = 1$.

Zusammengefasst stellt das effektive Modell in zweiter Ordnung ein komplexes System korrelierter Hardcore-Bosonen dar, das sich sowohl durch starke Wechselwirkungen als auch exotische kinetische Prozesse auszeichnet. Das Zusammenspiel dieser beiden Typen wird die Physik des Shastry-Sutherland-Modells im externen Magnetfeld prägen.

3.2 Effektives Modell und effektive Magnetisierung der 4-Bein-Röhre

Ein zentraler Punkt dieser Arbeit ist die Physik der Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre. Dazu leiten wir mit der PCUT ein effektives Modell zu hoher Störungsordnung ab. Die Lösung des effektiven Modells wird in folgenden Kapiteln mit dem vollen Shastry-Sutherland-Modell verglichen. Wir stellen nun das effektive Modell und die effektiven Observablen vor.

Für das effektive Modell haben wir uns auf alle irreduziblen Ein-Teilchen- und Zwei-Teilchen-Prozesse im Kanal maximaler Magnetisierung beschränkt, die spätestens in Ordnung acht beginnen. Für die Ein-Teilchen-Prozesse bedeutet dies, dass sich die Prozesse im Kanal $S^z = 1$ befinden und analog sind die Zwei-Teilchen-Prozesse im $S^z = 2$ -Kanal. Dieser Ansatz resultiert in einem effektiven Modell mit chemischen Potenzialen und Hüpfstermen (Ein-Teilchen-Prozesse). Darüberhinaus finden wir Wechselwirkungen, korrelierte Hüpfsterme und Paar-Fluktuations-Terme (Zwei-Teilchen-Prozesse). Abgesehen von den Paar-Fluktuationen, haben wir diese Prozesse bereits in Unterkapitel 3.1.5 kennengelernt. Paar-Fluktuationen entsprechen einem irreduziblen Zwei-Teilchen-Prozess, in dem beide Teilchen hüpfen. Außerdem tritt für das korrelierte Hüpfen eine Ausnahme ein. Wir nehmen in dieser Arbeit korrelierte Hüpfsterme ins effektive Modell auf, die spätestens mit Ordnung 7 beginnen. Die Amplituden der Prozesse haben wir dann für Ein-Teilchen-Amplituden bis Ordnung 15 und für Zwei-Teilchen-Amplituden bis Ordnung 14 bestimmt.

Wir finden insgesamt 172 Prozesse. Wir merken an, dass die angesprochenen 172 Prozesse jeweils Prozesse mit verschiedenen Amplituden entsprechen. Durch Spiegelungen treten weitere Prozesse mit derselben Amplitude (abgesehen vom Vorzeichen) auf, so dass man ungefähr 800 Terme bekommt.

Wir verzichten darauf alle 172 Prozessen zu zeigen und stellen im Folgenden die wichtigsten Terme vor. Dazu werden wir für die 5 Typen (Chemische Potenzial, Hüpfen, Wechselwirkung, korrelierte Hüpfen und Fluktuation) nur die Prozesse besprechen, die maximal in Ordnung vier beginnen. Wir machen aber zwei Ausnahmen. Die erste Ausnahme stellt das Ein-Teilchen-Hüpfen dar, dass erst in Ordnung sechs beginnt. Zudem zeigen wir alle Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen, unabhängig von der Ordnung in der die Wechselwirkung beginnt. Wir erinnern daran, dass die genaue Kenntnis der langreichweitigen Wechselwirkungen für die Bestimmung der Struktur von Plateaus aus lokalisierten Triplets essentiell ist.

In der folgenden Diskussion des effektiven Hamiltonoperators versuchen wir insbesondere die Konvergenz der Amplituden, die als Reihen im Parameter J'/J gegeben sind, abzuschätzen (siehe Anhang D). Der Fehler der verschiedenen Amplituden vergrößert sich mit zunehmenden J'/J . Diesen Fehler werden wir abschätzen, indem wir verschiedene Ordnungen der Reihen der Amplituden betrachten und das Verhalten mit Extrapolationen vergleichen (siehe dazu Anhang C.1).

3.2.1 Chemisches Potenzial

Wir betrachten die zwei chemischen Ein-Teilchen-Potenziale für Teilchen auf einem vertikalen und horizontalen Dimer-Platz, die in Abbildung 3.11 zu sehen sind. Diese beiden Amplituden sind bis einschließlich Ordnung 9 identisch. Die nackten Reihen haben wir in Ordnung 15 bestimmt und wir vergleichen diese Reihen mit den nackten Reihen in Ordnung 14, 13, 12 und 11. Dabei liegen die nackten Reihen für beide Amplituden in einem sehr weiten Bereich bis etwa $J'/J = 0.65$ übereinander. Vernachlässigen wir das kleine Ein-Teilchen-Hüpfen, welches wir im nächsten Unterkapitel betrachten, so entspricht die Ein-Teilchen-Energie der Teilchen-Lücke.

Die nackten Reihen der Lücken schließen mit einem kritischen Verhalten bei etwa $J'/J \approx 0.75$. Um den kritischen Punkt treten noch Abweichungen der nackten Reihen auf. Die Konvergenz der nackten Reihen wird durch die Padé-Extrapolationen bestätigt. Die nackten Reihen und Extrapolationen liegen bis $J'/J \approx 0.65$ übereinander. Die Extrapolationen deuten für beide chemischen Potenziale auf einen schmalen Bereich um $J'/J \approx 0.73$ hin, in dem die Lücke schließt. Dieser Wertebereich für die Lücken liegt vor der Nullstelle der nackten Reihen in Ordnung 15 und ist konsistent mit dem Trend, dass die Nullstelle des chemischen Potenzials für höhere Ordnungen bei niedrigeren Werten von J'/J liegt.

Wir erinnern daran, dass es sich hier um ein kritisches Verhalten handelt. Das bedeutet, dass über die Polstellen der Dlog-Padé-Extrapolationen der kritischen Punkt bestimmt werden kann. Da es sich aber um eine physikalische Polstelle handelt, kann die Polstelle den kritischen Punkt sehr

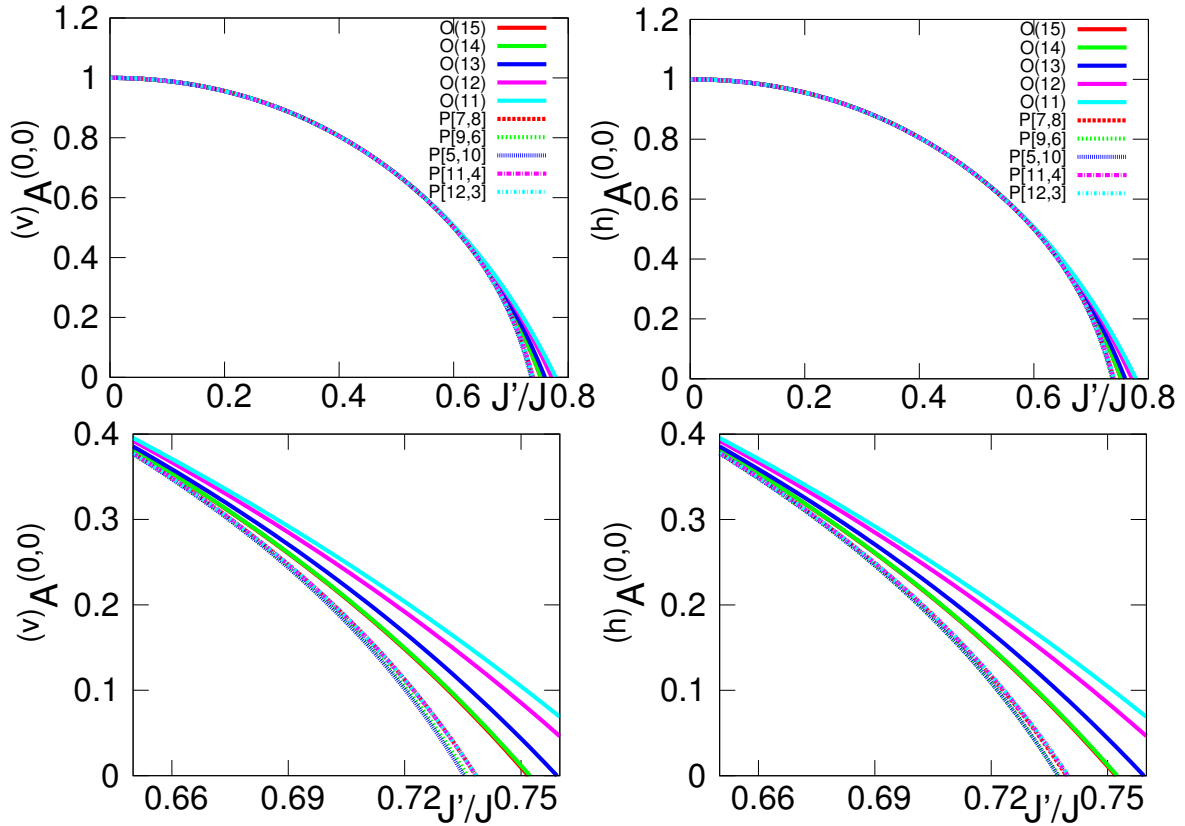


Abbildung 3.11: Die Reihen der Amplitude der chemischen Ein-Teilchen-Potenziale im Parameter J'/J . Wir zeigen die Amplituden $\mu_v^{(v)} A^{(0,0)}$ in den Bildern auf der linken Seite und die Amplitude $\mu_h^{(h)} A^{(0,0)}$ in den beiden Bildern auf der rechten Seite. Die durchgezogenen Linien zeigen die nackten Reihen in den angegebenen Ordnungen und gestrichelte Linien entsprechen Padé-Extrapolationen. In den beiden oberen Bildern verläuft J'/J von 0 bis 0.8. In den unteren Bildern ist der Bereich, in dem die chemischen Potenziale schließen, vergrößert ($J'/J = 0.65$ bis 0.76). Die nackte Reihe der Amplituden ist in Ordnung 14 bereits auskonvergiert und liegt auf der Kurve für Ordnung 15.

verlässlich bestimmen. Dabei findet ein großer Teil der Dlog-Padé-Extrapolation der beiden Amplituden in Ordnung 15 eine Polstelle bei etwa $J'/J \approx 0.71$. Vernachlässigen wir das sehr kleine Ein-Teilchen-Hüpfen (siehe Unterkapitel 3.2.2), können wir die Dimer-Phase der 4-Bein-Röhre mindestens bis zu dem Wert $J'/J \approx 0.71$ als stabil abschätzen. Dabei deuten die DMRG-Daten, die S. Manmana uns freundlicherweise zur Verfügung gestellt hat, auf einen Phasenübergang erster Ordnung zwischen $J'/J = 0.6$ bis 0.7 hin und die Dimer-Phase des 4-Bein-Röhren-Systems ist mindestens bis $J'/J = 0.6$ stabil und werden daher die folgenden Prozesse für $J'/J \leq 0.7$ diskutieren.

3.2.2 Ein-Teilchen-Hüpfen

Im effektiven Modell bis Ordnung acht findet man lediglich zwei Ein-Teilchen-Hüpf-Prozesse mit Amplituden $(v)A^{(1,1)}$ und $(h)A^{(1,1)}$. Hierbei springt ein Teilchen von einem vertikalen oder horizontalen Platz auf einen Platz der gleichen Orientierung im Abstand $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Diese beiden Hüpfsterme beginnen in Ordnung sechs, wobei wir die Gründe für das Auftreten dieses Terms

in Ordnung sechs bereits in Kapitel 3.1.4 gegeben haben. Die beiden Amplituden unterschieden sich in Ordnung 12 voneinander. Neben diesen Prozessen gibt es aus Symmetriegründen noch zwei zusätzliche Prozesse mit den Amplituden $(v)A^{(-1,1)} = (v)A^{(1,1)}$ und $(h)A^{(-1,1)} = (h)A^{(1,1)}$.

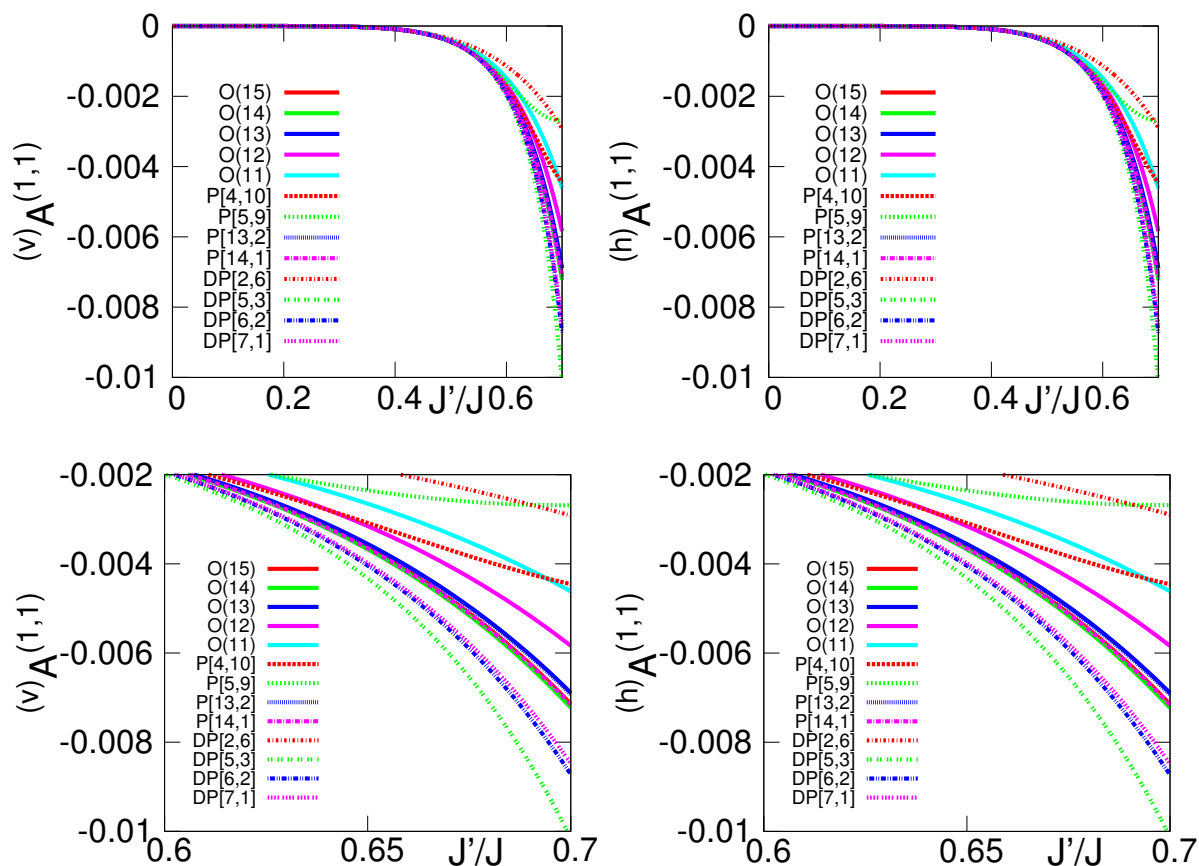


Abbildung 3.12: Ein-Teilchen-Hüpfen mit Amplitude $(v)A^{(1,1)}$ (linke Seite) und Amplitude $(h)A^{(1,1)}$ (rechte Seite) als Funktion von J'/J . Die durchgezogenen Linien zeigen die nackten Reihen in den angegebenen Ordnungen. Gestrichelte Linien entsprechen den Padé- und Dlog-Padé-Extrapolationen. Die nackte Reihe der Amplituden ist in Ordnung 14 bereits auskonvergiert und liegt auf der Kurve für Ordnung 15.

Wir zeigen die nackten Reihen der beiden Hüpfsterme in Ordnung 15, 14, 13, 12 und 11 in Abbildung 3.12 als durchgezogene Kurven. Beide Amplituden weisen bis etwa $J'/J=0.5$ keinen Unterschied zwischen den nackten Reihen in verschiedenen Ordnungen und den verschiedenen Extrapolationen auf. Höhere Ordnungen sind aber definitiv relevant im Bereich $0.6 \leq J'/J \leq 0.7$.

Padé- und Dlog-Padé-Extrapolationen wurden mit der nackten Reihen in Ordnung 15 durchgeführt. Die Extrapolationen bestätigen die Konvergenz der Ergebnisse bis $J'/J \approx 0.5$. Die meisten Extrapolationen zeigen für $J'/J > 0.5$ einen Kurvenverlauf mit größeren Amplituden als der Kurvenverlauf der nackten Reihe in Ordnung 15. Dies ist konsistent zum allgemeinen Trend der nackten Reihen für steigende Ordnung. Allgemein schlussfolgern wir, dass das Ein-Teilchen-Hüpfen bis $J'/J=0.5$ konvergiert ist. Weiterhin deuten alle Ergebnisse darauf hin, dass die Amplituden des Ein-Teilchen-Hüpfens im gesamten Parameterbereich $J'/J \leq 0.7$ unter 0.013 bleiben und somit klein sind.

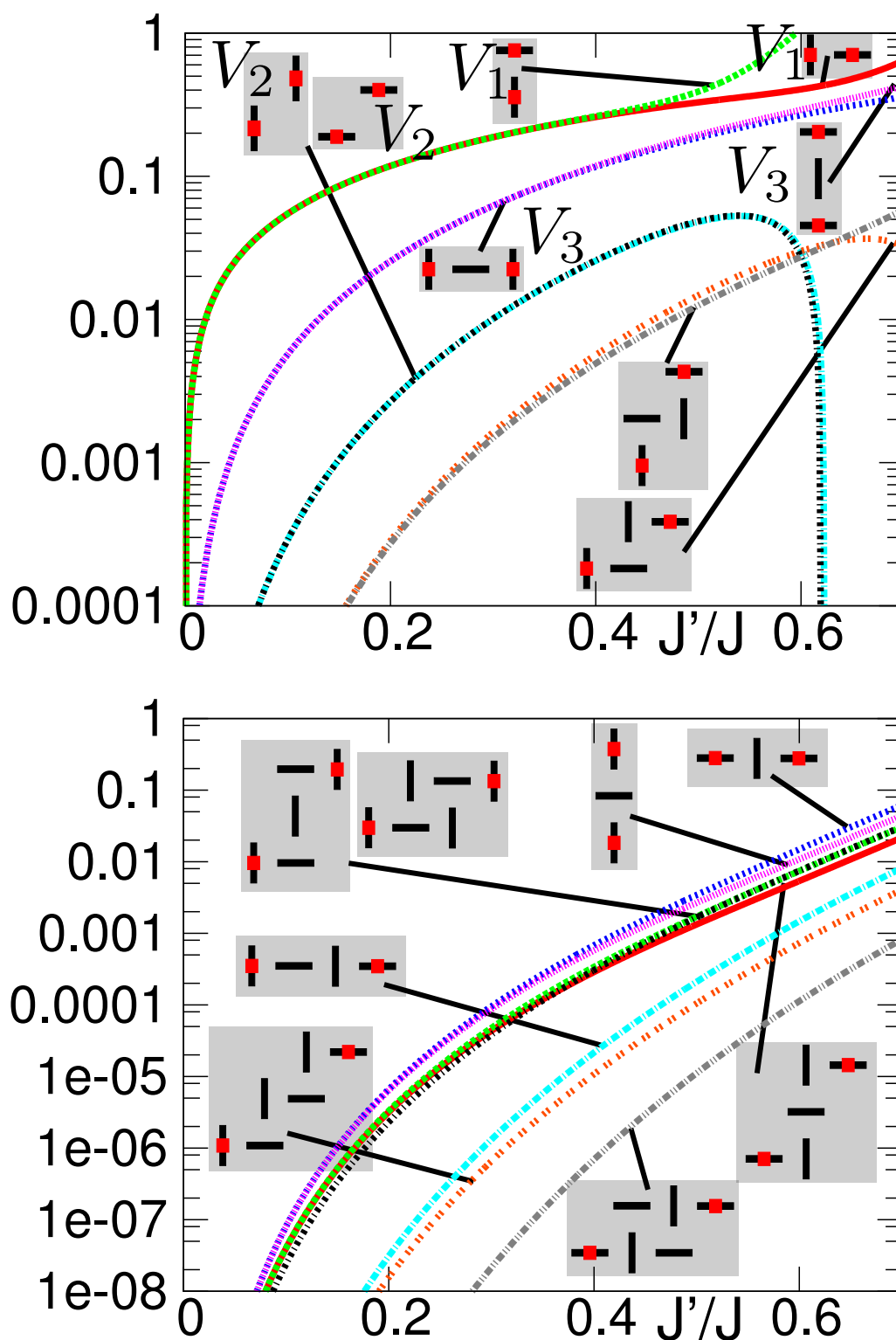


Abbildung 3.13: Verlauf der Amplituden aller Wechselwirkungen des effektiven Modells als Funktion von J'/J in logarithmischer Darstellung. Die Belegung der Wechselwirkung ist in den Bildern eingezeichnet, wobei das Gitter durch schwarze Balken angedeutet ist und belegte Plätze durch rote Quadrate dargestellt sind. Die gezeigten Reihen der Amplituden sind die nackten Reihen in Ordnung 14.

3.2.3 Wechselwirkungen

Im effektiven Modell sind 16 unterschiedliche Wechselwirkungen bis Ordnung acht enthalten. Wir zeigen die Amplituden und die Belegungen der Wechselwirkungen in Abbildung 3.13 als Funktion vom Störparameter J'/J , wobei die Amplituden logarithmisch skaliert sind. In der logarithmischen Skalierung erkennt man gut die Hierarchie der Wechselwirkungen, die durch die Ordnungen des ersten endlichen Koeffizienten der Reihen bestimmt ist. Konkret beginnen die Wechselwirkungen mit der größten Amplitude in Ordnung eins. Diese Wechselwirkungen sind Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen und wir haben diese als V_1 in Unterkapitel 3.1.5 bereits kennengelernt. Die Reihen der folgenden Wechselwirkungen beginnen dann in Ordnung zwei (die Wechselwirkungen V_3 , siehe Kapitel 3.1.5), drei (die Wechselwirkungen V_2 , siehe Kapitel 3.1.5) und vier. Betrachten wir den unteren Teil, so erkennen wir mehrere Wechselwirkungen, die in Ordnung sechs beginnen. Die Amplituden dieser Reihen liegen nahe beieinander. Es gibt weitere Wechselwirkungen in Ordnung acht und zehn, die sehr kleine Amplituden aufweisen.

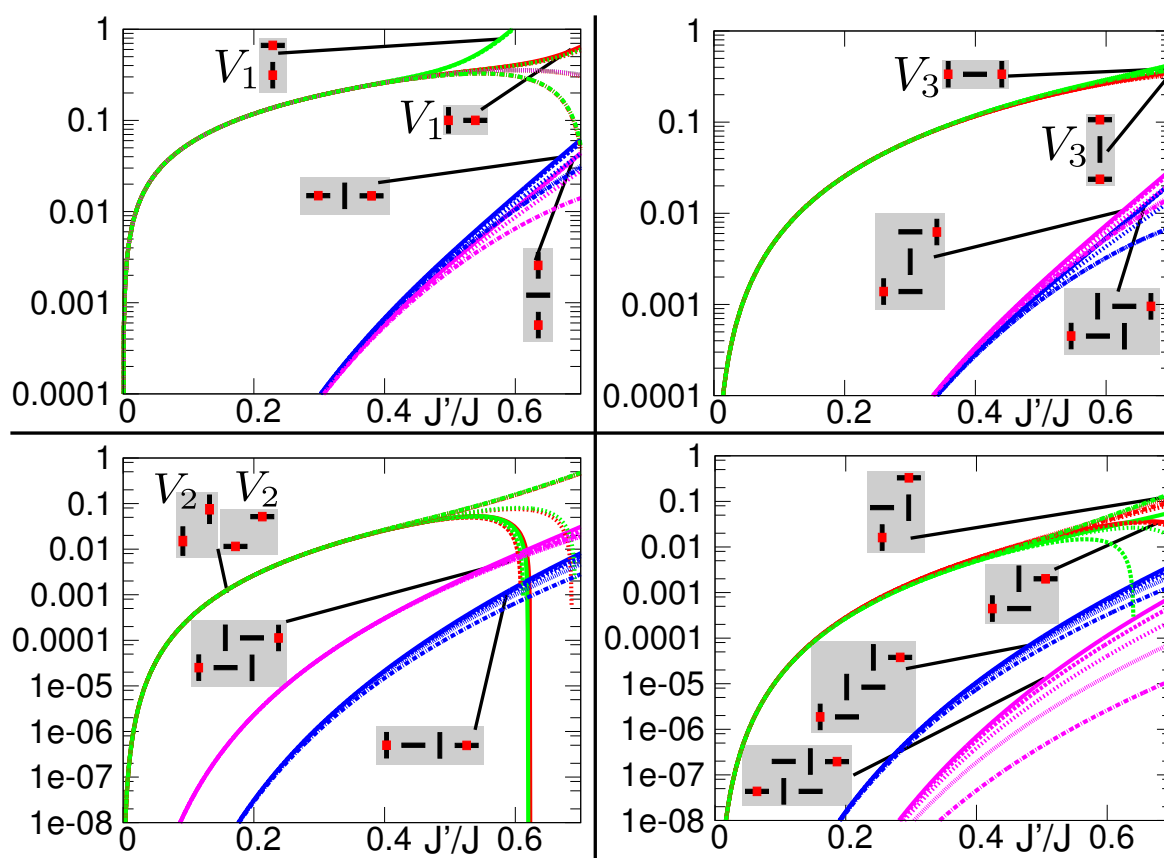


Abbildung 3.14: Wir zeigen die nackten Reihen der verschiedenen Wechselwirkungen aus Abbildung 3.13 in den Ordnungen 14, 13, 12, 11 und 10. Die nackte Reihe in Ordnung 14 ist als durchgezogene Linie eingezeichnet. Die gestrichelten Linien der gleichen Farbe entsprechen den nackten Reihen in niedrigeren Ordnungen (siehe auch Text auf dieser Seite).

Wir betrachten nun die Konvergenz der Amplituden als Funktion von $J'/J = 0$ bis $J'/J = 0.7$. Wir zeigen die nackten Reihen in den Ordnungen 14 (Linientyp **————**), 13 (Linientyp **— — — —**), 12 (Linientyp **- - - - -**), 11 (Linientyp **.....**) und 10 (Linientyp **.....**).

.....) in Abbildung 3.14. Die Belegung der Wechselwirkungen ist in diesem Bild zusätzlich eingetragen. Unterschiedliche Wechselwirkungen sind durch verschiedene Farben illustriert. Dabei kann man sich bei den gestrichelten Kurven daran orientieren, dass die Reihen zu steigender Ordnung gegen die gezeigte durchgezogene Kurve der Reihe in Ordnung 14 konvergieren. Wir gehen an dieser Stelle nicht speziell auf einzelne Wechselwirkungen ein. Stattdessen betrachten wir das allgemeine Konvergenzverhalten. Zunächst haben alle Wechselwirkungs-Amplituden gemein, dass die Konvergenz der Reihen bis $J'/J \approx 0.5$ vorliegt. Für größere Werte von J'/J zeigen die Amplituden der starken Wechselwirkungen (die Wechselwirkungen im oberen Teil von Abbildung 3.13) ein problematisches Verhalten, auf das wir im Anschluss zu sprechen kommen. Die Amplituden aus dem unteren Teil von Abbildung 3.13 erscheinen über den gesamten dargestellten Bereich von J'/J gut konvergiert.

Wir diskutieren nun das Verhalten der starken Wechselwirkungen im Bereich $J'/J > 0.5$ und beginnen mit V_1 . Mit steigender Ordnung scheinen die Reihen zunächst auf ein lineares Verhalten zu konvergieren. Die beiden V_1 Wechselwirkungen zeigen in Ordnung 14 aber ab $J'/J \approx 0.5$ ein anderes Verhalten. Hier scheinen die Funktionen polynomiell zu divergieren. Dieses Verhalten kann auch bei V_2 und den beiden Wechselwirkungen, die in Ordnung vier auftreten, gesehen werden. Dabei tritt das polynomielle Verhalten bei einigen Reihen bereits in Ordnung 13 zum ersten Mal auf. Hier liegt die Vermutung nahe, dass es sich nicht um einen physikalischen Effekt handelt, sondern um ein Artefakt der endlichen Ordnung. Dabei dominiert der zuletzt bestimmte Koeffizient (hier meist der Koeffizient in Ordnung 14) ab einem bestimmten Wert von J'/J den Verlauf der Reihe.

Um zu verifizieren, dass es sich bei dem beschriebenen Verhalten tatsächlich um ein numerisches Artefakt handelt, haben wir verschiedene Padé- und Dlog-Padé-Extrapolationen bestimmt. Dabei zeigen wir die Extrapolationen für alle Wechselwirkungen, die im oberen Teil von Abbildung 3.13 gezeigt sind in den Bildern 3.15 und 3.16. Die Belegung der Wechselwirkung ist in diesen Bildern zur Orientierung mit angegeben. Es bestätigt sich die Vermutung, dass es sich bei dem divergenten Verhalten um numerische Artefakte handelt. Die Reihen der Amplituden sind in dem vorliegenden Fall für $J'/J > 0.5$ durch die Monome in Ordnung 14 bestimmt.

Wir fassen zusammen, dass die Konvergenz der Wechselwirkungen bis $J'/J = 0.5$ gegeben ist. Für größere Werte von J'/J sind die Amplituden, die erst ab Ordnung sechs auftreten, ebenfalls gut konvergiert. Die nackten Reihen der starken Wechselwirkungen zeigen hingegen numerische Probleme für $J'/J > 0.5$. Solche numerischen Probleme können typischerweise durch ein Ersetzen der nackten Reihe einer Amplitude durch eine Extrapolation (oder einem Mittelwert aus mehreren Extrapolationen) gelöst werden. Diesbezüglich sei darauf hingewiesen, dass die Extrapolationen der problematischen Wechselwirkungen (in den Bildern 3.15 und 3.16) sehr unterschiedlich verlaufen und kein konsistentes Verhalten zeigen. Daher sollten die Wechselwirkungen im vorliegenden Fall nur bis $J'/J \approx 0.5$ genutzt werden.

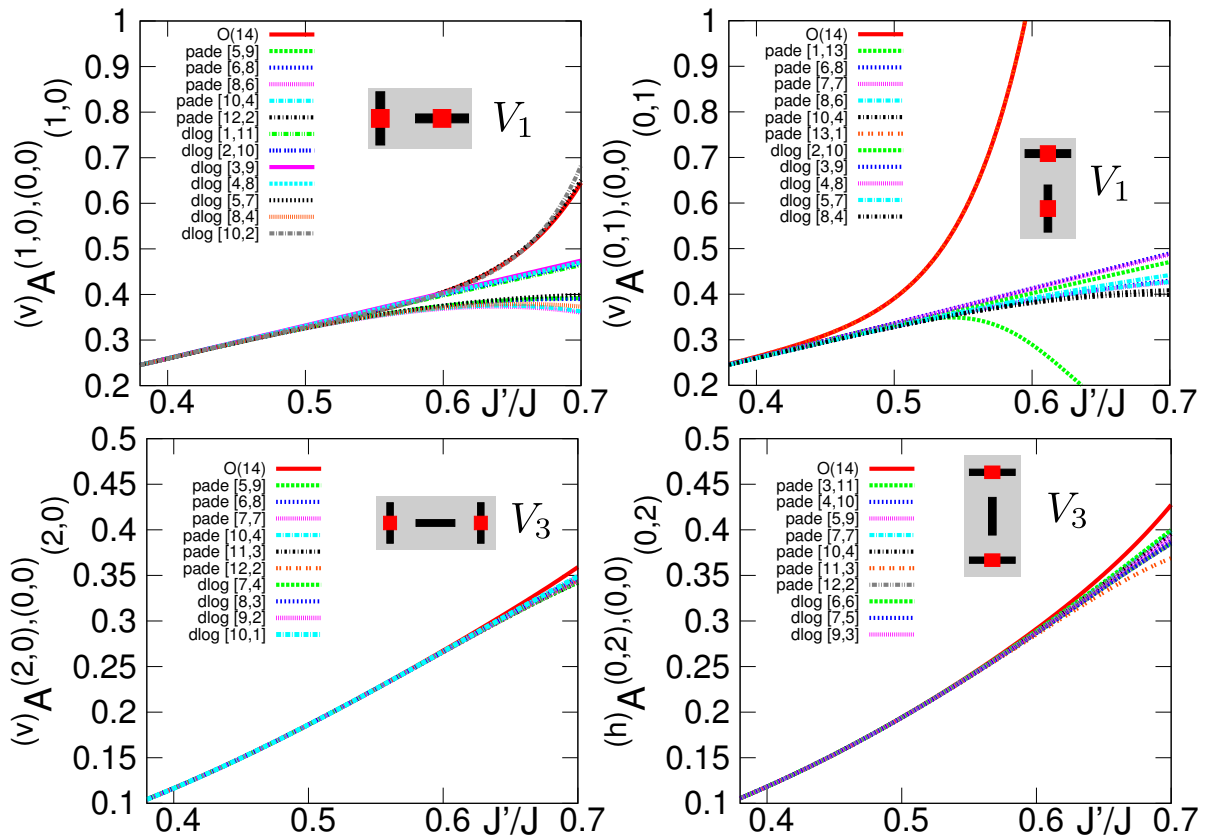


Abbildung 3.15: Die nackten Reihen in Ordnung 14 und verschiedene Extrapolationen für die beiden Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen V_1 und Wechselwirkungen V_3 sind dargestellt. Der Anstieg der nackten Reihen von V_1 scheint ein numerisches Artefakt zu sein, da die Extrapolationen einheitlich einen anderen Verlauf andeuten. V_3 zeigt im gesamten Bereich von J'/J gute Konvergenz.

3.2.4 Korrelierte Hüpfsterme

Insgesamt finden wir 42 korrelierte Hüpfsterme, die vom Betrag unterschiedliche Amplituden haben und bis Ordnung sieben auftreten. Wir zeigen die 14 korrelierten Hüpfsterme, die spätestens in Ordnung vier beginnen, in Abbildung 3.17. Vier Prozesse beginnen in Ordnung zwei und zehn korrelierte Hüpfsterme tragen ab Ordnung vier zum effektiven Modell bei. In Ordnung drei treten keine neuen Prozesse auf.

In Abbildung 3.17 haben wir im oberen Bild alle korrelierten Hüpfsterme eingetragen, die in Ordnung zwei beginnen und einige Hüpfsterme, die in Ordnung vier beginnen. In der Hierarchie sind die vier Amplituden, die in Ordnung zwei beginnen deutlich größer. Wir erinnern daran, dass wir die korrelierten Hüpfsterme, die in Ordnung zwei auftreten, in Unterkapitel 3.1.5 bereits eingeführt haben und die Amplituden als C_1 bis C_4 festgelegt haben. Im unteren Bild von Abbildung 3.17 sind die restlichen korrelierten Hüpfsterme zu sehen, die ab Ordnung vier beitragen. Dabei liegen die Amplituden von vier korrelierten Hüpfstermen sehr dicht zusammen.

Wir widmen uns nun der Konvergenz der Amplituden. Hierzu sind in Abbildung 3.18 die nackten Reihen der Amplituden in Ordnung 14, 13, 12, 11 und 10 gezeigt. Die Zuordnung der Linientypen zu den Ordnungen der nackten Reihen ist analog zu Abbildung 3.14. Wir haben die Prozesse zur

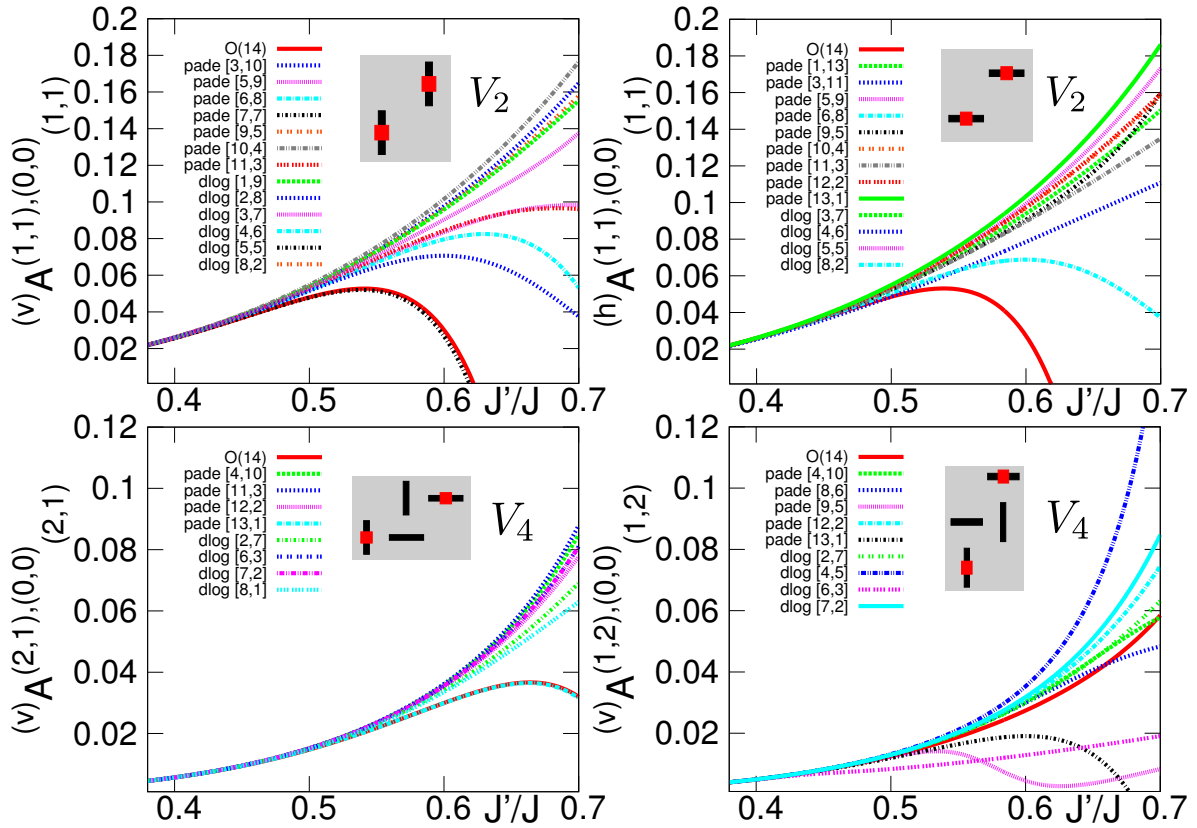


Abbildung 3.16: Die nackten Reihen in Ordnung 14 und verschiedene Extrapolationen für die beiden Wechselwirkungen V_2 und V_4 sind dargestellt. Der plötzliche Abfall der Amplituden von V_2 und einer Amplitude von V_4 für $J'/J > 0.5$ wird von den meisten Extrapolationen nicht bestätigt.

Orientierung graphisch in die Bilder integriert. Die durchgezogenen Linien in Abbildung 3.18 entsprechen den nackten Reihen in Ordnung 14, die wir bereits in Abbildung 3.17 gezeigt haben.

Wir zielen nun darauf ab, einen allgemeinen Wert für J'/J zu bestimmen, für den alle korrelierten Hüpfsterme als konvergiert betrachtet werden können. Zunächst sei angemerkt, dass alle gezeigten Amplituden bis $J'/J = 0.4$ konvergiert sind. Erhöhen wir den Störparameter weiter auf $J'/J = 0.5$ so scheinen wir weiterhin ein brauchbares effektives Modell zu finden, wenn wir die nackten Reihen verwenden. Dabei sehen wir für $J'/J = 0.5$ einen korrelierten Hüpfsterm in Ordnung zwei und in Ordnung vier, die um $J'/J = 0.5$ zu divergieren scheint. Die Divergenz der beiden Terme beginnt um $J'/J = 0.5$, jedoch haben die Amplituden in diesem Bereich noch keine unrealistisch großen Werte. Die meisten Divergenzen finden bei $J'/J > 0.5$ statt, so dass das effektive Modell aus den nackten Reihen für $J'/J = 0.5$ noch die richtige Physik beschreiben sollte.

Die hier diskutierte, schwierige Numerik der Reihen ist bereits an den Koeffizienten der Reihe erkennbar. Wir betrachten dies an einem Beispiel und wählen die Amplitude des korrelierten Hüpfsterms C_1 , die oben links in Abbildung 3.18 dargestellt ist. Die Reihe dieser Amplitude ist zudem im Anhang D zu sehen. Betrachten wir die Koeffizienten dieser Amplitude, so sind die Koeffizienten in Ordnung 12, 13 und 14 ungefähr 5, 50 und 0.5. Für die anderen Amplituden der korrelierten Hüpfsterme gilt ein analoges Verhalten der Koeffizienten. Eine sinnvolle, konsistente

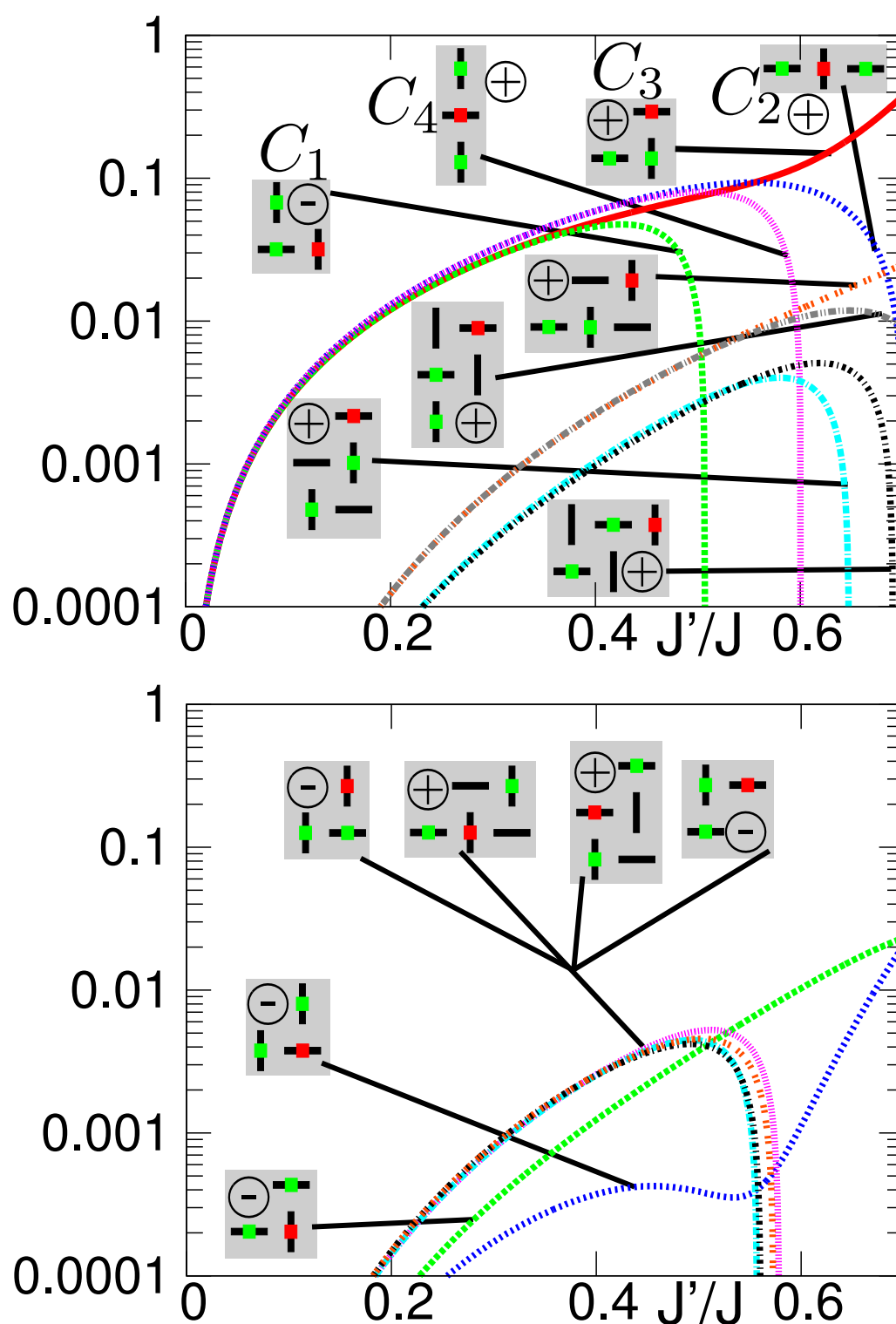


Abbildung 3.17: Kurvenverlauf der 14 Amplituden der korrelierten Hüpfsterme, die in Ordnung zwei und Ordnung vier auftreten. Wir zeigen die Amplituden im Bereich von $J'/J = 0$ bis 0.7 in einer logarithmischen Darstellung. Für diese Abbildung haben wir die Vorzeichen der führenden Terme positiv gewählt und geben in den graphischen Darstellungen über die eingekreisten Symbole + und – das eigentliche Vorzeichen der Reihen an. In der graphischen Darstellung der Prozesse sind Teilchen-Dichten mit einem roten Quadrat dargestellt und zwischen den Plätzen mit einem grünen Quadrat findet der Hüpfprozess des korrelierten Hüpfsterms statt.

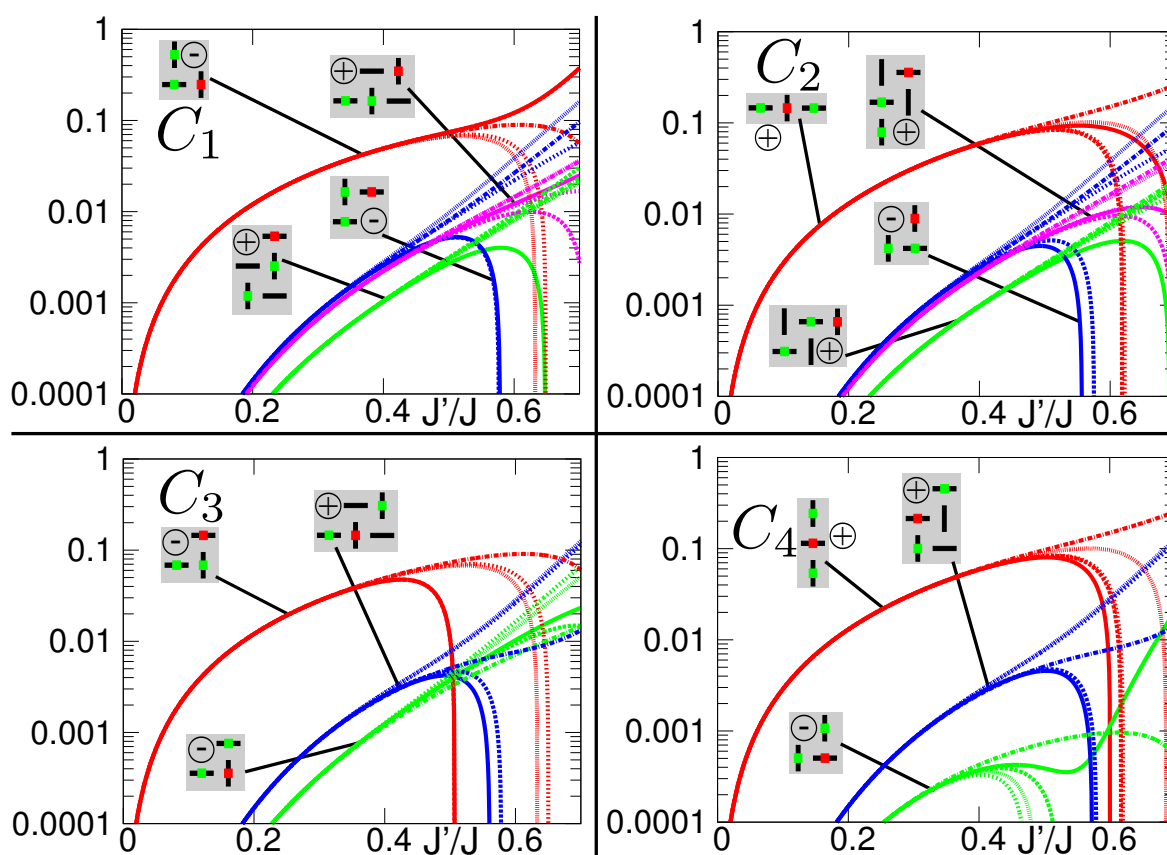


Abbildung 3.18: Wir diskutieren die nackten Reihen der 14 korrelierten Hüpfsterme, die wir Abbildung 3.13 gezeigt haben. Dabei zeigen wir die nackten Reihen für die Amplituden der Prozesse in den Ordnungen 14, 13, 12, 11 und 10. Die nackte Reihe in Ordnung 14 ist als durchgezogene Linie eingezeichnet. Die gestrichelten Linien der gleichen Farbe entsprechen den nackten Reihen in niedrigeren Ordnungen (siehe auch Text auf der Seite des Bildes 3.14).

Extrapolation für $J'/J > 0.5$ ist aufgrund der großen Koeffizienten nicht möglich. Wir schließen mit der Bemerkung ab, dass eine gute Konvergenz für $J'/J = 0.4$ vorliegt. Für $J'/J = 0.5$ liegt eine ausreichende Konvergenz der Amplituden der korrelierten Hüpfsterme vor und wir sehen keine nennenswerten Gründe an der Physik der nackten Reihen zu zweifeln.

3.2.5 Paar-Fluktuationen

Zuletzt sprechen wir über die 104 Paar-Fluktuationen im effektiven Modell, die bis Ordnung acht auftreten und vom Betrag unterschiedliche Amplituden haben. Dabei finden wir explizit 3, 20 und 81 Prozesse, die in Ordnung vier, sechs und acht beginnen. Wir diskutieren erneut nur die wichtigsten Terme, welche in Ordnung vier beginnen. Die Reihen der Amplituden dieser Paar-Fluktuationen sind im linken Bild von Abbildung 3.19 zu sehen, wobei wir die nackten Reihen in Ordnung 14 zeigen.

Zur Orientierung haben wir die Prozesse graphisch dargestellt. Die graphische Darstellung zeigt durch rote Quadrate die zwei belegten Plätze vor der Fluktuation. Die grünen Plätze entsprechen den Positionen der Teilchen nach dem Paar-Fluktuations-Prozess. Der rechte Teil von Abbildung

3.19 zeigt die nackten Reihen in verschiedenen Ordnungen. Dabei haben wir die Reihen für dieselben Prozesse in derselben Farbe dargestellt. Die Zuordnung der Linientypen zu den Ordnungen der nackten Reihen ist analog zu Abbildung 3.14.

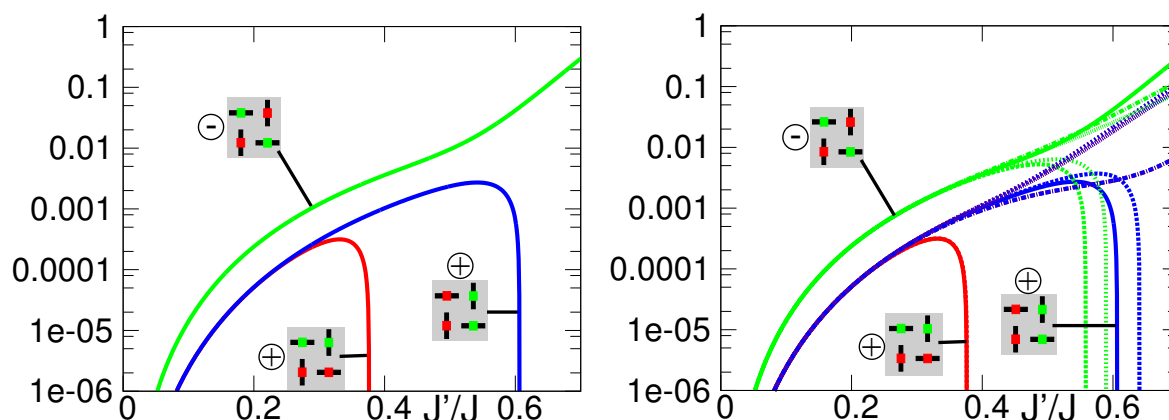


Abbildung 3.19: Wir zeigen im linken und rechten Bild die nackten Reihen in Ordnung 14 der drei Paar-Fluktuationen, die im effektiven Modell ab Ordnung vier auftreten als durchgezogene Kurven. Die jeweiligen Prozesse sind graphisch dargestellt, wobei die Fluktuation zwischen den zwei rot gekennzeichneten und den zwei grün gekennzeichneten Plätzen stattfindet. In beiden Bildern sind die Vorzeichen der Reihen als eingekreiste + und – eingetragen, da die Vorzeichen der führenden Terme positiv für die logarithmische Darstellung gewählt wurden. Im rechten Bild haben wir zudem die nackten Reihen in niedrigeren Ordnungen als gestrichelte Linien eingezeichnet (siehe auch Text auf der Seite des Bildes 3.14).

Im Prinzip zeigt sich hier das gleiche Verhalten, wie bei der Betrachtung der korrelierten Hüpfsterme. Die nackten Reihen konvergieren mit zunehmender Ordnung gut für $J'/J < 0.4$. Es tritt für die hohen Ordnungen jedoch das Problem auf, dass die Koeffizienten der hohen Ordnungen sehr große Werte annehmen (siehe auch Anhang D). Die Reihen der Amplituden divergieren daher ab einem bestimmten Wert für J'/J . Diese Divergenz ist ein numerisches Artefakt, was wir am konsistent anderen Verlauf von Padé- und Dlog-Padé-Extrapolationen dieser Reihen überprüft haben. Wir sehen, dass abgesehen von einer Paar-Fluktuation, die Konvergenz bis $J'/J = 0.5$ gegeben ist.

Problematisch an den Paar-Fluktuationen ist, dass ein Prozess in Ordnung vier bereits bei etwa $J'/J = 0.38$ divergiert. Verfolgen wir die Amplitude dieses speziellen Terms in den negativen Wertebereich, so behält die Amplitude des Terms zumindest bis $J'/J = 0.5$ eine realistische Größenordnung. Dennoch stellt dieser Term einen Sonderfall dar. Die Divergenz wird vom Koeffizienten in Ordnung 13 verursacht, wobei der Koeffizient einen Zahlenwert von etwa 275 hat. Dieser Koeffizient ist außerordentlich groß. Dieser Koeffizient ist so dominant, dass die nackte Reihe in Ordnung 13 und 14 übereinander liegen. Wir haben daher die Koeffizienten in Ordnung 12, 13 und 14 der restlichen Paar-Fluktuationen und die Koeffizienten der korrelierten Hüpfsterme überprüft. Dabei sind keine Paar-Fluktuation und keine korrelierten Hüpfsterme im effektiven Modell vertreten, die eine Amplitude mit einem Koeffizienten größer 13 (für Paar-Fluktuationen) oder 20 (für korrelierte Hüpfsterme) zeigen. Wir haben für das korrelierte Hüpfen C_1 gesehen, dass eine solche Größenordnung für einen Koeffizienten zu einer Divergenz nach $J'/J = 0.5$ führt. Aus dieser Beobachtung schlussfolgern wir, dass die Konvergenz der nackten Reihen der

Paar-Fluktuationen für $J'/J = 0.5$ für die meisten Amplituden gegeben ist und dass es einige Reihen gibt, die zu divergieren beginnen, aber noch in einer realistischen Größenordnung liegen.

Wir schließen die Betrachtung an dieser Stelle mit einem Fazit zur Konvergenz des effektiven Modells ab. Die Konvergenz des effektiven Modells ist für alle Prozesse bis zum Störparameter $J'/J = 0.4$ gegeben. Eine Ausnahme stellt ein einziger Typ von Paar-Fluktuation dar. Die Amplituden dieser Prozesse liegen aber zwischen $J'/J = 0.38$ bis 0.5 noch in einer realistischen Größenordnung. Die Anzahl der problematischen Reihen steigt für größere J'/J an. Dabei beginnen die meisten Divergenzen um $J'/J = 0.5$. Die Anzahl der problematischen Amplituden ist jedoch noch überschaubar. Zudem kommt es erst für noch größere J'/J zu unrealistischen Größenordnungen für die Amplituden. Wir halten es daher für vertretbar, dass effektive Modell der nackten Reihen bis $J'/J = 0.5$ zu verwenden.

3.2.6 Magnetisierung der lokalen effektiven Teilchen

Wir kommen nun zu der Reihenentwicklung der effektiven Observablen. Diese betrachten wir hier jedoch zunächst für einen speziellen Fall, nämlich die Rück-Transformation eines einzelnen lokalen Teilchens im effektiven Bild in das Spin-Bild. Wir motivieren die Betrachtung dieser speziellen Rück-Transformation über die Physik der Plateaus aus lokalisierten Triplets. Wir haben zunächst überprüft, dass die folgenden, nackten Reihen bis $J'/J = 0.5$ konvergiert sind und beschäftigen uns im Folgenden mehr mit der Physik einer Teilchen-Anregung.

Die Rück-Transformation wird durch die effektive Observable der lokalen Magnetisierung in z -Richtung $S_{\vec{i}}^{z,(\beta)}$ bestimmt. Dabei ist $(\beta) \in [1, 2]$, je nachdem welchen Spin des Dimers am Ort \vec{i} wir transformieren. Die Definitionen für Spin 1 und Spin 2 haben wir in Kapitel 3.1.2 getroffen. Zur Herleitung der Matrixelemente der Störung und der Observablen $S_{\vec{i}}^{z,(\beta)}$ verweisen wir auf das Unterkapitel 3.1.3. Für methodische Details zur Bestimmung der effektiven Observablen von $S_{\vec{i}}^{z,(\beta)}$ verweisen wir auf Kapitel 2.1.2.

An dieser Stelle betrachten wir konkret die lokale Magnetisierung an einem Ort $\vec{i} + \vec{\delta}$ für ein Teilchen, das sich am Ort \vec{i} befindet. Die angesprochene Magnetisierung transformiert sich ins effektive Bild über

$$\langle \vec{i} | S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^{z,(\beta)} | \vec{i} \rangle = \langle \vec{i} | U U^\dagger S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^{z,(\beta)} U U^\dagger | \vec{i} \rangle \quad . \quad (3.53)$$

Dabei bezeichnet U die unitäre Transformation der PCUT, so dass die Zustände $U^\dagger | \vec{i} \rangle$ die Ein-Teilchen-Zustände des effektiven Modells mit einem Teilchen am Ort \vec{i} darstellen. Die Ein-Teilchen-Zustände sollen die lokalen Triplets in einem Plateau in der effektiven Beschreibung modellieren. Die Rück-Transformation aus dem effektiven Bild ist dann gegeben über

$$U^\dagger S_{\vec{i}}^{z,(\beta)} U = S_{\vec{i}}^{z,(\beta),\text{eff}} = \sum_{\vec{\delta}} s_{\vec{\delta}}^{z,(\beta)} n_{\vec{i}+\vec{\delta}} + \dots \quad (3.54)$$

mit der bekannten Teilchendichte (siehe Kapitel 3.1.4) $n_{\vec{i}} = b_{\vec{i}}^\dagger b_{\vec{i}}$ und den Amplituden $s_{\vec{\delta}}^{z,(\beta)}$. Wir werden nun die Amplituden $s_{\vec{\delta}}^{z,(\beta)}$ diskutieren, die bis Ordnung sieben einen endlichen Beitrag liefern. Zuvor diskutieren wir Formel 3.54 konkreter.

Bei Gleichung 3.54 handelt es sich nur um einen Teil der effektiven Observablen. Konkreter handelt es sich um den diagonalen Anteil des irreduziblen Summanden $\mathcal{O}_{1,1}$ der effektiven Observablen (siehe Kapitel 2.1.2). Die effektive Magnetisierung kann auch endliche nicht-diagonale Prozesse des Operators $\mathcal{O}_{1,1}$ enthalten. Die irreduziblen Amplituden aus dem nicht-diagonalen Teil von $\mathcal{O}_{1,1}$ können aus den Matrixelementen $\langle \vec{i} + \vec{\delta} | S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^{z,(\beta)} | \vec{i} \rangle$ bestimmt werden. Diese Terme der effektiven Observablen, die nicht einbezogen werden, treten aber erst in sehr hohen Ordnungen auf. Daher vernachlässigen wir diese Prozesse im Folgenden, so dass es ausreicht, die lokale Magnetisierung nach Gleichung 3.54 zu diskutieren.

Weiter können beispielsweise auch Prozesse zum Matrixelement $\langle \vec{i} + \vec{\delta}'' | \langle \vec{i} + \vec{\delta} | S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^{z,(\beta)} | \vec{i} \rangle$ einen endlichen Beitrag haben. Die irreduziblen Amplituden gehören dann zu Termen in dem Operator $\mathcal{O}_{2,1}$. Wir merken an, dass im Zwei-Teilchen-Zustand des eben genannten Matrixelementes ein Teilchen das Flavour t^0 haben wird. Diese beiden Terme der effektiven Observablen, die nicht einbezogen werden, treten aber auch erst in sehr hohen Ordnungen auf oder sind für die lokalen Erwartungswerte $\langle \vec{i} | S_{\vec{i}+\vec{\delta}}^{z,(\beta)} | \vec{i} \rangle$ nicht relevant. Daher vernachlässigen wir die Prozesse aus anderen Termen und Kanälen im Folgenden. Die Diskussion der lokalen Magnetisierung nach Gleichung 3.54 scheint auch von diesem Standpunkt aus die relevante Physik zu beschreiben.

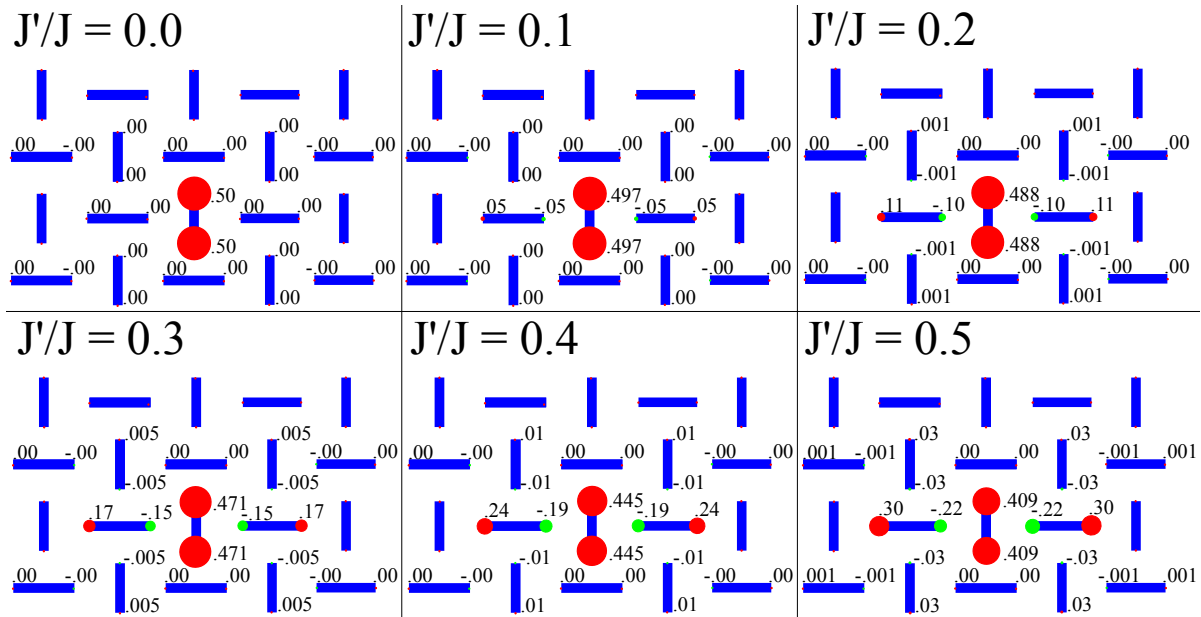


Abbildung 3.20: Magnetisierungsprofil nach der Rücktransformation eines vertikalen Dimers für verschiedene Werte von J'/J .

Wir beginnen mit der lokalen Magnetisierung eines Teilchens auf einem vertikalen Platz. Für diesen Fall finden wir acht Typen von magnetisierten Plätzen mit acht unterschiedlichen Amplituden $s_{\vec{\delta}}^{z,(\beta)}$. Wir zeigen die nackten Reihen der verschiedenen Amplituden in Ordnung sieben in Abbildung 3.21. Der linke Teil der Abbildung enthält drei der Amplituden in einer linearen Skalierung. Diese Amplituden beschreiben die Reduktion des lokalen Momentes am Ort \vec{i} und

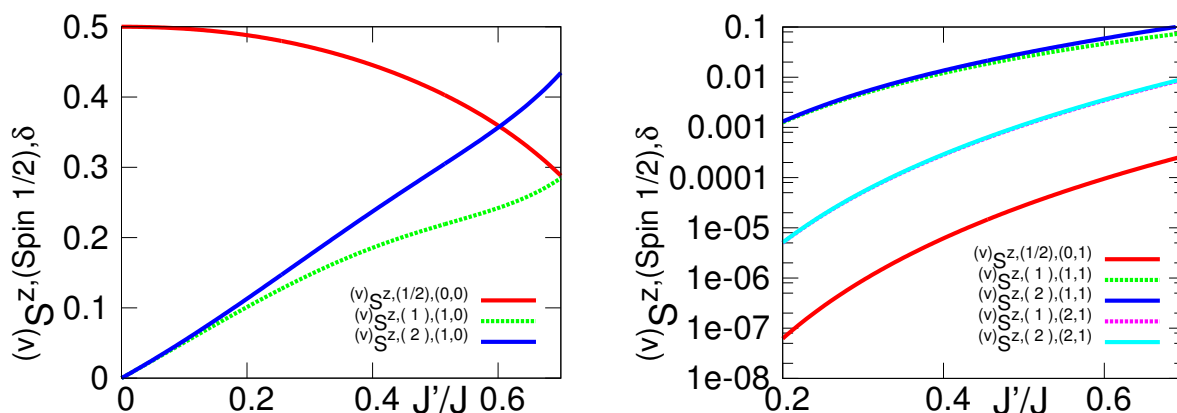


Abbildung 3.21: Amplituden aller lokalen Magnetisierungen $(v)_{S^z,(\beta)}$ der Rücktransformation eines Teilchens auf einem vertikalen Dimer, die sich bis Ordnung acht ergeben.

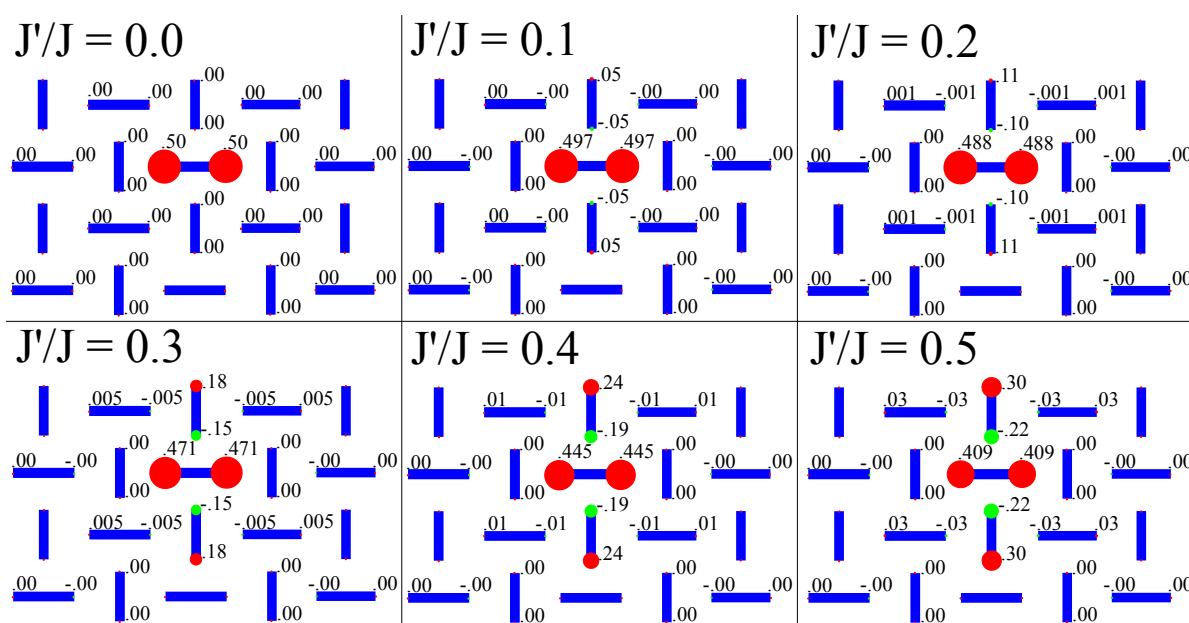


Abbildung 3.22: Magnetisierungsprofil nach der Rücktransformation eines horizontalen Dimers für verschiedene Werte von J'/J .

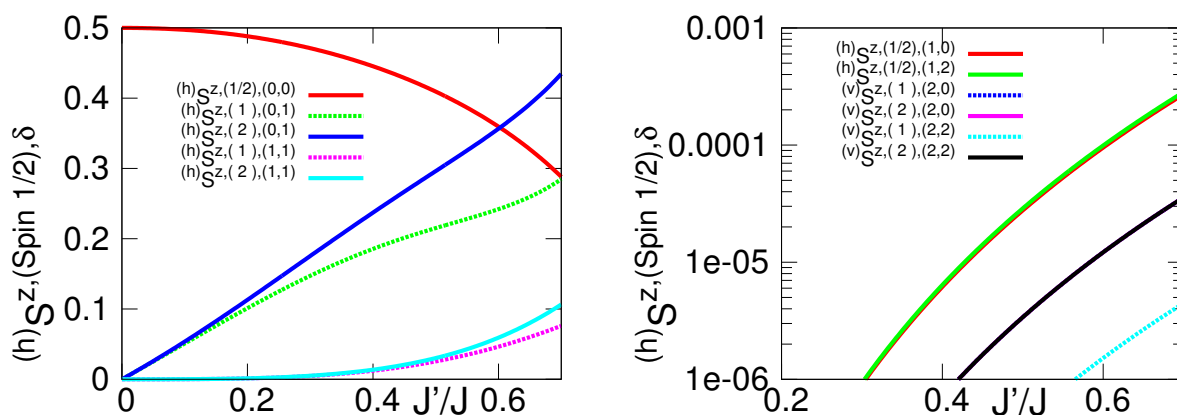


Abbildung 3.23: Amplituden aller lokalen Magnetisierungen $(h)_{S^z,(\beta)}$ der Rücktransformation eines Teilchens auf einem horizontalen Dimer, die sich bis Ordnung acht ergeben.

die Magnetisierung der beiden Spins an den benachbarten Dimeren an den Orten $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Im rechten Teil der Abbildung 3.21 zeigen wir die Amplituden weiterer magnetisierter Plätze in einer logarithmischen Skalierung. Wir haben die effektive Magnetisierung zudem im Ortsraum für $J'/J = 0$ bis 0.5 in Schritten von $\Delta J'/J = 0.1$ in Abbildung 3.20 aufgetragen. Dieses Bild zeigt das Magnetisierungsprofil des effektiven Teilchens. Man erkennt deutlich, was in Abbildung 3.21 durch die Aufteilung der Amplituden auf zwei Bilder angedeutet wurde. Die Magnetisierung des effektiven Teilchens ist sehr lokal. Im Wesentlichen magnetisiert das Teilchen die angesprochenen benachbarten Plätze. Dabei ist der Magnetisierungs-Effekt auf weitere Plätze selbst für recht große Werte von J'/J sehr klein. Es zeigt sich, dass das effektive Teilchen weiterhin sehr lokal ist und sich lediglich eine Magnetisierung zu den Nächste-Nachbarn-Plätzen, senkrecht zur Orientierung des vertikalen Dimers, ausprägt. Die Summe aller magnetisierten Plätze wird nun als (verschmiertes) magnetisches Teilchen interpretiert, das man als Triplon bezeichnet.

Wir betrachten nun ein Triplon auf einem horizontalen Dimer-Platz. Für ein Teilchen auf einem horizontalen Platz finden wir unter den magnetisierten Plätzen acht verschiedene Amplituden, die wir in Abbildung 3.23 zeigen. Dabei zeigt sich im Wesentlichen das gleiche Bild wie für das Teilchen auf einem vertikalen Platz. Die größten Amplituden finden sich beim Teilchen am Ort \vec{i} und für die Magnetisierung der Spins der benachbarten Dimer-Plätze. Für ein Teilchen auf einem horizontalen Platz sind diese Plätze mit großer Magnetisierung in den Abständen $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ gelegen. Auf den umliegenden Plätze treten selbst für große Werte von J'/J keine nennenswerten Magnetisierungen auf. Wir sehen also, dass wieder nur die Plätze nennenswert magnetisiert werden, die senkrecht zur Orientierung des Dimers am Ort \vec{i} liegen. Dies ist auch gut zu erkennen, wenn wir uns die effektive Magnetisierung eines Teilchens auf einem horizontalen Platz im Ortsraum ansehen, was wir in Abbildung 3.22 für verschiedene Werte von J'/J zeigen.

Wir bereits erwähnt, lokalisieren in einem Plateau die Triplet-Anregungen (die effektiven Teilchen) in großen Abständen voneinander. Diese Abstände sind größer, als die magnetisierten Plätze des Triplons. Daher kann für ein Plateau aus lokalisierten Triplets eine genäherte Rück-Transformation bestimmt werden, indem alle Triplets durch Triplonen ersetzt werden.

Kapitel 4

Klassische Behandlung der 4-Bein-Röhre

4.1 Die klassischen Resultate

In diesem Kapitel diskutieren wir die Lösung des effektiven Modells der Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre mit Hilfe der klassischen Näherung. Das effektive Modell wird in Kapitel 3.2 präsentiert, wo wir die relevanten Terme des Modells zeigen und die Konvergenz der Störungsreihen diskutieren. Wir merken an, dass wir für die klassische Näherung die Paar-Fluktuationen nicht berücksichtigen. Die Methode selbst wird in Kapitel 2.2 beschrieben. Wir sind in dem Methodenteil dieser Arbeit (Kapitel 2) bereits auf die konkrete Anwendung der klassischen Näherung auf die Terme des effektiven Modells eingegangen (siehe Kapitel 2.2.1). Auf den Kern reduziert, wird das effektive Quanten-Modell (auf Operator-Level) durch die klassische Näherung auf ein klassisches Energie-Funktional abgebildet. Darüberhinaus wird jeder Dimer-Platz durch einen Pseudo-Spin-Platz ersetzt. Zudem haben wir in Kapitel 2.2.2 bereits die numerischen Aspekte der folgenden Lösungen, die aus der Minimierung des Energie-Funktionalen folgen, angesprochen.

Ein zentraler Aspekt der klassischen Näherung ist die Wahl der Einheitszelle, die als ab initio Ansatz verwendet wird. Wir haben in Kapitel 3.1.2 die Notation für Cluster allgemein eingeführt und orientieren uns weiterhin an dieser Notation zur Darstellung von Einheitszellen. Eine Einheitszelle sei durch die Vektoren \vec{a}_1^{UC} und \vec{a}_2^{UC} aufgespannt und hat N_{UC} (klassische) Pseudo-Spin-Plätze. Da die Form der Einheitszelle nicht bekannt ist, muss ein Satz von mehreren Einheitszellen überprüft werden. Da die Pseudo-Spins über kontinuierliche Winkel beschrieben werden, kann auch die Dichte im System kontinuierlich sein. Wie wir in Kapitel 1.6 argumentiert haben, kann ein (klassisches) Magnetisierungsplateau über die Lokalisierung von Tripletts verstanden werden und nur besetzte oder leere Plätze liegen im Zustand vor. Dieses vereinfachte Bild eines Magnetisierungsplateaus aus lokalisierten Tripletts (für den Quantenfall) überträgt sich als exakte Beschreibung des klassischen Systems in die klassische Näherung. Die Struktur minimiert

die Wechselwirkungsenergie der lokalen Triplets. Da wir aber eine Einheitszelle als Ansatz wählen, können mit einer Einheitszelle aus N_{UC} Plätzen nur Plateaus der Dichten $n = N_{\text{D}}/N_{\text{UC}}$ beschrieben werden. Verschiedene Einheitszellen ermöglichen also auch unterschiedliche Dichten. Die Einheitszelle mit geringster Grundzustandsenergie wird als Lösung übernommen und die Triplett-Belegung der Lösung bestimmt zudem die Triplett-Dichte im System. Wir erlauben nur Einheitszellen, die mit der Geometrie der 4-Bein-Röhre vereinbar sind. Der Satz an Einheitszellen, aus dem die folgenden Resultate bestimmt wurden, ist in Unterkapitel 2.2.4 dargestellt.

Physikalisch entspricht die klassische Näherung dem Ansatz, lokale Bloch-Sphären als Zustand für die Dimer-Plätze im System zu nutzen. Die klassische Näherung beschreibt das System im thermodynamischen Limes. Weiter sei der methodische Punkt angesprochen, dass das Funktional aus dem vollen Hamiltonoperator im Feld $\mathcal{H}_{\text{Gesamt}}$ (siehe Gleichung 3.35) bestimmt wird. Die Minimierung des Funktionals einer Einheitszelle wird daher für einen festen Störungsparameter J'/J und ein festes externes Magnetfeld $h = B/J$ durchgeführt. Da es keine durch Symmetrie geschützten Quantenzahlen mehr gibt, kann das Magnetfeld h nicht einfach nachträglich als Energieabsenkung einbezogen werden (siehe Unterkapitel 3.1.4 für den Quantenfall).

Wir erinnern an die zwei Ordnungsparameter $S_{\vec{k}}$ und M_{T} , die wir in Unterkapitel 2.2.3 definiert haben. Der Parameter $S_{\vec{k}}$ ist der statische Strukturfaktor und ist abhängig vom reziproken Gittervektor \vec{k} . Der reziproke Gittervektor bezieht sich auf die gewählte Einheitszelle und ist als $\vec{k} = k_1 \vec{b}_1^{\text{UC}} + k_2 \vec{b}_2^{\text{UC}}$ mit $\vec{a}_i^{\text{UC}} \cdot \vec{b}_j^{\text{UC}} = 2\pi \delta_{i,j}$ gegeben. Ist in dem betrachteten Zustand einer Einheitszelle die diskrete Translationssymmetrie gebrochen, so zeigt der statische Strukturfaktor $S_{\vec{k}}$ einen endlichen Wert für einen oder mehrere Werte von \vec{k} . Damit dient der statische Strukturfaktor $S_{\vec{k}}$ als Ordnungsparameter für einen Bruch dieser Symmetrie. Die Struktur des Systems kann prinzipiell durch die Angabe aller N_{UC} Zahlenwerte von $S_{\vec{k}}$ rekonstruiert werden. Folglich geben wir nur den extremalen Zahlenwert aller statischen Strukturfaktoren $S_{\vec{k}}$ an, um zu belegen, dass ein Zustand die diskrete Translationssymmetrie bricht. Dabei ist nur der Zahlenwert für $S_{\vec{k}}$ relevant und wir diskutieren den reziproken Gittervektor \vec{k} des extremalen statischen Strukturfaktors $S_{\vec{k}}$ nicht explizit. Wir werden im Folgenden den statischen Strukturfaktor der Einfachheit halber mit S_{Max} abkürzen.

Weiterhin besteht ein Zusammenhang zwischen der kontinuierlichen $U(1)$ -Symmetrie und einer endlichen transversalen Magnetisierung M_{T} im System. Für $M_{\text{T}} \neq 0$ liegt eine supraflüssige Phase im System vor und ist $S_{\vec{k}} \neq 0$, so finden wir ein Magnetisierungsplateau. Sind beide Ordnungsparameter endlich, liegt eine suprakristalline Phase vor (siehe auch Unterkapitel 2.2.3). Wir beschreiben im folgenden Unterkapitel 4.1.1 das Phasendiagramm, welches wir mit der klassischen Näherung bestimmt haben und zeigen die Strukturen der Lösungen. Wir kommen dann in Unterkapitel 4.1.2 auf die DMRG-Ergebnisse zu sprechen. Weiter stellen wir auch einen Zusammenhang der klassischen Resultate zum zweidimensionalen Modell in Unterkapitel 4.1.3 her.

4.1.1 Klassische Magnetisierungskurven

Die klassischen Magnetisierungskurven und Ordnungsparameter als Funktion vom Magnetfeld h sind in Bild 4.1 dargestellt. Hier benutzen wir die Bezeichnung $M(h)$ für die Magnetisierung der Tripletteilchen des effektiven Modells. Wir betonen, dass die Magnetisierung der Triplets der Dichte von effektiven Teilchen im System entspricht, während die Magnetisierung der klassischen Pseudo-Spins um einen Summanden $-1/2$ zu verschieben wäre.

Wir haben das Magnetfeld h in Schrittweiten $\Delta h = 0.0001$ für $J'/J = 0.2$, $\Delta h = 0.00025$ für $J'/J = 0.3$ und $\Delta h = 0.000625$ für $J'/J = 0.4$ ausgerechnet. Die Datenpunkte sind in Abbildung 4.1 zu sehen und wir haben die Daten um wenige nicht konvergierte Punkte bereinigt. Weiter haben wir in den Magnetisierungskurven die Einheitszellen, die das System für gegebene Parameter minimieren, aufgetragen. Die Ergebnisse sind mittels den nackten Reihen des effektiven Modells bestimmt. Wir haben in Unterkapitel 3.2 gezeigt, dass das effektive Modell bis einschließlich $J'/J = 0.4$ konvergiert ist, so dass die folgenden Resultate innerhalb der Konvergenz des effektiven Modells liegen.

Wir kommen nun zu den Skizzen der Teilchen-Belegungen in Abbildung 4.1. Wir finden nur Plateau-Phasen und suprakristalline Phasen. Diese sind immer in einem endlichen, klar abgegrenzten Bereich stabil und der Übergang in eine andere Phase ist leicht zu erkennen. Von den verschiedenen Phasen führt eine schwarze Linie zu einer Skizze der mikroskopischen Struktur. Die Struktur von Plateau-Phasen kann leicht dargestellt werden, da hier nur besetzte und leere Plätze bzw. vollständig gegen oder in Feldrichtung polarisierte Pseudo-Spins auftreten. In den Bildern verwenden wir die Teilchen-Sprache und rote Quadrate stellen die Teilchen im System dar. Die schwarzen Balken deuten die vertikalen und horizontalen Dimer-Plätze des Systems an. Die Einheitszellen sind als Vereinigung der Dimer-Plätze im grau markierten Bereich eingetragen. Dabei können die Vektoren der Einheitszelle \vec{a}_1^{UC} und \vec{a}_2^{UC} im Unterkapitel 2.2.4 nachgeschlagen werden. In suprakristallinen Phasen treten zusätzlich auch Plätze auf, die eine Teilchen-Dichte zwischen 0 und 1 aufweisen. Solche Plätze haben wir mit einem gelben Quadrat in Abbildung 4.1 markiert.

Wir beschreiben zuerst das Verhalten der Ordnungsparameter. Der statische Strukturfaktor S_{Max} zeigt einen endlichen Wert für alle Phasen mit einer endlichen Dichte. Die klassischen Magnetisierungskurven weisen demnach ausschließlich Plateau-Phasen und suprakristalline Phasen auf. Ein Plateau der Dichte $1/2$ entspricht einem halb gefüllten System, so dass die dominante Wechselwirkung V_1 nicht auftritt. In diesem Fall ist $S_{\text{Max}} = 1/4$, denn jeder zweite Platz im System ist belegt. Konkreter ist das Untergitter aus vertikalen oder horizontalen Dimeren belegt und man normiert durch die Anzahl von Plätzen der Einheitszelle des ursprünglichen Modells. Die Größenordnung des statischen Strukturfaktors der Plateaus anderer Dichte liegt aber typischerweise eine Dekade niedriger. Daher zeigen wir in Abbildung 4.1 nur den Wertebereich von $S_{\text{max}} = 0$ bis 0.07 , damit die statischen Strukturfaktoren aller Plateaus (abgesehen vom $1/2$ -Plateau) gut zu erkennen sind. Betrachten wir die transversale Magnetisierung M_{T} , so ist diese bei nur einer Phase endlich. Bei dieser Phase handelt es sich also um eine suprakristalline Phase. Durch die

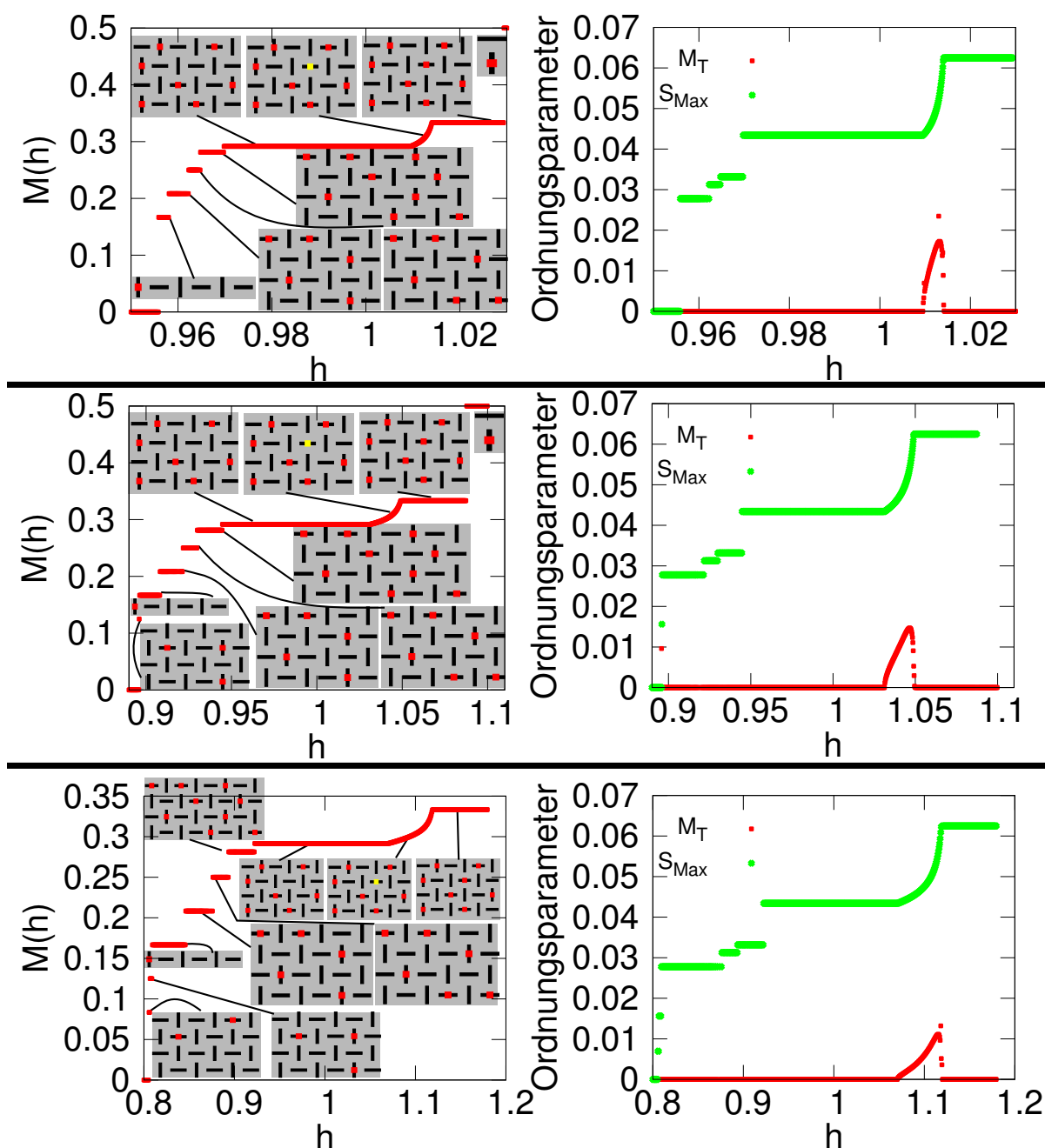


Abbildung 4.1: Die klassischen Magnetisierungskurven $M(h)$ (in den linken Bildern) und die Ordnungsparameter S_{Max} und M_T (in den rechten Bildern) sind zu sehen. Von oben nach unten haben wir die Störparameter $J'/J = 0.2, 0.3$ und 0.4 verwendet. In den Magnetisierungskurven haben wir zudem die mikroskopischen Strukturen der Phasen angegeben. Die Einheitszelle ist durch die schwarzen Balken in einem grau eingegrenzten Bereich dargestellt. Belegte Plätze sind durch rote Quadrate symbolisiert. In suprakristallinen Phasen treten Plätze mit Teilchendichte zwischen null und eins auf, die mit gelben Quadraten dargestellt sind.

Diskretisierung des Magnetfeldes kann es zu dem Problem kommen, dass Phasen, die schmäler sind als die Diskretisierung Δh , von uns nicht als eigenständige Phasen erkannt werden können. Man erwartet eine supraflüssige Phase ($S_{\text{Max}} = 0$ und $M_{\text{T}} \neq 0$) für sehr kleine Dichten, die vermutlich aufgrund der Diskretisierung Δh nicht als eigenständige Phase identifiziert wird.

Wir diskutieren zuerst die verschiedenen, von uns gefundenen Plateaus. Die mikroskopischen Strukturen werden wir im Anschluss besprechen. Wir beginnen mit der Magnetisierungskurve für $J'/J = 0.4$. Die erste Phase mit endlicher Magnetisierung ist ein Plateau der Dichte $1/12$. Dieses Plateau ist genau wie das folgende $1/8$ -Plateau sehr schmal. Wir finden außerdem ein Plateau der Dichte $1/6$, dass im Vergleich zu den anderen Plateau-Phasen bei niedriger Dichte sehr ausgeprägt ist. Es folgen Plateaus der Dichte $5/24$, $1/4$ und $9/32$, die eine ähnliche Breite zeigen, wie das $1/6$ -Plateau. Im System stabilisiert sich dann ein Plateau der Dichte $7/24$. Unter den Plateaus mit Magnetisierung $M(h) < 0.5$ ist dieses Plateau das Breiteste. Auf das $7/24$ -Plateau folgt eine suprakristalline Phase, die eine Dichte zwischen $7/24$ und $8/24=1/3$ annimmt. Die suprakristalline Phase endet, wenn das System die Dichte $1/3$ erreicht und ein Plateau der Dichte $1/3$ wird stabilisiert. Das $1/3$ -Plateau ist recht breit und wird für hohe Felder von einem Plateau der Dichte $1/2$ abgelöst.

Die Abfolge der Phasen bleibt für $J'/J < 0.4$ gleich. Der Störparameter J'/J ändert bei einer Reduzierung die Größenordnung der Amplituden der Wechselwirkungen und damit ändern sich die Energieskalen für h , bei denen die verschiedenen Plateaus stabilisiert werden. Aber die Reihenfolge $1/8$, $1/6$, $5/24$, $1/4$, $9/32$, $7/24$, suprakristalline Phase, $1/3$ und $1/2$ ändert sich nicht. Wir werden sehen, dass die Wechselwirkungen, die im $1/12$ -Plateau auftreten, sehr klein sind. Daher ist das $1/12$ -Plateau im Allgemeinen sehr schmal. Für $J'/J = 0.3$ ist das Plateau so schmal, dass es nicht bei der vorliegenden Diskretisierung Δh erfasst wird. Wir gehen aber davon aus, dass dieses Plateau weiterhin in einem sehr schmalen Bereich stabilisiert werden kann. Das gleiche Verhalten zeigt sich, wenn wir den Störparameter von $J'/J = 0.3$ auf $J'/J = 0.2$ verringern. In der Magnetisierungskurve finden wir erneut dieselben Phasen. Es ändern sich nur die konkreten Feldstärken h , in denen ein Plateau stabil ist. Für $J'/J = 0.2$ ist das Plateau der Dichte $1/8$ zu schmal, um im Diskretisierungsschema erkannt zu werden. Wir gehen auch hier davon aus, dass dieses Plateau in einem sehr schmalen Bereich stabilisiert wird.

Wir fassen zusammen, dass sich für $J'/J \leq 0.4$ eine Magnetisierungskurve zeigt, die innerhalb des perturbativen Modells keine unterschiedlichen Phasen zeigt. Dabei dominieren in der klassischen Magnetisierungskurve die genannten Plateau-Phasen im Bereich der niedrigen Magnetisierung. Für mittlere Magnetisierung dominieren weiterhin Plateaus die Magnetisierungskurve, aber es zeigt sich zudem eine suprakristalline Phase.

Wir beschreiben nun die Phasen und beginnen mit dem $1/12$ -Plateau. Dieses Plateau ist in einer rechteckigen Einheitszelle der Länge sechs stabilisiert. In der Struktur des $1/12$ -Plateaus treten zwei Wechselwirkungen mit Amplitude ${}^{(h)}A_{(3,1)}^{(3,1),(0,0)}$ auf, die erst in Ordnung zehn beitragen. Plateaus mit geringerer Dichte, die durch die Minimierung von Wechselwirkungen stabilisiert

werden, können in dem effektiven Modell, das wir verwenden nicht auftreten. Das liegt daran, dass geringere Dichten mit dem genutzten effektiven Modell keine Wechselwirkungskosten haben.

Das Plateau der Dichte $1/8$ besitzt auch eine rechteckige Einheitszelle der Länge sechs. Im $1/8$ -Plateau der 4-Bein-Röhre treten pro Einheitszelle zweimal die Wechselwirkungen mit Amplitude ${}^{(v)}A_{(0,2)}^{(0,2),(0,0)}$ und zweimal die Wechselwirkungen mit Amplitude ${}^{(v)}A_{(3,0)}^{(3,0),(0,0)}$ auf. Die erstgenannte Wechselwirkung tritt in Ordnung sechs auf und die andere Wechselwirkung beginnt in Ordnung acht. Wir führen an dieser Stelle eine Verknüpfung dieses Ergebnisses zum zweidimensionalen Modell durch. In der Einleitung haben wir in den Kapiteln 1.3 und 1.6 bereits Vorschläge aus der Literatur für die Struktur des $1/8$ -Plateaus (aus lokalisierten Triplets) kennengelernt. Wir sprechen das $1/8$ -diamond- und das $1/8$ -tilted-Plateau nun hinsichtlich ihrer klassischen Wechselwirkungskosten an. Wir bemerken, dass die klassischen Wechselwirkungskosten dieser Plateaus höher sind, als die Kosten der klassischen Struktur der 4-Bein-Röhre. In beiden Vorschlägen werden ausschließlich Wechselwirkungen betrachtet, die in Ordnung sechs beitragen. Wir sehen keinen Hinweis in unseren Lösungen darauf, dass einer der beiden Vorschläge auf der 4-Bein-Röhre realisiert wird. Diesbezüglich sei erwähnt, dass die Struktur des $1/8$ -diamond-Plateaus auf die 4-Bein-Röhre passt. Für das zweidimensionale Modell finden die Arbeiten [87], [90] (durch die Lösung effektiver Modell) und [81] (durch variationale Rechnungen mit MERA) ein Plateau der Dichte $1/9$. Im $1/9$ -Plateau treten pro Einheitszelle viermal die Wechselwirkungen ${}^{(v)}A_{(3,0)}^{(3,0),(0,0)}$ auf. Unsere Lösung für das $1/8$ -Plateau stellt sich, hinsichtlich des zweidimensionalen $1/9$ -Plateaus, als eine auf die 4-Bein-Röhre gezwängte Analogie zu diesem Plateau heraus. Wir bestätigen damit ins Besondere das perturbativ bestimmte Verhalten des $1/9$ -Plateaus aus Arbeit [87].

Das Plateau der Dichte $1/6$ ist ausschließlich aus den Wechselwirkungen mit den Amplituden ${}^{(v)}A_{(0,2)}^{(0,2),(0,0)}$ und ${}^{(v)}A_{(3,1)}^{(3,1),(0,0)}$ aufgebaut. Diese Wechselwirkungen tragen in Ordnung sechs bei. Das $1/6$ -Plateau stellt sich als das letzte Plateau bei niedriger Dichte heraus, das keine Wechselwirkungen realisiert, die in Ordnung vier oder niedriger auftreten. Dann folgt im Phasendiagramm ein Plateau der Dichte $5/24$, das in der Einheitszelle der Länge $L_D = 6$ stabilisiert ist. In diesem Plateau treten die Wechselwirkungen ${}^{(v)}A_{(2,1)}^{(2,1),(0,0)}$ und ${}^{(v)}A_{(1,2)}^{(1,2),(0,0)}$, die in Ordnung vier beginnen, mehrfach auf. Die besonders kostspieligen Wechselwirkungen V_1 , V_2 und V_3 werden noch nicht wirksam.

Das Plateau der Dichte $1/4$ hat eine rechteckige Einheitszelle der Länge sechs. Das Plateau beinhaltet sechs Teilchen an kristallographisch verschiedenen Plätzen. Wir erinnern daran, dass im zweidimensionalen Modell ebenfalls ein Plateau dieser Dichte, sowohl experimentell als auch theoretisch, präsent ist. Von theoretischer Seite ist gesichert, dass im zweidimensionalen Modell eine Streifen-Struktur im System realisiert ist [84] [57] [92]. Eine Analogie dieser Struktur passt auf die Geometrie der 4-Bein-Röhre. Die Geometrie der 4-Bein-Röhre sieht eine periodische Struktur in y -Richtung nach vier Dimer-Plätzen vor. Legen wir eine Streifenstruktur der Dichte $1/4$ in das System, so windet sich ein Streifen alle vier Dimer-Plätze um das System. Dabei entspricht der Abstand von vier Dimer-Plätzen auch dem Abstand der kristallographisch äquivalenten Punkte in einer Streifen-Struktur im zweidimensionalen Modell. Wir finden aber

in der klassischen Lösung keinen Hinweis auf eine Streifen-Struktur. In einer solchen Streifen-Struktur treten mehrere Wechselwirkungen V_2 auf (siehe Kapitel 3.1.5 für eine Definition von V_2). Diese Wechselwirkungen beginnen in dritter Ordnung und in einem klassischen Bild sind diese Wechselwirkungen deswegen relativ teuer. Daher ist es plausibel, dass wir auf der 4-Bein-Röhre stattdessen eine Lokalisierung von Triplets in der klassischen Lösung feststellen, so dass hauptsächlich Wechselwirkungen in vierter Ordnung auftreten (die Wechselwirkungen mit Amplitude ${}^{(v)}A_{(1,2)}^{(1,2),(0,0)}$ und ${}^{(v)}A_{(1,2)}^{(1,2),(0,0)}$). Die Wechselwirkung V_2 tritt nur an jedem dritten Dimer in der Lösung auf.

Das $9/32$ -Plateau wird als einzige Lösung in der großen Einheitszelle der Länge $L_D = 8$ realisiert. In diesem Plateau wird dominant mehrfach die Wechselwirkung V_2 wirksam, wobei an fünf der neun kristallographisch verschiedenen Teilchen diese Wechselwirkung auftritt. Die dominanten Wechselwirkungen des effektiven Modells V_1 oder V_3 liegen nicht vor.

Wir kommen zu den Plateaus der Dichte $7/24$ und $1/3$. Dabei wenden wir uns konkret dem Übergang vom $7/24$ - zum $1/3$ -Plateau zu, wobei eine suprakristalline Phase zwischen diesen Plateaus liegt. Zuerst beobachten wir, dass alle drei Phasen in derselben rechteckigen Einheitszelle der Länge sechs realisiert sind. Interessant ist hier, dass die Struktur des $7/24$ -Plateaus fast identisch zu der Belegung von Triplets im Plateau der Dichte $1/3$ ist. Dabei liegt im $1/3$ -Plateau nur ein Teilchen mehr vor, wie man gut in Abbildung 4.1 sehen kann. Betrachten wir die lokalisierten Teilchen in der suprakristallinen Phase, so ist die Struktur ebenfalls identisch zum Plateau der Dichte $7/24$. Die suprakristalline Phase kann gerade über das zusätzliche Teilchen im Plateau der Dichte $1/3$ verstanden werden. In unserer Lösung liegt der Fall vor, dass lediglich ein Gitterplatz in der suprakristallinen Phase eine Dichte verschieden von Null oder Eins zeigt. Dieser Platz ist mit einem gelben Quadrat in Abbildung 4.1 markiert. Die variable Dichte ist an dem Gitterplatz lokalisiert, an dem das zusätzliche Teilchen in der $1/3$ -Struktur liegt. Die suprakristalline Phase beschreibt also gerade die kontinuierliche Erhöhung einer Dichte von Null auf Eins beim Übergang vom $7/24$ -Plateau zum $1/3$ -Plateau.

Das zusätzliche Teilchen im $1/3$ -Plateau ist so angelegt, dass es zweimal die Wechselwirkung V_2 verursacht. Dieses Teilchen liegt also diagonal zwischen zwei weiteren Teilchen. Wir machen auf eine Verbindung zum korrelierten Hüpfterm C_3 aufmerksam. Dieser Term des effektiven Modells beginnt in Ordnung zwei und liefert einen der stärksten kinetischen Prozesse des effektiven Modells. In der eben genannten diagonalen Belegung kann der korrelierte Hüpfterm wirken. Die kontinuierliche Erhöhung der Dichte muss also durch korreliertes Hüpfen verursacht werden. Dabei kann man die Interpretation der suprakristallinen Phase als kontinuierliche Verbindung der beiden Plateaus der Dichte $7/24$ und $1/3$ am statischen Strukturfaktor sehen. Bisher haben wir Plateau-Phasen gesehen, die sich in Phasenübergängen erster Ordnung abwechseln. Dies kann daran erkannt werden, dass der statische Strukturfaktor beim Übergang einen Sprung durchführt. Das bedeutet, dass das System in eine neue Belegung bei anderer Dichte wechselt, wobei die neue Belegung von der vorherigen Belegung verschieden ist. In der Energie äußert sich der Übergang in einem Knick. Der statische Strukturfaktor des $7/24$ -Plateaus und des $1/3$ -Plateaus wird durch den statischen Strukturfaktor der suprakristallinen Phase gerade kontinuierlich verbunden, was

die Interpretation der suprakristallinen Phase als kontinuierliche Verknüpfung der beiden Phasen stützt.

Das Plateau der Dichte $1/3$ in der klassischen Lösung ergibt sich über lokalisierte Teilchen, die die Wechselwirkungsenergie minimieren. Wir sehen keine Hinweise auf die Stabilisierung von Streifen-Strukturen. Ein möglicher Mechanismus, die $1/3$ -Streifen-Belegungen in einer klassischen Rechnung zu stabilisieren fehlt, wie wir bereits beim $1/4$ -Plateau gesehen haben. Da die Geometrie der 4-Bein-Röhre keine Analogie zu einer $1/3$ -Streifen-Struktur des zweidimensionalen Modells erlauben, ist die Abwesenheit von Streifen-Strukturen für das $1/3$ -Plateau unproblematisch ist.

Im folgenden Unterkapitel diskutieren wir die Magnetisierungskurven der DMRG. Wir erinnern an Kapitel 3.2, in dem die Konvergenz des effektiven Modells bis $J'/J = 0.4$ gezeigt wird. Im Prinzip ist der Fehler der Störungsreihen für kleinere J'/J geringer. Für die Minimierung verhält es sich mit der Konvergenz bezüglich J'/J genau invers. Für kleine J'/J sind die Energieskalen entsprechend gering. Verschiedene lokale Minima liegen energetisch näher zusammen und ein Minimum lässt sich schwerer ausfindig machen. In der DMRG verhält es sich analog und die kleinen Energieskalen für kleine Störparameter J'/J erschweren die Berechnungen. Im nächsten Kapitel zielen wir speziell auf einen Vergleich der Lösungen ab. Dabei scheint der Störparameter $J'/J = 0.3$ ein geeigneter Parameter zu sein, da hier die numerischen Schwierigkeiten außer acht gelassen werden können. Das effektive Modell ist konvergiert und die Energieskalen sind nicht zu klein, so dass sowohl die Minimierung der klassischen Näherung als auch die Numerik der DMRG eine gute Konvergenz zeigen.

4.1.2 Magnetisierungskurven der DMRG

Wir betrachten nun die Ergebnisse der DMRG für die 4-Bein-Röhre auf verschiedenen endlichen Systemen, die uns freundlicherweise von Salvatore Manmana zur Verfügung gestellt wurden. Alle DMRG-Ergebnisse dieser Arbeit sind von S. Manmana erstellt und sind nicht vom Autor dieser Arbeit berechnet worden. Wir beginnen mit der Magnetisierungskurve der DMRG und diskutieren die mikroskopischen Ergebnisse aus der DMRG im Unterkapitel 4.1.3. In Abbildung 4.2 zeigen wir die Magnetisierungskurven der DMRG für drei endliche Systeme der Länge $L_D = 4, 8, 16$ und die klassische Magnetisierungskurve für $J'/J = 0.3$. Die Systeme haben also $N_D = 16$ (für $L_D = 4$), $N_D = 32$ (für $L_D = 8$) und $N_D = 64$ (für $L_D = 16$) Plätze.

Wir betrachten nun, welche Phasen in der Magnetisierungskurve der DMRG gefunden werden. Da die Quantenzahl für die Magnetisierung S_z im Shastry-Sutherland-Modell erhalten ist, findet die DMRG für jeden geschützten Kanal eine Lösung. Wir haben für den Quantenfall in Kapitel 3.1.4 angesprochen, dass die Energie im feldfreien Fall bestimmt werden kann und die Feldabhängigkeit dann durch eine geeignete Geradengleichung gegeben ist. Aus den Schnittpunkten der Gerade können dann die DMRG-Phasendiagramme aus Abbildung 4.2 konstruiert werden. Dabei findet man für ein System aus N_D Teilchen-Plätzen nur Lösungen für die Dichten

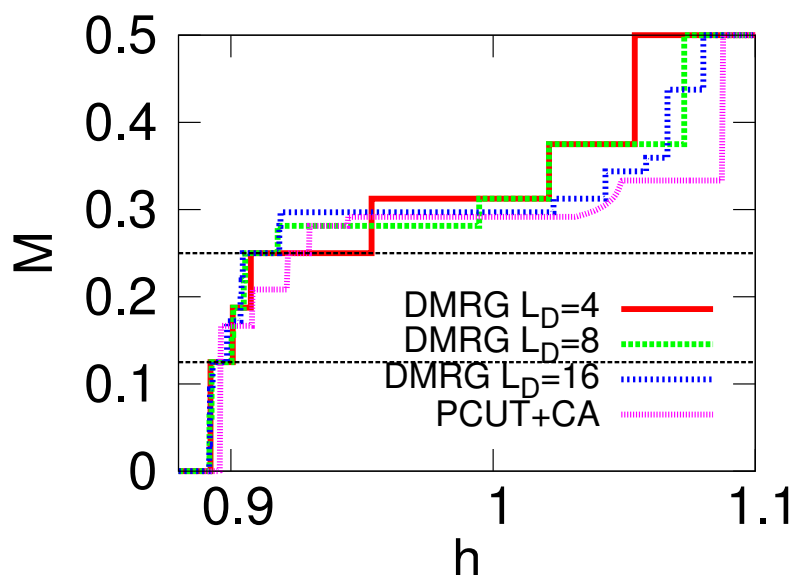


Abbildung 4.2: Die Magnetisierungskurven $M(h)$ der DMRG für drei Systeme verschiedener Länge als Funktion von h sind für $J'/J = 0.3$ gezeigt, bis zur Magnetisierung $M(h) < 0.5$. Die betrachteten, offenen 4-Bein-Röhren weisen in x-Richtung L_D Dimere auf. Dabei haben wir Systeme mit $L_D = 4$ (rote durchgezogene Kurve), $L_D=8$ (grüne gestrichelte Kurve) und $L_D = 16$ (blaue gestrichelte Kurve) betrachtet. Die magenta-farbene Kurve stellt das klassische Ergebnis für die Magnetisierungskurve der 4-Bein-Röhre für $J'/J = 0.3$ dar, die wir im mittleren linken Bild in Abbildung 4.1 des vorherigen Unterkapitels 4.1.2 bereits gezeigt haben. Die horizontalen, gestrichelten, schwarzen Linien markieren die Magnetisierungen $1/8$ und $1/4$ zur besseren Orientierung.

$M(h) = n = N_{t+}/N_D$ mit der Anzahl an Tripletts im System N_{t+} . Daher müssen Systeme verschiedener Länge genutzt werden, um mögliche Lösungen verschiedener Dichte zu erlauben oder auf anderen Systemen gefundenen Dichten zu bestätigen. In der klassischen Rechnung tritt durch die Wahl von Einheitszellen eine analoge Schwierigkeit auf, denn die Einheitszelle bestimmt die erlaubten Dichten für kristalline Phasen des Systems und es müssen verschiedene Einheitszellen getestet werden. Wir werden die Diskussion der DMRG-Magnetisierungskurven in 2 Teile aufteilen, wobei wir zunächst einmal Magnetisierungen zwischen $1/8$ und $1/4$ diskutieren und zuletzt Magnetisierungen größer $1/4$ ansprechen. Betrachten wir die Magnetisierungskurven für $M(h) < 1/8$, so werden sehr schmale Plateaus in diesem Bereich gefunden, in denen wenige Teilchen im System vorliegen. Dabei sind die Dichten gering und wir vermuten, dass hier die Physik von isolierten Teilchen vorliegt.

Wir kommen nun zu den stabilisierten Phasen zwischen $1/8$ und $1/4$. Ein Plateau der Dichte $1/8$ passt auf alle drei Systeme, die wir auf Grundlage der DMRG diskutieren. Ein Plateau dieser Dichte ist auch in allen drei DMRG-Phasendiagrammen vertreten, wobei sich in allen drei Systemen ein sehr breites Plateau zeigt. Dies fällt speziell ins Auge, wenn wir dies mit dem sehr schmalen $1/8$ -Plateau vergleichen, das wir in der klassischen Magnetisierungskurve gefunden haben. Weiter ist zu beachten, dass alle drei $1/8$ -Plateaus der DMRG eine konsistente Breite zeigen und zwischen denselben Feldstärken stabilisiert werden. Die Lage und Breite des $1/8$ -Plateaus scheint systemunabhängig zu sein, so dass wir klare Hinweise darauf sehen, dass ein $1/8$ -Plateau im thermodynamischen Limes vorliegt.

Die Systeme der Länge $L_D = 4$ und der Länge $L_D = 8$ zeigen darüberhinaus ein relativ breites Plateau der Dichte $3/16$. Dabei nimmt die Breite des Plateaus im größeren System ab. Das System der Länge $L_D = 16$ stabilisiert kein Plateau dieser Dichte. Stattdessen finden wir nach dem $1/8$ -Plateau ein Plateau der Dichte $5/32$, das dann in ein Plateau der Dichte $7/32$ übergeht. Dazwischen findet sich im Gegensatz zum System der Länge $L_D = 4$ und 8 kein Plateau der Dichte $3/16$. Die Breite des Plateaus der Dichte $5/32$ im System der Länge $L_D = 16$ ist vergleichbar mit der Breite des $3/16$ -Plateaus der kleineren Systeme. In der klassischen Lösung haben wir in diesem Dichteregime zwei Plateaus der Dichte $1/6$ und $5/24$ gefunden. Diese Dichten passen aber nicht auf die betrachteten Systeme der DMRG. Ein einfaches Bild der Phasen zwischen dem Plateau der Dichte $1/8$ und $1/4$ zeigt sich daher, sowohl innerhalb der verschiedenen DMRG-Lösungen als auch im Vergleich zur klassischen Magnetisierungskurve, nicht.

Ein Plateau der Dichte $1/4$ wird in allen drei DMRG-Systemen realisiert. Im kleinsten DMRG System ($L_D = 4$) findet sich ein sehr breites Plateau der Dichte $1/4$. Für die beiden größeren Systeme findet man das $1/4$ -Plateau in einem kleineren Bereich stabilisiert, aber die Breite des $1/4$ -Plateaus ist immer noch nennenswert. Dabei zeigt sich, wie schon beim $1/8$ -Plateau, ein sehr konsistentes Bild in der DMRG. Der Stabilitätsbereich des $1/4$ -Plateaus ist für das $L_D = 8$ -System und das System der doppelten Größe fast identisch. Ferner liegt die Feldstärke, die den Beginn des $1/4$ -Plateaus markiert, auch im kleinsten System konsistent zu den anderen Systemen. Dieser Befund lässt vermuten, dass dieses Plateau im thermodynamischen Limes stabilisiert wird.

Wir sprechen nun den Bereich mittlerer Magnetisierung zwischen $1/4$ und $1/2$ an. Dabei geben wir keine detaillierte Beschreibung an, sondern gehen hier nur allgemein auf die Beobachtung ein, dass sich in diesem Dichteregime kein konsistentes Bild zeigt. In der DMRG finden die drei Systeme in diesem Dichteregime jeweils verschiedene Plateaus, die sich in der Dichte unterscheiden. Bei genauerer Beobachtung zeigt sich, dass die Systeme jeweils durch die Verdopplung der Länge auseinander hervorgehen. Wie schon beim $1/8$ - und $1/4$ -Plateau gesehen, erlaubt die systemunabhängige Stabilisierung eines Plateaus, die Interpretation des Plateaus als stabil im thermodynamischen Limes. Im mittleren Dichteregime sehen wir aber keine Anzeichen für diesen Fall und von der DMRG-Seite steht eine Bestimmung der thermodynamischen Phasen noch aus. Zudem wird keine Phase, die wir in der klassischen Näherung gesehen haben, von der DMRG bestätigt, so dass dieser Dichtebereich der 4-Bein-Röhre im Allgemeinen noch unklar ist. Übereinstimmend wird mit der DMRG in allen drei Systemen und in der klassischen Näherung ein Plateau der Dichte $1/2$ realisiert. In der klassischen Näherung ist ein Untergitter aus vertikalen oder horizontalen Dimeren vollständig belegt und in der DMRG wird aufgrund von Randeffekten immer das Untergitter aus horizontalen Dimeren besetzt.

Zusammengefasst folgt, dass die DMRG Plateaus der Dichten $1/8$ und $1/4$ im thermodynamischen Limes vorhersagen. Mit der klassischen Näherung, die per Konstruktion im thermodynamischen Limes arbeitet, haben wir ebenfalls Plateaus dieser Dichten gefunden. Im Vergleich der Ergebnisse beider Methoden zeigen sich hier aber noch Diskrepanzen. Das klassische $1/8$ -Plateau wird im selben Bereich stabilisiert, wie die Quanten-Lösungen der DMRG. Dabei sind

die DMRG-Lösungen aber wesentlich stabiler und breiter. Für das $1/4$ -Plateau beobachten wir, dass die Breite dieses Plateaus in der klassischen Näherung und in der DMRG ähnlich ist. Hier gibt es aber wesentliche Unterschiede in dem Stabilitätsbereich dieser Phase. Das $1/4$ -Plateau der beiden großen DMRG-Systeme liegt deckungsgleich in der Magnetisierungskurve und eine deutliche Verschiebung des DMRG- $1/4$ -Plateaus für größere Systeme ist unwahrscheinlich. Weiter erinnern wir daran, dass die Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$ zudem experimentell relevant sind, da $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ im externen Magnetfeld gerade Magnetisierungsplateaus dieser Dichten stabilisiert. Wir sehen, dass wir auf der 4-Bein-Röhre mit beiden Methoden Magnetisierungsplateaus im thermodynamischen Limes vorhersagen, die relevant für den zweidimensionalen Fall sein können. Daher werden wir uns im nächsten Unterkapitel speziell der mikroskopischen Struktur dieser beiden Plateaus widmen.

4.1.3 Magnetisierungsprofile des $1/8$ - und $1/4$ -Plateaus

4.1.3.1 $1/8$ -Plateau

Wir betrachten im Folgenden die mikroskopischen Strukturen für das $1/8$ -Plateau der DMRG und der klassischen Näherung genauer und stellen die Resultate für die Grundzustandsenergie und das Magnetisierungsprofil aus beiden Methoden gegenüber. Wir fassen zunächst unsere klassischen Ergebnisse in Bild 4.3 zusammen, wobei wir uns im Folgenden wieder auf den numerisch stabilen Störparameter $J'/J = 0.3$ beschränken. Wir hatten in Unterkapitel 4.1.1 bereits eine Verbindung zum zweidimensionalen Modell hergestellt und erinnern daran, dass dieses $1/8$ -Plateau einem auf die 4-Bein-Röhre gezwängten $1/9$ -Plateau entspricht, wie es in den Arbeiten [87] [81] gefunden wird. Die Triplets des $1/8$ -Plateaus in der klassischen Näherung sind isoliert voneinander und minimieren für die gegebene Dichte die Wechselwirkungsenergien. Wir geben in Abbildung 4.3 zudem die Grundzustandsenergie pro Spin $E/(2 \cdot N_C) = E/N_S = -0.319011$ der klassischen Lösung an.

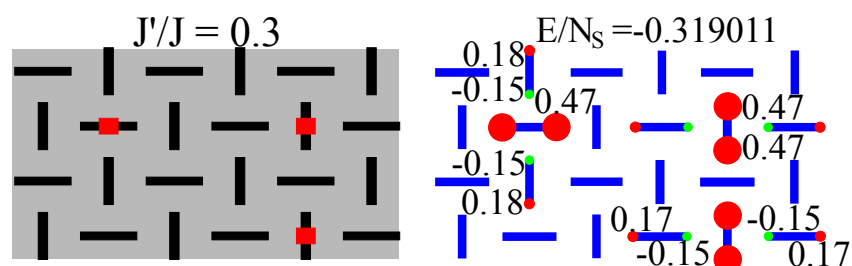


Abbildung 4.3: Wir zeigen das klassische Ergebnis der Struktur des $1/8$ -Plateaus für $J'/J = 0.3$. Im linken Bild ist die Struktur in der Teilchen-Sprache in der zuvor verwendeten Darstellung gezeigt. Rechts ist die lokale Magnetisierung in z-Richtung der Struktur gezeigt. Dabei stellen rote und grüne Kreise das lokale Moment dar, wobei wir auch die Zahlenwerte für die Amplituden der lokalen Momente eingetragen haben. Lokale Momente, die kleiner als 0.01 sind, werden im Bild nicht gezeigt. Roten (Grünen) Kreisen stellen lokale Momente dar, die in (gegen) Feldrichtung polarisiert sind.

Wir zeigen auf der rechten Seite das Magnetisierungsprofil der $1/8$ -Struktur. Das Magnetisierungsprofil stellt die klassische $1/8$ -Struktur im Spin-Bild des ursprünglichen Shastry-Sutherland-Modells dar. Die Freiheitsgrade im ursprünglichen Modell sind wieder die beiden Spins, die sich an einem Dimer befinden. Wie zuvor herausgestellt, sind die effektiven Teilchen der klassischen Lösung im linken Bild in großen Abständen voneinander lokalisiert. Daher führen wir keine Berechnung der effektiven Magnetisierung der gesamten Einheitszelle durch, sondern ersetzen die Teilchen durch die lokalen Magnetisierungen einer elementaren Teilchenanregung.

Wir erinnern daran, dass endliche Magnetisierungen lediglich in sehr kurzen Abständen auftreten. Das Triplon mit $S_{\text{Total}} = 1$ und $S^z = 1$ ist die magnetische Darstellung einer Anregung im effektiven Modell. Im rechten Bild von Abbildung 4.3 zeigen wir die Magnetisierung an einem Spin durch rote und grüne Kreise. Der Durchmesser der Kreise bestimmt die Amplitude der lokalen Magnetisierung. Rote Kreise stellen in Feldrichtung polarisierte Spins dar und grüne Kreise sind Spins, die gegen die Feldrichtung polarisiert sind. Wir erinnern, dass Spins $1/2$ im ursprünglichen Modell das maximale Moment $1/2$ tragen können. Wir zeigen nur Magnetisierungen $M > 0.01$. Man sieht, dass ein Teilchen im effektiven Bild ein charakteristisches Magnetisierungsprofil besitzt. Am Platz des Teilchens sind beide Spins des Dimers dominant in Richtung des Magnetfeldes polarisiert. Auf zwei benachbarten Dimeren ist der jeweils nächste Spin entgegengesetzt zum Feld orientiert und der andere Spin in Richtung des Feldes polarisiert.

Die Magnetisierungsprofile der $1/8$ -Plateaus der drei endlichen Systeme mit $L_D = 4, 8$ und 16 , die wir mit der DMRG betrachtet haben, sind in Abbildung 4.4 zu sehen. Betrachten wir zuerst das Magnetisierungsprofil in dem endlichen System der Länge $L_D = 4$, so scheint eine spaltenweise Magnetisierung vorzuliegen. Wir beginnen mit den magnetisierten Plätzen in der zweiten und dritten Spalte. Dabei finden sich auf den vertikalen Dimeren jeweils endliche magnetische Momente, die die größten Momente des Systems darstellen. Die Momente der vertikalen Dimere haben auf jedem Spin denselben Wert, der in einer Größenordnung von $1/4$ liegt, so dass $S_{\text{Total}} \approx 8 \cdot 1/4 = 2$ in diesen beiden Spalten gilt. Da ein Moment der Amplitude $1/2$ dem vollen Moment entspricht, scheint im System eine Superposition aus Zuständen, in denen die vertikalen Plätze belegt oder unbelegt sind, vorzuliegen, so dass sich das beschriebene halbe Moment einstellt. In der zweiten und dritten Spalte liegen zudem endliche Magnetisierungen auf den horizontalen Dimeren vor, die geringer sind als die Momente der Spins der vertikalen Dimere. Dabei zeigen sich Momente in Richtung des Feldes an den Spins, die näher zum Rand des Systems gelegen sind. Die Spins der vertikalen Dimere, die im Zentrum der Struktur liegen, sind in negative Feldrichtung orientiert. Dieses Verhalten und die Größenordnung (im Vergleich zur Amplitude der Momente auf den vertikalen Plätzen) erinnert an das Verhalten von Triplonen. Wir weisen auf die Diskussionen in Kapitel 3.2.6 hin. Exemplarisch kann dies auch an den Triplonen von Abbildung 4.3 gesehen werden. Die genannten Strukturen auf horizontalen Dimeren der DMRG erinnern an das Magnetisierungsprofil von benachbarten Plätzen von effektiven Teilchen, in der magnetischen Sprache.

In der linken und rechten Spalte des Systems der Länge $L_D = 4$, also den Rändern des Systems, finden wir erneut ein unterschiedliches Verhalten von vertikalen und horizontalen Dimeren. Die

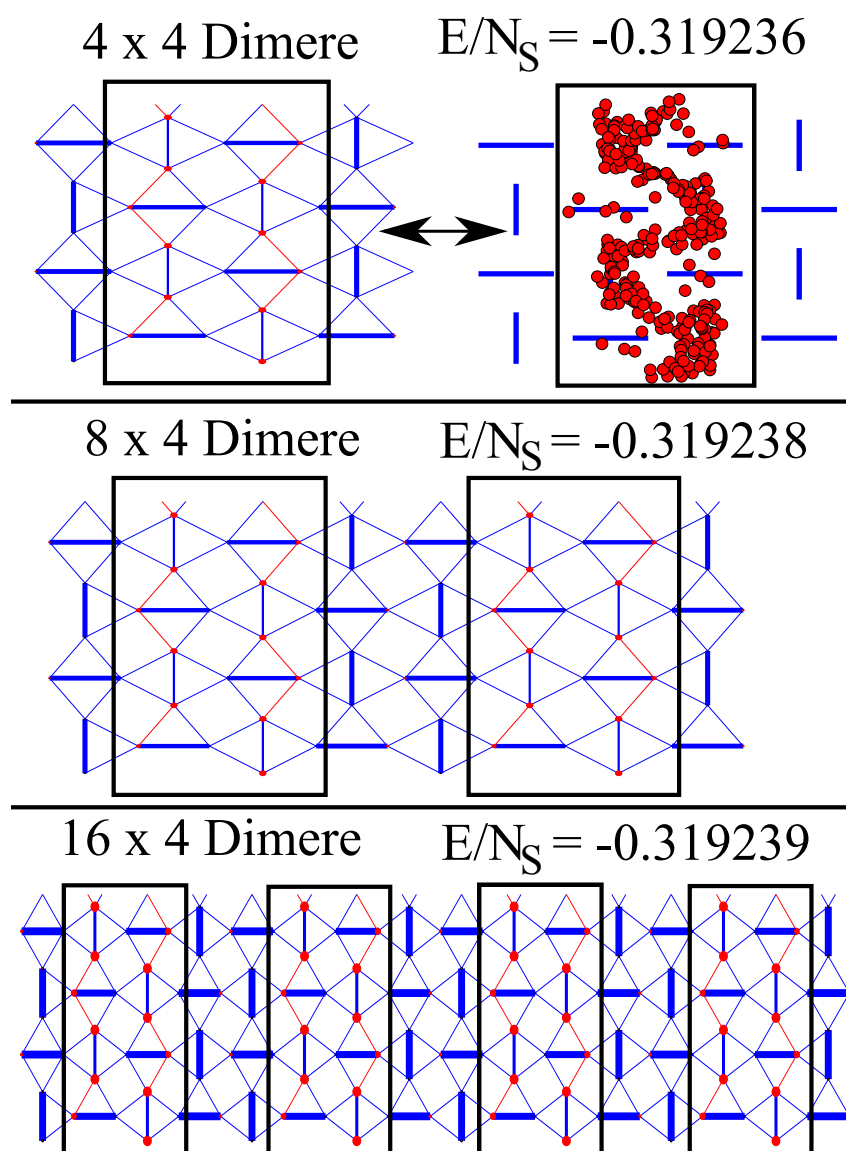


Abbildung 4.4: Zusammenfassung der Magnetisierungsprofile und der Grundzustandsenergien der DMRG-Ergebnisse für das $1/8$ -Plateau bei $J'/J = 0.3$. Von oben nach unten sind die Systeme der Länge $L_D = 4$, $L_D = 8$ und $L_D = 16$ zu sehen. Die Systeme sind durch blaue Balken dargestellt, die für die vertikalen und horizontalen Dimere des Systems stehen. Der Durchmesser der roten und blauen Kreise an den Positionen der Spins im System stellt die z-Komponente der Magnetisierung dar. Dabei sind rote (blaue) Kreise in (gegen) die Feldrichtung orientiert. Wir geben zudem die Grundzustandsenergie E/N_S des Systems pro Spin an. Wir haben in den Bildern aller drei Systeme schwarze Boxen eingeführt, da wir auf den verschiedenen Systemen jeweils ein auffälliges Magnetisierungsprofil innerhalb der eingerahmten zwei Spalten erkennen, das sich in allen Systemen identisch wiederfindet. Dabei zeigen wir die Bilder der Rohdaten von Salvatore Manmana, die wir für dieses Bild skaliert haben. Durch die Skalierung der Bilder sehen die identischen Magnetisierungsprofile in den Bildern unterschiedlich aus und wir haben die schwarzen Boxen zur Hilfestellung eingefügt. Im Text gehen wir darauf ein, dass in diesen Spalten eine Überlagerung von zwei Triplets vorliegen sollte, was wir als Karikatur oben rechts neben dem Magnetisierungsprofil des Systems der Länge $L_D = 4$ zeigen.

vertikalen Dimere sind nicht magnetisiert und das System scheint hier noch im Wesentlichen im Singulett-Zustand vorzuliegen. Die horizontalen Dimere an den Rändern zeigen dasselbe Verhalten wie die horizontalen Dimere in der zweiten und dritten Spalte. Hier zeigt sich das charakteristische Magnetisierungsprofil von benachbarten Dimeren. Wie beschrieben, wirkt das Verhalten der horizontalen Dimere wie Polarisationsverhalten. In der aktuellen Interpretation ist es vorgesehen, dass auf den vertikalen Dimeren im Zentrum der Struktur Teilchen vorliegen, wobei wir hier eine Überlagerung vermuten können. Diese vorläufige Interpretation haben wir im oberen Bild von Abbildung 4.3 angedeutet, indem wir die Spalten zwei und drei mit einer schwarzen Box umrandet haben, die die zwei vermuteten Triplonen im System einrahmen soll. Konkret finden wir genau zwei analoge Strukturen für das System mit $L_D = 8$ und entsprechend vier analoge Strukturen für das System mit $L_D = 16$. Die DMRG bekommt somit eine magnetische Struktur aus zwei Teilchen in einer Einheitszelle mit $N_D = 16$ Dimeren und der Länge $L_D = 4$.

Per Konstruktion ist das klassische Ergebnis im thermodynamischen Limes gültig und finite-size-Effekte treten nicht auf. Es können nur Lösungen mit niedrigerer Grundzustandsenergie auftreten, wenn wir eine Einheitszelle finden, die eine Lösung geringerer Energie stabilisiert. Dabei haben wir in unserem Satz von Einheitszellen auch größere Zellen als die Einheitszelle der Länge $L_D = 6$ einbezogen. Für $J'/J = 0.3$ ist das effektive Modell konvergiert und der Zahlenwert der klassischen $1/8$ -Struktur pro Spin $(E/N_S)_{1/8}^{\text{klassisch}} = -0.319011$ ist in allen angegebenen Nachkommastellen exakt. In der DMRG liegen hingegen finite-size Effekte vor. Um die Grundzustandsenergie des thermodynamischen Limes abzuschätzen, müssen dazu Systeme verschiedener Länge betrachtet werden und der Limes für $1/N_S \rightarrow 0$ analysiert werden. Schauen wir uns die Energien der drei Systeme an (siehe Abbildung 4.4), so ist die Energie bis zur sechsten Nachkommastelle konvergiert. Wir können die Grundzustandsenergie des Systems der Länge $L_D = 16$ als sehr gute Abschätzung (bzw. obere Schranke) betrachten. Dabei liegt die DMRG mit einer Energie pro Spin von $(E/N_S)_{1/8}^{\text{DMRG}} = -0.319239$ in der vierten Nachkommastelle niedriger als die klassische Lösung. Beide Methoden haben bei der Bestimmung der Grundzustandsenergie eine Konvergenz bis zur sechsten Nachkommastelle erreicht, aber es liegt keine Übereinstimmung vor. Die Energiedifferenz liegt bei $\Delta (E/N_S)_{1/8} = (E/N_S)_{1/8}^{\text{klassisch}} - (E/N_S)_{1/8}^{\text{DMRG}} = 0.000228$.

Wir stoßen auf weitere Unterschiede, wenn wir die Magnetisierungsprofile betrachten. Dabei tritt in der DMRG das Problem auf, dass man zwar Observablen berechnen kann, aber zu den Systemen liegen keine Wellenfunktionen vor, die eine mikroskopische Interpretation der Physik erlaubt. Wir hatten angedeutet, dass die Lösungen vermutlich als Überlagerung von lokalisierten Triplonen bestimmt ist. Es ist zunächst naheliegend, die DMRG-Ergebnisse anhand der klassischen Lösung zu interpretieren. Dabei fällt die Interpretation schwer, denn es ist nicht ersichtlich, welcher Zusammenhang zwischen dem klassischen Magnetisierungsprofil und dem DMRG-Magnetisierungsprofil besteht.

Die klassische Struktur aus Abbildung 4.3 ist ein symmetriegebrochenes Ergebnis. Die Translations-symmetrie ist gebrochen und durch Verschiebung aller Teilchen im System kann man weitere, energetisch entartete Lösungen finden. In einer Diagonalisierung eines endlichen, periodischen

Systems, würde sich das Ergebnis dann als Überlagerung dieser Lösungen ergeben. Man würde ein homogenes Magnetisierungsprofil im System sehen. Die DMRG diagonalisiert hingegen offene Systeme. Hier würde man analog erwarten, dass eine Überlagerung von klassischen Lösungen vorliegt, wobei alle energetisch entarteten Zustände überlagert werden, die den Symmetrien des Clusters unterliegen. Dabei kann die klassische Struktur, die in einer Einheitszelle der Länge $L_D = 6$ stabilisiert ist, nicht auf die DMRG-Systeme gesetzt werden, die in einer Einheitszelle der Länge $L_D = 4$ stabilisiert sind. Hier misslingt also die Interpretation der DMRG-Ergebnisse als Überlagerung von klassischen Lösungen.

Die DMRG als Diagonalisierungsverfahren für endliche Systeme liefert ein Resultat, das die Quantenmechanik des ursprünglichen Modells voll umfasst. Das System wird unvoreingenommen betrachtet. Daher können keine Fehler aufgrund einer falschen Beschreibung des Systems auftreten und nur methodische Fehlerquellen spielen eine Rolle. Methodische Fehlerquellen sind im speziellen Finite-Size-Effekte und Trunkierungsfehler (siehe auch Kapitel A.1.1). Die Größenordnung von Fehlern aus Finite-Size-Effekten haben wir bereits auf $O(10^{-6})$ abgeschätzt und der Trunkierungsfehler der DMRG dieser Rechnung ist typischerweise in der Größenordnung $O(10^{-7})$. Wir versuchen nun die wesentlichen Unterschiede der klassischen Lösung und der DMRG zu verstehen und wenden uns zuerst der Energiedifferenz der beiden Lösungen zu. Eine Möglichkeit, die Unterschiede zwischen den Energien aus der klassischen und der DMRG-Methode zu verstehen liegt darin, die in einer klassischen Belegung fehlenden Quantenfluktuationen zu betrachten. So kann abgeschätzt werden wie weit sich die Energie der klassischen Lösung absenken kann, wenn wir die Quantenmechanik des effektiven Modells nachträglich einbeziehen. Sind diese Fluktuationen ausreichend, die genannte Energiedifferenz von $\Delta(E/N_S)_{1/8} = 0.000228$ zu erklären, so können die DMRG-Ergebnisse durch semi-klassische Plateaus verstanden werden. Wir sind dieser Interpretation bereits bei der Betrachtung des Magnetisierungsprofils nachgegangen, haben aber soweit keine augenscheinlichen Hinweise gesehen, dass die DMRG-Lösung eine Überlagerung von klassischen Zuständen ist, in denen voneinander entfernte, lokalisierte Triplonen vorliegen.

Es könnte aber auch der Fall vorliegen, dass Quantenkorrekturen zu den klassischen Strukturen den Energieabstand $\Delta(E/N_S)_{1/8} = 0.000228$ nicht erklären. Dies wäre ein Hinweis darauf, dass die DMRG einen Quanten-Zustand findet, der kein klassisches oder semi-klassisches Analogon besitzt. So sind z. B. stark verschränkte Zustände ein rein quantenmechanisches Phänomen und können per Ansatz von der klassischen Näherung in einem System nicht erkannt werden. Wir betrachten nun das effektive Modell (siehe auch Kapitel 3.1.5) erneut. Zunächst erkennen wir, dass starke korrelierte Hüpfsterme (die in Ordnung zwei oder vier beitragen) auf die klassische Struktur in Abbildung 4.3 nicht wirken. Es finden sich erst in Ordnung fünf und sechs Prozesse im effektiven Modell, die zu Fluktuationen in den klassischen 1/8-Belegungen führen können. Diese Quantenkorrekturen umfassen korrelierte Hüpfsterme und das normale Hüpfen, dass in Ordnung sechs beiträgt. Wir greifen die genannten Terme auf und schätzen den Energiegewinn durch Quanten-Fluktuation auf die klassische 1/8-Struktur perturbativ ab.

Perturbativ kann man Quanten-Fluktuationen in klassischen Strukturen abschätzen, indem man Prozesse betrachtet, die ein klassisches Teilchen auf einen Nachbarplatz springen lassen. Dann

lässt man das Teilchen durch den komplex konjugierten Prozess wieder in die ursprüngliche Belegung zurückspringen. Allgemein ergeben sich die Energiekorrekturen solcher Phänomene über t^2/U . Hier meint t die Amplitude des Hüpfterms und U ist die Energiedifferenz zwischen den Belegungen der Teilchen vor und nach dem Sprung. Dabei werden wir im Folgenden nur die führende Ordnung der entsprechenden Prozesse des effektiven Modells betrachten und für $J'/J = 0.3$ auswerten. Da in der Tat $t \ll U$ gilt, ist die eben beschriebene t^2/U -Rechnung perturbativ kontrolliert.

Wir finden einen anwendbaren korrelierte Hüpfterm für die klassisch Lösung in Abbildung 4.3. Der Prozess hat die Amplituden ${}^{(h)}A_{(0,2)}^{(0,2),(1,1)} = (1/8) \cdot (J'/J)^5 + \dots$. Weiter kann der Ein-Teilchen-Hüpfterm mit Amplitude ${}^{(v)}A^{(1,1)} = (-1/96) \cdot (J'/J)^6 + \dots$ eine Energiereduktion bewirken. Beide Prozesse lassen ein Teilchen im System springt, so dass dominant die Wechselwirkung $V_2 = {}^{(v)}A_{(1,1)}^{(1,1),(0,0)} = (-1/4) \cdot (J'/J)^3 + \dots$ auftritt, die wir als Energiedifferenz U verwenden werden. Die Quantenkorrekturen der beiden Prozesse führen in einer t^2/U -Abschätzung zu einem Energiegewinn in der Größenordnung

$$\begin{aligned} \Delta \left(E_{{}^{(h)}A_{(0,2)}^{(0,2),(1,1)}} / N_S \right) &= 8 \cdot \frac{\left(\frac{1}{8} \cdot (0.3)^6 \right)^2}{-\frac{1}{4} \cdot (0.3)^3} \cdot \frac{1}{48} \approx -2 \cdot 10^{-6} \\ \Delta \left(E_{{}^{(v)}A^{(1,1)}} / N_S \right) &= 12 \cdot \frac{\left(\frac{1}{96} \cdot (0.3)^6 \right)^2}{-\frac{1}{4} \cdot (0.3)^3} \cdot \frac{1}{48} \approx -2 \cdot 10^{-9} \\ \rightarrow \Delta \left(E_{\text{Total}} / N_S \right) &\approx -2 \cdot 10^{-6} \quad . \end{aligned} \quad (4.1)$$

Die Vorfaktoren geben die Häufigkeit an, mit der der entsprechende Prozess in der klassischen Belegung angewendet werden kann. Der letzte Faktor entspricht der Normierung auf die 48 Spins, aus denen die Einheitszelle des klassischen 1/8-Ergebnisses aufgebaut ist. Es ergibt sich eine Quantenkorrektur in der Größenordnung von 10^{-6} . Wie erwähnt ist dieses Ergebnis perturbativ kontrolliert. Die Quantenkorrektur des klassischen Ergebnisses liegt daher zwei Dekaden unterhalb der Energiedifferenz zur DMRG. Wir merken an, dass andere Vorschläge für die 1/8-Struktur (z. B. aus der Literatur für das zweidimensionale Modell) eine höhere Wechselwirkungsenergie zeigen. Dabei sind mögliche Quantenkorrekturen typischerweise aber weiterhin in der präsentierten Größenordnung. Eine mögliche Erklärung der Diskrepanzen zwischen der klassischen Näherung und der DMRG scheint über semi-klassische Zustände ausgeschlossen. Wir werden im Verlauf dieser Arbeit diese überraschende Diskrepanz auflösen und nehmen vorweg, dass die DMRG in der Tat einen hoch verschränkten Quanten-Zustand findet, der kein klassisches Analogon besitzt.

4.1.3.2 1/4-Plateau

Wir wenden uns nun der Analyse der mikroskopischen Ergebnisse aus der klassischen Näherung und der DMRG für das 1/4-Plateau zu. Die klassischen Ergebnisse für das Plateau der Dichte 1/4 für den Störparameter $J'/J = 0.3$ sind in Bild 4.5 zusammengefasst (siehe auch Kapitel 4.1.1). Dabei nutzen wir die gleichen Darstellungen, wie für das 1/8-Plateau. Die niedrigste Energie

haben wir in einer Einheitszelle der Länge $L_D = 6$ gefunden. Das rechte Bild zeigt die lokale Magnetisierung der klassischen Lösung. Dabei haben wir wieder auf eine vereinfachte Rücktransformation zurückgegriffen, die die Triplets durch Triplonen ersetzt. Wir zeigen in diesem Bild zudem die Grundzustandsenergie pro Spin $E/N_S = -0.262219$ der klassischen Struktur.

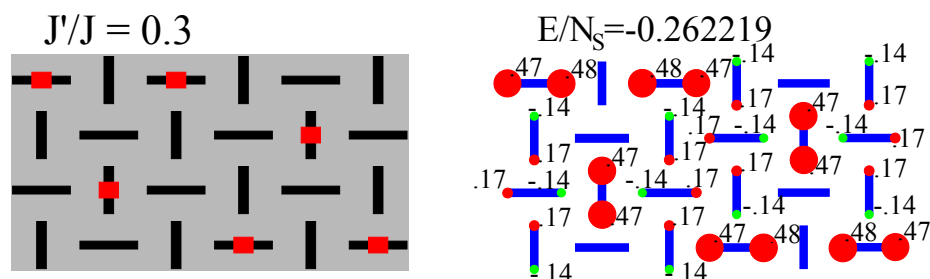


Abbildung 4.5: Wir zeigen das klassische Ergebnis der Struktur des $1/4$ -Plateaus für $J'/J = 0.3$. Im linken Bild ist die Struktur in der Teilchen-Sprache in der zuvor verwendeten Darstellung gezeigt. Rechts ist die lokale Magnetisierung in z -Richtung der Struktur abgebildet. Dabei stellen rote und grüne Kreise das lokale Moment dar, wobei wir auch die Zahlenwerte für die Amplituden der lokalen Momente eingetragen haben. Lokale Momente, die kleiner als 0.01 sind, werden im Bild nicht gezeigt. Das Moment von roten (grünen) Kreisen ist in (gegen) Feldrichtung polarisiert.

Betrachten wir die klassische Struktur aus Abbildung 4.5 sind die wesentlichen Wechselwirkungen zwei Wechselwirkungen vom Typ V_2 , die in Ordnung drei beginnen und Wechselwirkungen mit einer Amplitude ${}^{(O)}A_{(2,1)}^{(2,1),(0,0)}$ oder ${}^{(O)}A_{(1,2)}^{(1,2),(0,0)}$, wobei die Orientierung (O) für die Amplitude dieser Wechselwirkung nicht relevant ist. Diese Wechselwirkungen beginnen in Ordnung vier. Man erkennt die Triplonen in der magnetischen Darstellung sehr gut und es treten keine Überschneidungen auf, die darauf hindeuten würden, dass die Triplon-Näherung nicht angemessen ist. Wir erinnern an dieser Stelle an die Literatur zum zweidimensionalen Modell, die sehr einheitlich eine Streifen-Struktur als Magnetisierungsprofil für die mikroskopische Struktur bestimmt [84] [57] [92]. Die Geometrie der 4-Bein-Röhre kann ein Analogon zu der Streifen-Struktur des zweidimensionalen Modells realisieren, wofür wir aber in der klassischen Näherung keine Anzeichen sehen. Dies ist verständlich, da in einer Streifen-Belegung deutlich häufiger die Wechselwirkung V_2 wirksam wird.

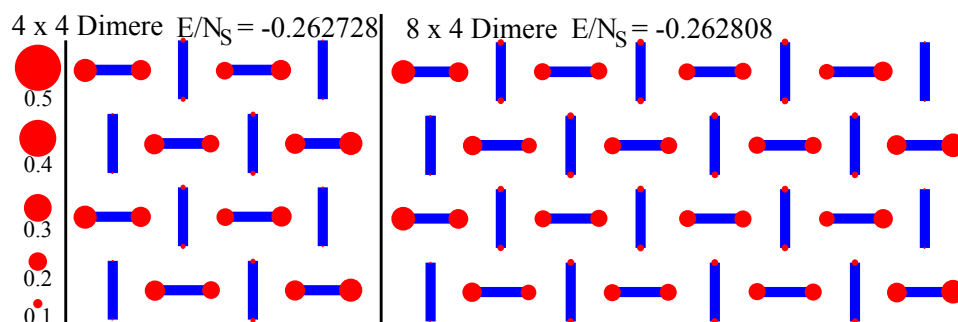


Abbildung 4.6: Zusammenfassung der Magnetisierungsprofile und der Grundzustandsenergien der DMRG-Ergebnisse für das $1/4$ -Plateau bei $J'/J = 0.3$. Im linken Bild ist das System der Länge $L_D = 4$ und im rechten Bild der Länge $L_D = 8$ zu sehen. Die Dimere der Systeme sind durch blaue Balken angedeutet, die für die vertikalen und horizontalen Dimere des Systems stehen. Der Durchmesser der roten Kreise an den Positionen der Spins im System stellt die z -Komponente der Magnetisierung dar. Die Magnetisierung ist stets in die Feldrichtung orientiert.

Wir wenden uns nun den Magnetisierungsprofilen der DMRG zu. Die Magnetisierungsprofile für zwei Systeme zeigen wir exemplarisch in Abbildung 4.6. Wir diskutieren die beiden präsentierten Lösungen nun zeitgleich, da sich ein sehr konsistentes Bild zeigt. Die wesentliche Magnetisierung liegt in beiden Systemen auf den horizontalen Dimeren. Die beiden Spins eines horizontalen Dimers zeigen ein Moment von etwa 0.23 bis 0.24. Entsprechend einer Teilchen-Interpretation kann hier wieder von einer Überlagerung von belegten und unbelegten Plätzen ausgegangen werden, so dass sich das halbe Moment zeigt. Die Spins an einem horizontalen Dimer zeigen nicht exakt dasselbe Moment und der zum Rand des Systems orientierte Spins ist leicht größer. Dies ist ein Randeffect des endlichen Systems. Auf den vertikalen Dimeren ist die Magnetisierung sehr schwach und liegt etwa zwischen 0.01 und 0.02. Das Ergebnis der DMRG ist konsistent mit einer Interpretation als Überlagerung von Streifen-Strukturen. In diesem Fall würden sich die Magnetisierungen auf den horizontalen Dimeren zum halben Moment addieren. Die charakteristischen Magnetisierungen eines horizontalen Triplons auf Spins eines vertikalen Dimers würden sich zu etwa Null summieren, was in der DMRG-Lösung ebenfalls vorliegt. Wir verbleiben daher mit der Interpretation, dass die DMRG anscheinend das zuvor erwähnte Analogon zur zweidimensionalen Streifen-Struktur auf den Systemen der 4-Bein-Röhre stabilisiert.

Wie schon beim Plateau der Dichte $1/8$ gibt es deutliche Unterschiede zur klassischen Lösung. Zunächst diskutieren wir die mittels der DMRG bestimmte Energie über eine Finite-Size-Betrachtung. Die beiden präsentierten Lösungen der DMRG aus Abbildung 4.6 zeigen noch einen Energieunterschied in der Energie pro Spin in der vierten Nachkommastelle. Uns liegt auch die Energie pro Spin für das $1/4$ -Plateau des $L_D = 16$ -Systems vor, die $E/N_S = -0.262865$ beträgt. Im Vergleich zum System der Länge $L_D = 8$ ist der Unterschied bereits eine Größenordnung geringer. Wir werden daher die eben genannte Energie pro Spin als Abschätzung der Grundzustandsenergie pro Spin im thermodynamischen Limes $(E/N_S)_{1/4}^{\text{DMRG}} = -0.262865$ nutzen.

Die klassische Energie ist hingegen $(E/N_S)_{1/4}^{\text{klassisch}} = -0.262219$. Damit ergibt sich eine Energiedifferenz zwischen der klassischen Lösung und der DMRG von $\Delta(E/N_S)_{1/4} = (E/N_S)_{1/4}^{\text{klassisch}} - (E/N_S)_{1/4}^{\text{DMRG}} = 0.000646$. Der Energieunterschied liegt in der vierten Nachkommastelle und ist mindestens eine Dekade größer als die numerischen Ungenauigkeiten. Wir sehen also erneut, neben den augenscheinlichen Unterschieden in den Magnetisierungsprofilen, dass eine Abweichung in der Energie auftritt. Die klassische Struktur kann physikalisch nur relevant sein, wenn Quantenkorrekturen in der klassischen Lösung eine ausreichende Energiereduktion bewirken. Liegt die Energie der klassischen Struktur in einer Abschätzung dann unterhalb der mittels der DMRG bestimmten Energie, hätten wir Hinweise darauf, dass das $1/4$ -Plateau der 4-Bein-Röhre aus der Minimierung der Wechselwirkungen folgt. Die Physik wird dann von klassischen Lösungen mit Quantenfluktuationen erklärt. Andernfalls müssen die Streifen-Struktur, die aus der DMRG folgt, die relevante Lösung auf der 4-Bein-Röhre sein.

Wir überprüfen nun ob Quantenfluktuationen auf der klassischen Lösung für das $1/4$ -Plateau, die Energie hinreichend absenken können. Dabei werden wir die gleiche t^2/U -Rechnung durchführen, die wir bereits beim $1/8$ -Plateau angewendet haben (siehe Kapitel 4.1.3.1 für Details). Hierbei

handelt es sich um eine Rechnung, die nur die führenden Effekte einbezieht und eine perturbativ kontrollierte Abschätzung erlaubt. Wie erwähnt sind die dominanten Wechselwirkungen in der klassischen 1/4-Struktur die Wechselwirkung V_2 und die beiden Wechselwirkungen ${}^{(v)}A_{(2,1)}^{(2,1),(0,0)}$ und ${}^{(v)}A_{(1,2)}^{(1,2),(0,0)}$. Dabei ist der wichtigste korrelierte Hüpfterm für zwei Teilchen, die mit V_2 wechselwirken, $C_1 \approx (1/4) \cdot (J'/J)^2 + \dots$. Die anderen Wechselwirkungen können dominant die korrelierten Hüpfprozesse ${}^{(h)}A_{(2,1)}^{(2,1),(1,1)} = (1/32) \cdot (J'/J)^4 + \dots$ und ${}^{(h)}A_{(2,1)}^{(2,1),(1,0)} = (1/32) \cdot (J'/J)^4 + \dots$ bzw. ${}^{(v)}A_{(1,2)}^{(1,2),(1,1)} = (1/16) \cdot (J'/J)^4 + \dots$ und ${}^{(v)}A_{(1,2)}^{(1,2),(0,1)} = (1/16) \cdot (J'/J)^4 + \dots$ nutzen. Springt ein Teilchen mit dem korrelierten Hüpfterm C_1 , so benötigt der Zwischenzustand die relevante Energie $V_1 = (1/2) \cdot (J'/J) + \dots$. In den Zwischenzuständen der weiteren Prozesse müssen dann die dominanten Wechselwirkungen ${}^{(h)}A_{(1,1)}^{(1,1),(0,0)} = (1/4) \cdot (J'/J)^3 + \dots$ oder ${}^{(v)}A_{(1,1)}^{(1,1),(0,0)} = (1/4) \cdot (J'/J)^3 + \dots$ bedacht werden.

Wir addieren nun die Korrekturen der eben genannten Fluktuationen zusammen

$$\begin{aligned}
\Delta(E_{C_1}/N_S) &= 4 \cdot \frac{\left(\frac{1}{4} \cdot (0.3)^2\right)^2}{-\frac{1}{2} \cdot (0.3)^1} \cdot \frac{1}{48} \approx -3 \cdot 10^{-4} \\
\Delta\left(E_{{}^{(h)}A_{(2,1)}^{(2,1),(1,1)}}/N_S\right) &= 4 \cdot \frac{\left(\frac{1}{32} \cdot (0.3)^6\right)^2}{-\frac{1}{4} \cdot (0.3)^3} \cdot \frac{1}{48} \approx -1 \cdot 10^{-6} \\
\Delta\left(E_{{}^{(h)}A_{(2,1)}^{(2,1),(1,0)}}/N_S\right) &= 8 \cdot \frac{\left(\frac{1}{32} \cdot (0.3)^6\right)^2}{-\frac{1}{4} \cdot (0.3)^3} \cdot \frac{1}{48} \approx -2 \cdot 10^{-6} \\
\Delta\left(E_{{}^{(v)}A_{(1,2)}^{(1,2),(1,1)}}/N_S\right) &= 4 \cdot \frac{\left(\frac{1}{16} \cdot (0.3)^6\right)^2}{-\frac{1}{2} \cdot (0.3)^1} \cdot \frac{1}{48} \approx -1 \cdot 10^{-7} \\
\Delta\left(E_{{}^{(v)}A_{(1,2)}^{(1,2),(0,1)}}/N_S\right) &= 8 \cdot \frac{\left(\frac{1}{16} \cdot (0.3)^6\right)^2}{-\frac{1}{2} \cdot (0.3)^1} \cdot \frac{1}{48} \approx -3 \cdot 10^{-7} \\
\rightarrow \Delta(E_{\text{Total}}/N_S) &\approx \Delta(E_{C_1}/N_S) = -3 \cdot 10^{-4} \quad . \tag{4.2}
\end{aligned}$$

Dabei sehen wir zwei verschiedene Energieskalen. Die Energieabsenkung durch C_1 liegt mit $\Delta(E/N_S) = -3 \cdot 10^{-4}$ in der Größenordnung des Energieunterschiedes, der zwischen der klassischen Lösung und der DMRG vorliegt. Dabei ist der Vorfaktor aber zu klein, um den Energieunterschied $\Delta(E/N_S) \approx -6 \cdot 10^{-4}$ zur DMRG vollständig zu erklären. Die anderen korrelierten Hüpfsterme generieren eine Energieabsenkung, die zwei oder drei Dekaden unter der eben genannten Energieabsenkung liegt. Diese Energieskala ist zu klein um physikalisch relevant zu sein.

Insgesamt führt die Betrachtung der Quantenkorrekturen auf eine interessante Beobachtung. Es gibt im System Fluktuationen, die eine Energieabsenkung in der Größenordnung der Energiedifferenz zwischen Quanten-Lösung der DMRG und dem klassischen Ergebnis zeigen. Wir haben durch die Betrachtung von Quanten-Korrekturen deutliche Hinweise darauf, dass im System semi-klassische Zustände zur Beschreibung des Magnetisierungsprofils bei Dichte 1/4 relevant sein können. Als semi-klassische Zustände versteht man Zustände, die zunächst eine höhere Wechselwirkungsenergie zeigen als die eigentliche klassische Lösung. Quanten-Fluktuationen

führen dann zu einer wesentlichen Energieabsenkung in diesen Zuständen. Sind die Energie-Korrekturen größer als der Unterschied zwischen der semi-klassischen Struktur und der eigentlichen klassischen Lösung, kann sich die semi-klassische Lösung im System als Grundzustand stabilisieren. Dabei handelt es sich um ein quantenmechanisches Phänomen und die reine klassische Näherung kann solche Effekte nicht richtig erfassen.

4.1.4 Zusammenfassung

Wir fassen die Betrachtung der Magnetisierungskurven und der Magnetisierungsprofile für die 4-Bein-Röhre zusammen. Dazu haben wir die klassische Näherung zur Lösung des effektiven Modells der 4-Bein-Röhre genutzt und darüberhinaus die DMRG auf das ursprüngliche Spin-Modell angewendet. In der Magnetisierungskurve der beiden Verfahren sind wir auf die Beobachtung gestoßen, dass ein Plateau der Dichte $1/8$ und $1/4$ im thermodynamischen Limes vorliegen wird.

Wir haben uns daher speziell die Magnetisierungsprofile des $1/8$ und $1/4$ -Plateaus für $J'/J = 0.3$ angesehen. Der Parameter $J'/J = 0.3$ ist durch die Minimierung von numerischen Einflüssen motiviert. Die klassische Lösung des $1/8$ -Plateaus stellt sich als das zweidimensionale $1/9$ -Plateau heraus [87] [90] [81], dass auf die 4-Bein-Röhre gezwängt wird. Mit der DMRG finden wir aber ein noch nicht verstandenes Verhalten, dass signifikant niedriger in der Energie liegt. Eine Diskussion von Quanten-Korrekturen für das $1/8$ -Plateau lässt vermuten, dass die DMRG-Lösung hoch verschränkt ist. Ähnliche Diskrepanzen zeigen sich auch für das $1/4$ -Plateau. Die klassische Lösung findet eine Struktur, die aus der Minimierung der Wechselwirkungen folgt. In der DMRG finden wir anscheinend einen analogen Zustand zu den Streifen-Strukturen, die auch im zweidimensionalen Modell gefunden werden [84] [57] [92]. Wir haben erneut Quanten-Korrekturen der klassischen Lösung betrachtet, ohne eine vollständige Auflösung der Diskrepanzen zu erwirken. Wir haben aber die Möglichkeit erkannt, die Streifen-Struktur der DMRG als möglichen semi-klassischen Zustand im System zu interpretieren. Es sei betont, dass die klassischen Lösungen für beide Dichten eine fundamental andere Physik als die DMRG-Lösung zeigen. Dabei sind die klassischen Lösungen energetisch höher als die DMRG-Lösungen und selbst die relevantesten Quanten-Fluktuationen der klassischen Lösungen belassen die klassischen Lösungen energetisch deutlich höhere als die DMRG-Energien. Wir haben bereits angedeutet, dass der Ursprung in quantenmechanischen Effekten liegen muss, die wir mit der klassischen Lösung nicht beschreiben können.

Im folgenden Kapitel diagonalisieren wir zunächst kleine Cluster analytisch, um die Physik der 4-Bein-Röhre besser zu verstehen. Dabei beschränken wir uns auf das effektive Modell in zweiter Ordnung (beschrieben in Kapitel 3.1.5). Damit lenken wir die Beschreibung der Physik auf das Wesentliche. Quanten-Fluktuationen werden in der 4-Bein-Röhre eine wesentliche Rolle spielen. Dabei wird speziell der korrelierte Hüpfterm C_1 zu Phänomenen führen, die die noch offenen Fragen an die Magnetisierungsprofile der DMRG bei Dichte $1/8$ und $1/4$ erklären können. Konkret werden wir den vermuteten hochverschränkten Zustand bei Dichte $1/8$ bzw. einen semi-klassischen Zustand für Dichte $1/4$ durch diesen korrelierte Hüpfterm stabilisieren.

Wir werden dann mit ED des vollen effektiven Modells auf endlichen Clustern fortfahren. Hier besteht die Idee darin, dass sich durch die Diagonalisierung des effektiven Modells eine Wellenfunktion des Systems im Teilchen-Bild ergibt. Zum einen kann die Wellenfunktion betrachtet werden, um zu bestätigen, dass die Interpretationen der Betrachtung in zweiter Ordnung weiter gültig sind. Des Weiteren kann man die Wellenfunktion nutzen, um ein Magnetisierungsprofil zu bestimmen. Liegt eine qualitative Übereinstimmung der Magnetisierungsprofile aus der DMRG und der Diagonalisierung vor, so muss die perturbative Beschreibung des effektiven Modells die Physik des Systems erklären.

Kapitel 5

Exakte Diagonalisierung der 4-Bein-Röhre

Die Phasendiagramme für die 4-Bein-Röhre der DMRG und der klassischen Näherung des effektiven Modells zeigen übereinstimmend Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$ im thermodynamischen Limes. Die Energie pro Spin E/N_S der DMRG Lösung liegt immer niedriger als die klassische Lösung, selbst wenn man Quantenkorrekturen einbezieht. Zudem zeigt bereits die Betrachtung der Magnetisierungsprofile, dass in beiden Lösungen ein fundamental verschiedenes Verhalten vorliegt. Dabei haben wir mögliche mikroskopische Interpretationen vorgeschlagen, aber die DMRG bietet keine Möglichkeit, diese Vorschläge innerhalb der Methode zu verifizieren. Die Vorschläge liegen außerhalb der Grenzen der klassischen Näherung. Daher wechseln wir in diesem Kapitel zur ED des effektiven Modells, um alle quantenmechanischen Effekte vollständig zu berücksichtigen. Auf diese Weise lässt sich die Frage beantworten, ob die Diskrepanzen tatsächlich von der klassischen Betrachtung herrühren, oder ob die Unterschiede bereits durch das Ableiten des effektiven Modells induziert werden.

Die Analyse der Quantenkorrekturen des klassischen $1/4$ -Plateaus hat erste Hinweise zur Erklärung der DMRG-Lösungen für die Dichte $1/4$ angedeutet. Uns ist in Kapitel 4.1.3.2 ein Fluktuations-Kanal aufgefallen, der innerhalb der Energieskalen des Modells einen großen Energiegewinn ermöglicht. Konkret handelt es sich um den korrelierten Hüpfterm C_1 (siehe Kapitel 3.1.5). Der korrelierte Hüpfterm C_1 induziert Quantenfluktuationen in Teilchen-Belegungen, die über die Wechselwirkung V_2 interagieren. In klassischen Strukturen wird diese Wechselwirkung jedoch vermieden, da die Wechselwirkung schon in dritter Ordnung beginnt. Wir beantworten nun die Frage, ob (klassische) Zustände, die den Energiegewinn dieses Fluktuations-Kanals maximieren (anstatt die Wechselwirkungen zu minimieren), auf einen semi-klassischen Zustand führen, der energetisch in der Größenordnung der DMRG liegt.

Wir werden im Folgenden zeigen, dass der eben genannte Ansatz in der Tat die Erklärung für die noch unbekannte Physik der DMRG-Lösungen für das Plateau der Dichte $1/4$ liefert. Motiviert dadurch werden wir zudem, auf Basis der starken Energiereduktion durch den korrelierten

Hüpfterm C_1 , auf Erklärungen für die Plateaus der Dichte $1/8$ und ein mögliches Plateau der Dichte $3/16$ stoßen.

Methodisch werden wir wie folgt vorgehen. In Unterkapitel 5.1.1 betrachten wir die 4-Bein-Systeme $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ und $\mathcal{C}^{4-4,y}$ für die Dichten $1/4$ (Kapitel 5.1.1.1), $1/8$ (Kapitel 5.1.1.2) und $3/16$ (Kapitel 5.1.1.3). Die Systeme sind recht klein und haben nur eine Länge $L_D = 4$. Die Notation für 4-Bein-Röhren-Cluster haben wir in Kapitel 3.1.2 in Formel 3.22 angegeben. Auf diesem System werden wir das effektive Modell in zweiter Ordnung betrachten (siehe Kapitel 3.1.5). Wir werden dann einige a priori Annahmen treffen, um den Hilbertraum stark zu reduzieren und um die wesentliche Physik des effektiven Modells zweiter Ordnung hervorzuheben. Der Hamiltonoperator reduziert sich durch die Betrachtung auf eine Matrix sehr kleiner Dimension, die analytisch diagonalisiert werden kann. Dabei ist es unser Ziel, durch die starke Vereinfachung eine Interpretation der (möglichen) Physik zu erhalten. Ist die Energie der vereinfachten Quanten-Lösung in der Größenordnung der DMRG, so erhalten wir einen ersten Hinweis auf den Ursprung der DMRG-Ergebnisse.

In Kapitel 5.1.1 wird es uns nicht um ein quantitatives, volles Verständnis gehen. Wir überprüfen vielmehr, ob führende Effekte die Energien der DMRG erklären können. Dabei werden wir Bilder der Physik entwickeln, die zunächst verträglich mit der DMRG scheinen. Die Gültigkeit der Interpretation kann nur durch quantitative Übereinstimmungen gezeigt werden. Wir fahren daher in Kapitel 5.1.2 mit der vollen numerischen Diagonalisierung fort, wobei wir in diesem Kapitel die Systeme, die von der DMRG untersucht wurden, erneut betrachten. Wir werden bei der effektiven Beschreibung der Cluster bleiben und die in Kapitel 3.1.4 angesprochene effektive PCUT-Beschreibung von Clustern durchführen. Dabei werden wir überprüfen, ob in der effektiven Beschreibung derselben Systeme, die bereits mit der DMRG betrachtet wurden, auch analoge Magnetisierungsprofile bestimmt werden können. Dabei wird sich zeigen, dass die effektive Beschreibung keine Probleme bereitet und die DMRG-Ergebnisse untermauert. Zudem werden wir Zugriff auf die Wellenfunktion im effektiven Bild erhalten und sehen, dass die wesentliche mikroskopische Modellierung aus der reduzierten Betrachtung aus Kapitel 5.1.1 weiterhin vorliegt. Dies wird zeigen, dass die einfachen Erklärungen und Interpretationen aus Kapitel 5.1.1 die Physik der DMRG-Lösungen erklären.

Zuletzt trennen wir uns von der effektiven Beschreibung von Clustern und betrachten das effektive Modell der 4-Bein-Röhre im thermodynamischen Limes (siehe Kapitel 3.2). Wir werden das effektive Modell auf verschiedenen Clustern in Kapitel 5.2 lösen.

5.1 Diagonalisierung endlicher Cluster

5.1.1 Analytische Diagonalisierung endlicher kleiner Cluster

5.1.1.1 1/4 Plateau

Wir haben bereits motiviert, dass ein Kandidat zur mikroskopischen Erklärung der 1/4-Lösung der DMRG, die semi-klassische Stabilisierung von diagonalen Streifen-Strukturen ist. Die Teilchen liegen jeweils so, dass dominant die Wechselwirkung V_2 wirksam wird, aber gleichzeitig die korrelierten Hüpfsterme C_1 und C_2 wirken können. Wir klären nun, ob die genannte klassische Belegung durch die Fluktuationen mit den korrelierten Hüpfstermen C_1 und C_2 energetisch soweit reduziert wird, dass der Zustand stabilisiert wird.

Das kleinste System, das mit der DMRG behandelt wurde und die mögliche semi-klassische Streifen-Struktur zeigt, ist das Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$. Wir werden im Folgenden zur Betrachtung der Dichte 1/4 jedoch auf das periodische Cluster $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ wechseln. Im periodischen System verläuft die Rechnung näher am thermodynamischen Limes und die führende Physik wird erkennbar, ohne auf störende Randeffekte achten zu müssen. Das System hat die Länge $L_D = 4$ und $N_C = 16$ Dimer-Plätze. Damit die Dichte $n = 1/4$ erreicht wird, müssen $N_{t^+} = 4$ Teilchen im System vorliegen.

Wir arrangieren die vier Teilchen im System zu einem diagonalen Streifen. Der diagonale Streifen ergibt sich, wenn wir die Teilchen sukzessiv mit den Abständen $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ oder $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ positionieren. Unabhängig von der Orientierung der Diagonalen erstreckt sich diese Belegung über das gesamte System, so dass eine Betrachtung der Plätze entlang der genannten Richtung immer von einem Platz mit Teilchen auf einen anderen Platz mit Teilchen führt. Im Cluster $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ ergeben sich damit acht mögliche Streifen-Strukturen. Wir zeigen die acht Streifen bestehend aus Teilchen in Abbildung 5.1. Die dominante Wechselwirkung eines Teilchens des Systems ist die Wechselwirkung V_2 zu einem diagonalen Nachbarn. Die beiden Nachbar-Teilchen im Abstand $\vec{\delta}$ und $-\vec{\delta}$ erlauben die Anwendung von jeweils einem korrelierten Hüpfsterm C_1 für das betrachtete Teilchen.

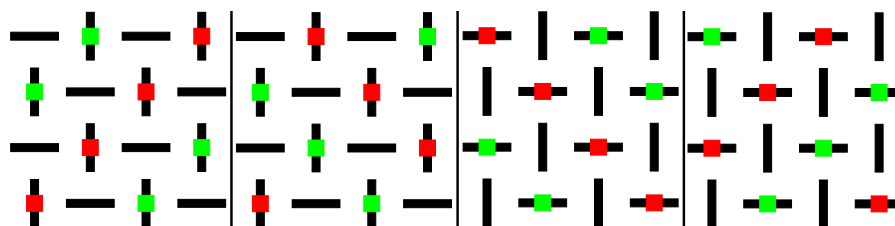


Abbildung 5.1: Wir haben das Cluster $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ mit $N_C = 16$ Dimer-Plätzen durch schwarze Balken viermal dargestellt und zeigen die acht Streifen-Strukturen für die Dichte $n = 1/4$. Dabei haben wir in jedem Bild zwei der acht möglichen klassischen Streifen-Strukturen eingezeichnet. Eine Streifen-Struktur ist jeweils mit vier roten oder vier grünen Quadraten dargestellt, die die vier Teilchen im System symbolisieren.

Betrachten wir die Streifen-Strukturen in Abbildung 5.1, so finden wir jeweils vier Streifen-Strukturen mit Teilchen auf vier vertikalen oder vier horizontalen Dimeren. Erinnern wir uns an das effektive Modell in Ordnung zwei, so sind die korrelierten Hüpfsterme C_1 bis C_4 enthalten. Durch eine iterative Anwendung dieser Prozesse kann man jede Streifen-Struktur in eine andere Streifen-Struktur überführen. Die acht klassischen Zustände sind im Quantenfall daher bereits im effektiven Modell in Ordnung zwei korreliert. Daher ist die Wellenfunktion des Systems eine Überlagerung aller Streifen und kein Produktzustand der semi-klassischen Streifen-Strukturen. Die Anwendung von vier korrelierten Hüpfstermen stellt die kürzeste Überführung einer Streifen-Struktur in eine andere Streifen-Strukturen dar. Dies entspricht einem Prozess in $O((J'/J)^8)$. Im ungünstigsten Fall sind sogar bis zu zwölf Anwendungen von korrelierten Hüpfstermen nötig und die Kopplung der Streifen-Strukturen ist dann proportional zu $O((J'/J)^{24})$. Allgemein sind die Streifen-Strukturen untereinander also schwach gekoppelt. Diese Kopplung ist ein Artefakt der endlichen Systemgröße. Eine Streifen-Struktur im thermodynamischen Limes koppelt gar nicht an andere Streifen-Strukturen des Systems. Daher vernachlässigen wir die Verschränkung der Streifen-Strukturen zunächst und betrachten eine entkoppelte Streifen-Struktur. Wir beschäftigen uns im Folgenden mit den Fluktuationen in einem vertikalen Streifen auf dem Cluster $\mathcal{C}^{4-4,xy}$.

Im effektiven Modell in zweiter Ordnung sind die Kosten für eine Streifen-Struktur Null, da die Wechselwirkung V_2 erst in Ordnung drei beginnt. Betrachten wir eine Streifen-Struktur auf vertikalen Dimeren, kann ein Teilchen am Ort \vec{i} mit dem korrelierten Hüpfsterm C_1 auf den Dimer-Platz darüber (am Ort $\vec{i} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$) oder darunter (am Ort $\vec{i} + \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$) springen. Im Zwischen-Zustand dieses Prozesses wird die Wechselwirkung V_1 wirksam. Wir betrachten erneut nur führende Quanten-Korrekturen und erlauben dem zuvor gehüpften Teilchen nur über den korrelierten Hüpfsterm C_1 auf den ursprünglichen Platz zurückzuspringen. Da wir vier Teilchen im System haben für die wir jeweils zwei unterschiedliche Fluktuations-Prozesse erlauben, ergeben sich acht Zwischenzustände, die die Wechselwirkungskosten V_1 enthalten. Dies ist schematisch in Abbildung 5.2 gezeigt.

Durch die Reduktion auf den wesentlichen Fluktuations-Kanal einer (isolierten) Streifen-Struktur, haben wir den Hilbertraum auf neun relevante Zustände eingegrenzt. Diese beschreiben eine semi-klassische Streifen-Struktur, die durch dominantes korreliertes Hüpfen fluktuieren kann. Damit

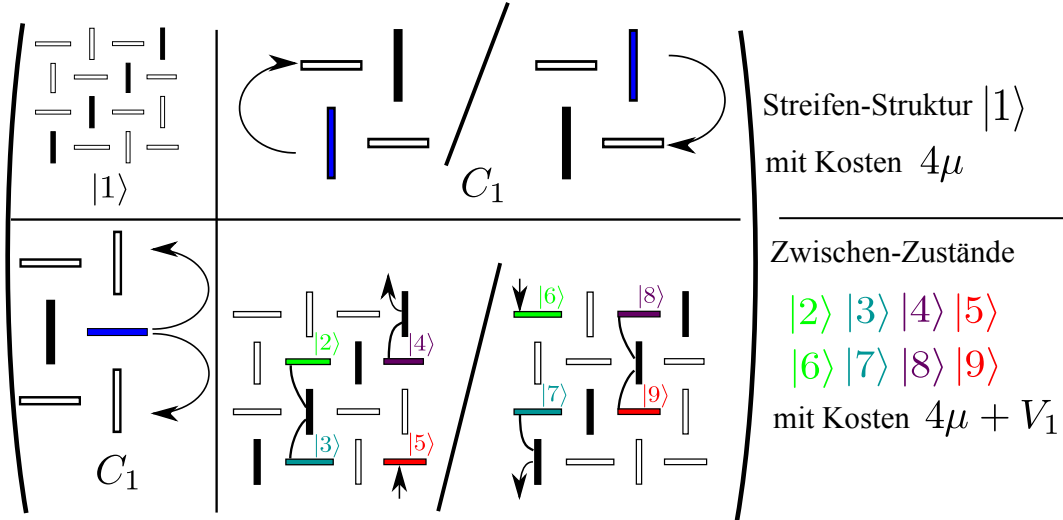


Abbildung 5.2: Symbolische Darstellung des reduzierten effektiven Hamiltonoperators einer entkoppelten Streifen-Struktur bei Dichte $n = 1/4$ auf dem $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ Cluster. Die entsprechende Matrix ist in Gleichung 5.1 gegeben.

lässt sich der Hamiltonoperator des relevanten Unterraums als

$$H = \begin{pmatrix} V_S & +C_1 & +C_1 & +C_1 & +C_1 & +C_1 & +C_1 & +C_1 & +C_1 \\ +C_1 & V_Z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +C_1 & 0 & V_Z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +C_1 & 0 & 0 & V_Z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +C_1 & 0 & 0 & 0 & V_Z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_Z & 0 & 0 & 0 \\ +C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_Z & 0 & 0 \\ +C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_Z & 0 \\ +C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V_Z \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

schreiben (siehe Abbildung 5.2). Im effektiven Modell zweiter Ordnung gilt $C_1 = +(1/4) (J'/J)^2$. Die Wechselwirkungskosten sind entweder $V_S = 4 \cdot \mu = 4 - 4 (J'/J)^2$ für die Streifen-Struktur oder $V_Z = 4 \cdot \mu + V_1 = 4 + (1/2) (J'/J) - (7/2) (J'/J)^2$ für die Zwischen-Zustände (siehe auch Gleichungen 3.52).

Die neun Eigenwerte der Matrix 5.1 sind ¹

$$H_{1,2} = \frac{V_S + V_Z}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(V_S - V_Z)^2 + 32 C_1^2}, \quad H_{3,4,5,6,7} = V_Z, \quad (5.2)$$

wobei der Eigenwert H_2 für alle endlichen Werte von J'/J die Eigenenergie des Grundzustandes darstellt. Dies kann durch eine Entwicklung des Wurzelausdrucks leicht veranschaulicht werden, denn dann schreibt sich der Eigenwert als $H_2 \approx V_Z - 16 C_1^2 / (V_Z - V_S)^2$. Der Eigenvektor \vec{v}_2 zu

¹Eigenwert und Eigenvektoren der Matrix wurden analytisch mit Maple bestimmt

dem Eigenwert H_2 ist

$$\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{8+K^2}} \left(K \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \right)^T \quad \text{mit} \quad (5.3)$$

$$K = -\frac{1}{C_1} \cdot \left(\frac{V_Z - V_S}{2} + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{(V_Z - V_S)^2 + 32 \cdot C_1^2} \right) .$$

Wir setzen nun $J'/J = 0.3$, um die so erlangten Ergebnisse mit der Energie der klassischen Lösung $(E/N_S)_{1/4}^{\text{klassisch}} = -0.26222$ und den DMRG-Energien aus Unterkapitel 4.1.3 zu vergleichen. Die Energie der DMRG liegt für die kleinen Systeme bei

$$(E/N_S)_{1/4}^{\text{DMRG, } 4 \times 4, xy} \Big|_{\frac{J'}{J}=0.3} = -0.26302 \quad (E/N_S)_{1/4}^{\text{DMRG, } 4 \times 4, y} \Big|_{\frac{J'}{J}=0.3} = -0.26273 \quad .$$

Wir kommen nun zum vereinfachten semi-klassischen 1/4-Plateau mit Energie H_2 . Für $J'/J = 0.3$ folgt aus H_2 die Energie pro Spin von $(E/N_S)_{1/4}^{\text{Quanten}} = -0.26184$. Diese erste Abschätzung für die Energie liegt energetisch noch höher als die DMRG-Energien und die klassische Energie. Wir nutzen für die Amplitude des korrelierten Hüpfers C_1 nun die volle Reihe in Ordnung 14 und berechnen V_S und V_Z mit allen Wechselwirkungen des effektiven Modells in maximaler Störungsordnung. Mit dieser Erweiterung liegt die Energie der semi-klassischen Streifen-Struktur in der Größenordnung der DMRG-Ergebnisse

$$(E/N)_{1/4}^{\text{Quanten}} = \frac{H_2^{\text{volle Reihen}} \Big|_{\frac{J'}{J}=0.3}}{32} - \frac{3}{8} = -0.26271 \quad . \quad (5.4)$$

Die vereinfachte Betrachtung zeigt uns, dass die Streifen in der 4-Bein-Röhre stabil sind und durch korreliertes Hüpfen die Energie soweit gesenkt werden kann, dass die (renormierte) Streifen-Struktur günstiger ist, als die klassische Lösung. Wir haben nun den physikalischen Beweis für eine semi-klassische Struktur mit der Dichte 1/4 erbracht, zumindest auf einem kleinen System. Dabei lassen sich die getroffenen Annahmen analog auf größere Systeme verallgemeinern, wobei wir die Betrachtung größerer Systeme auf das folgende Kapitel verschieben.

Wir betrachten den Befund nun mit Hinblick auf das zweidimensionale Modell. Ein großer Teil der theoretischen Arbeiten deutet auf Streifen-Struktur für das 1/4-Plateau hin (siehe Kapitel 1.6). Unser Befund für die 4-Bein-Röhre lässt sich als auf die 4-Bein-Röhre gezwängtes Analogon der 1/4-Streifen-Struktur im zweidimensionalen Modell verstehen. Unsere Rechnung lässt sich auf klassische Streifen im zweidimensionalen Modell übertragen, so dass wir davon ausgehen können, dass es sich bei den 1/4-Plateaus im zweidimensionalen Modell auch um semi-klassische Streifen-Strukturen handelt. Der Mechanismus der Energieabsenkung durch korreliertes Hüpfen mit dem Prozess C_1 tritt allgemein in Streifen-Strukturen auf. Für das zweidimensionale Modell werden weitere Plateaus der Dichte 2/5 und 1/3 vorausgesagt, die ebenfalls Streifen-Strukturen zeigen. In der präsentierten Rechnung geht die Dichte an keiner Stelle direkt ein. Die Dichte spielt nur bei der Annahme eine Rolle, dass die Wechselwirkungen von nebeneinander liegenden Streifen im System schwach sind. Daher muss man im zweidimensionalen Modell den

Fluktuations-Mechanismus auch auf die Streifen-Strukturen größerer Dichten übertragen können. Damit scheint das Auftreten von Streifenbelegungen in anderen Dichten plausibel und kann durch analoge Mechanismen verstanden werden.

5.1.1.2 1/8 Plateau

Mit der DMRG und der klassischen Lösung des effektiven Modells haben wir in der 4-Bein-Röhre ein Plateau der Dichte $1/8$ identifiziert (siehe auch Kapitel 4.1.3.1). Das Magnetisierungsprofil der beiden Lösungen ist fundamental verschieden und die Energie der DMRG-Lösung liegt in einer Energieskala von 10^{-4} niedriger.

Wir haben im vorherigen Kapitel gesehen, dass klassische Strukturen, in denen der Energiegewinn durch die korrelierten Hüpfsterme C_1 oder C_2 maximal genutzt wird, energetisch günstiger sind als klassische Lösungen, die lediglich die Wechselwirkungskosten minimieren. Konkret stabilisiert sich für eine Dichte von $n = 1/4$ eine semi-klassische Streifen-Struktur. Wie bereits diskutiert zeigt die DMRG verschränkte Zustände aus zwei Teilchen auf vertikalen Dimeren im Magnetisierungsprofil (siehe Bild 4.4). Die analoge Energieskala der Energiedifferenz zwischen den Lösungen und die Struktur des DMRG-Magnetisierungsprofils motiviert uns, erneut eine Struktur zu untersuchen, in der der korrelierte Hüpfsterm C_1 genutzt werden kann. Dabei betrachten wir zuerst wieder das effektive Modell in zweiter Ordnung, um die Effekte der führenden Fluktuationen abzuschätzen. Weiter betrachten wir zunächst das $\mathcal{C}^{4-4,y}$ Cluster. Wir werden noch zeigen, dass die hier gewählten offenen Randbedingungen die Rechnung vereinfachen, ohne die physikalischen Aussagen zu beeinflussen.

Wir gehen nun auf die zu den Streifen-Strukturen bei Dichte $1/4$ analogen Strukturen ein, die für die Dichte $1/8$ im Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ relevant sind. Es befinden sich zwei Teilchen im System, die nur wechselwirken, wenn sie direkt nebeneinander (Wechselwirkung V_1) oder parallel nebeneinander liegen (Wechselwirkung V_3). Betrachten wir speziell die Zwischenzustände der korrelierten Hüpfsterme, so nimmt die Positionierung der zwei Teilchen im Abstand $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ eine besondere Rolle ein. Dies ist die einzige Positionierung von zwei Teilchen, die es erlaubt (trotz der wechselwirkungsfreien Kosten 2μ), in zweiter Ordnung korreliert über den Term C_1 zu hüpfen.

Wir hatten bei der Streifen-Struktur für Dichte $1/4$ gesehen, dass mehrere korrelierte Hüpfsterme des effektiven Modells benötigt werden, um die verschiedenen Streifen-Strukturen zu koppeln. Nun betrachten wir den korrelierten Hüpfsterm C_1 für zwei Teilchen auf vertikalen Dimeren, wobei die Teilchen den Abstand $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ haben. Ein Teilchen kann durch zweimalige Anwendung von C_1 um $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 2 \end{pmatrix}$ verschoben werden, so dass beide Teilchen den genannten Abstand $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ haben. Wir interpretieren diesen Punkt als Hinweis darauf, dass der korrelierte Hüpfprozess C_1 zu einer kohärenten Bewegung der zwei Teilchen führt. Wir beschränken uns im Folgenden auf die Bewegung von zwei Teilchen auf vertikalen Dimeren entlang der y-Richtung. Aufgrund der Randbedingungen findet die Bewegung der Teilchen auf vertikalen Dimeren entlang der Richtung

$\vec{\delta} = \binom{0}{\pm 2}$ ungehindert statt. Dies gibt in Bezug auf das DMRG-Ergebnis für das offene Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ einen ersten Erklärungs-Ansatz für den vermuteten verschränkten Zustand.

Wir betrachten daher die Zustände zweier Teilchen im Abstand $\vec{\delta} = \binom{1}{1}$ im Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$. Da das chemische Potenzial eines vertikalen Platzes am Rand eines offenen Systems erhöht ist, beschränken wir uns auf die Platzierungen in den beiden mittleren Spalten des Clusters. Die vier Zwei-Teilchen-Belegungen, die nun in Frage kommen, sind in Abbildung 5.3 oben links dargestellt. Hier zeigen wir die beiden mittleren Spalten des Systems und haben belegte Plätze farblich markiert. Die Zustände sind nummeriert und die Farbe des Zustandes entspricht der Einfärbung der Dimere, die zu den belegten Plätzen des Zustandes korrespondieren. Die vier Zustände können über den korrelierten Hüpfterm C_1 in einen von vier Zwischen-Zuständen springen (siehe Abbildung 5.3), was zu den Kosten $V_Z = 2\mu + V_1$ führt. Hier ist jeweils auf die Vorzeichen des korrelierten Hüpfterms zu achten (siehe auch kapitel 3.1.5). Mit einem weiteren korrelierten Hüpfterm C_1 kann aus dem Zwischenzustand zurück in die ursprüngliche Position oder in eine andere Streifen-Struktur gesprungen werden. Wir reduzieren den Hilbertraum auf diese acht Zustände, da diese Zustände die führenden Fluktuationen für zwei Teilchen in einer 4-Bein-Röhre beinhalten.

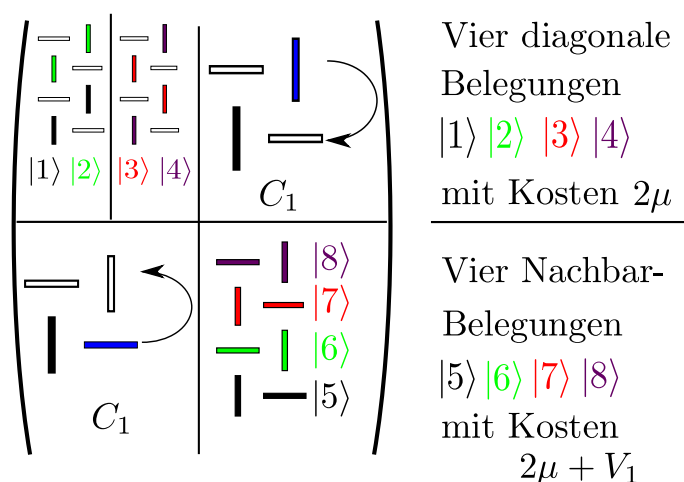


Abbildung 5.3: Symbolische Darstellung des relevanten Unterraums des effektiven Hamiltonoperators für zwei Teilchen auf dem $\mathcal{C}^{4-4,y}$ Cluster. Um Randeffekte zu vermeiden, betrachten wir Teilchen, die sich in der zweiten und dritten Spalte des Clusters befinden. Um den Energiegewinn durch den führenden Fluktuations-Kanal C_1 auf das Wesentliche zu beschränken, sind acht Zustände nötig. Das Bild stellt die Matrix 5.5 symbolisch dar.

Wir nutzen die in Bild 5.3 definierte Nummerierung der acht Zustände. Die Kosten für eine diagonale Belegung betragen $V_S = 2\mu$ und die Kosten für einen Zwischen-Zustand ergeben sich

zu $V_Z = 2\mu + V_1$. Der Hamiltonoperator in diesem Unterraum ist gegeben als

$$H = \begin{pmatrix} V_S & 0 & 0 & 0 & +C_1 & +C_1 & 0 & 0 \\ 0 & V_S & 0 & 0 & 0 & 0 & +C_1 & +C_1 \\ 0 & 0 & V_S & 0 & 0 & -C_1 & -C_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_S & -C_1 & 0 & 0 & -C_1 \\ +C_1 & 0 & 0 & -C_1 & V_Z & 0 & 0 & 0 \\ +C_1 & 0 & -C_1 & 0 & 0 & V_Z & 0 & 0 \\ 0 & +C_1 & -C_1 & 0 & 0 & 0 & V_Z & 0 \\ 0 & +C_1 & 0 & -C_1 & 0 & 0 & 0 & V_Z \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Die Eigenwerte dieser Matrix sind H_1 bis H_8 mit ²

$$\begin{aligned} H_1 &= V_S, \quad H_2 = V_Z \\ H_{3,4}^{(+)} &= H_{5,6}^{(-)} = \frac{V_S + V_Z}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(V_Z - V_S)^2 + 8C_1^2} \\ H_7^{(+)} &= H_8^{(-)} = \frac{V_S + V_Z}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(V_Z - V_S)^2 + 16C_1^2}. \end{aligned}$$

Dabei ist der Eigenwert $H_8 = \frac{V_S + V_Z}{2} - \frac{1}{2} \cdot \sqrt{(V_S - V_Z)^2 + 16 \cdot C_1^2}$ mit dem Eigenvektor \vec{v}_8

$$\begin{aligned} \vec{v}_8 &= \frac{1}{\sqrt{4 + 4 \cdot K^2}} \left(1 \quad 1 \quad -1 \quad -1 \quad K \quad K \quad K \quad K \right)^T \quad \text{mit} \quad (5.6) \\ K &= -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{C_1} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot (V_S - V_Z) + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{(V_S - V_Z)^2 + 16 \cdot C_1^2} \right) \end{aligned}$$

der Grundzustand des Systems für alle endlichen Werte von J'/J . Dies kann man erkennen, wenn man den Wurzelausdruck entwickelt ($\sqrt{1+x} \approx 1 + x/2$)

$$\begin{aligned} H_8 &= \frac{V_S + V_Z}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(V_Z - V_S)^2 + 16C^2} = \frac{V_S + V_Z}{2} - \frac{1}{2} (V_Z - V_S) \sqrt{1 + \left(\frac{4C}{(V_Z - V_S)} \right)^2} \\ &= \frac{V_S + V_Z}{2} - \frac{1}{2} (V_Z - V_S) \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{4C}{(V_Z - V_S)} \right)^2 \right) \\ &= V_S - \frac{1}{2} \frac{16 C^2}{V_Z - V_S} < V_S, \quad H_5, \quad H_6. \quad (5.7) \end{aligned}$$

Das Ergebnis ist kleiner als die Einträge der Diagonalen der Matrix (die Eigenwerte H_1 und H_2). Darüberhinaus ist der Vorfaktor vor der Amplitude des korrelierten Hüpfterms C_1 in der Wurzel größer, als bei den Eigenwerten H_5 und H_6 , so dass der Eigenwert H_8 energetisch niedriger liegt.

Betrachten wir den Eigenvektor v_8 , so liegt ein stark verschränkter Quanten-Grundzustand vor. Die vier Niederenergie-Zustände überlagern zu einem kohärenten Zustand entlang der y-Richtung, so dass ein gebundener Zwei-Teilchen-Zustand vorliegt. Dieser rudimentäre Ansatz kann die relevante Physik nur beschreiben, wenn die Energie dieses Zustandes in der Größenordnung der DMRG-Energie liegt. Wir betrachten daher die entsprechenden Energien für

²Eigenwert und Eigenvektoren wurden exakt mit Maple bestimmt

$J'/J = 0.3$. Das klassische Ergebnis mit Energie $(E/N_S)_{1/8}^{\text{klassisch}} = -0.31901$ ist in Bild 4.3 präsentiert. Die Energie der DMRG auf dem Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ ist zudem gegeben als

$$(E/N)_{1/8}^{\text{DMRG}} \Big|_{J'/J=0.3} = -0.31924 \quad . \quad (5.8)$$

Wir betrachten nun die Grundzustandsenergie unseres Ansatzes. Wir setzen für die Amplituden μ , V_1 , V_2 und C_1 die vollen Reihen des effektiven Modells ein. Auf diesem Weg werten wir die Grundzustandsenergie H_8 für $J'/J = 0.3$ aus und wir sehen, dass der verschränkte Zustand genau in der Größenordnung der DMRG liegt

$$(E/N)_{1/8}^{\text{Quanten}} \Big|_{\frac{J'}{J}=0.3} = \frac{H_8^{\text{volle Reihen}} \Big|_{\frac{J'}{J}}}{32} - \frac{3}{8} = -0.31921 \quad . \quad (5.9)$$

Die Übereinstimmung der Energie aus diesem stark vereinfachten Modell ist sehr gut. Damit ist nun die Annahme, dass ein verschränkter Zwei-Teilchen-Zustand im DMRG-Ergebnis vorliegt, sehr plausibel.

Die präsentierte Rechnung liefert noch keine quantitativen Aussagen zur Interpretation des 1/8-Plateaus der 4-Bein-Röhre. Wir werden aber sehen, dass auf größeren Systemen die Abstände zwischen zwei gebundenen Zuständen groß sind, so dass diese kaum wechselwirken und die hier gezeigte Rechnung ist bereits geeignet, quantitative Aussagen zum thermodynamischen Limes zu treffen. Allgemein können also verschränkte Zustände auf der 4-Bein-Röhre konstruiert werden, die energetisch niedriger sind als die klassischen Ergebnisse.

5.1.1.3 3/16 Plateau

Wir verallgemeinern die Ideen der vorherigen Kapitel nun auf ein Plateau der Dichte 3/16. Die Dichten 1/8 und 1/4 ergeben sich, wenn wir in den betrachteten Clustern $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ oder $\mathcal{C}^{4-4,y}$ aus $N_C = 16$ Dimer-Plätzen jeweils zwei bzw. vier Teilchen einfügen. Das 3/16-Plateau ergibt sich als Dichte zwischen diesen Werten, wenn wir drei Teilchen im System diskutieren. Dabei konnten wir in den vorherigen Kapiteln die dominante Physik mit der diagonalen Belegung zu Streifen-Strukturen und Fluktuations-Prozesse mit dem korrelierten Hüpfterm C_1 sehr konsistent beschrieben. Wir analysieren nun, wie es sich im Dichte-Regime zwischen diesen Lösungen mit der genannten, führenden Physik verhält.

Dominiert der korrelierte Hüpfterm C_1 auch für die Dichte 3/16 die Physik, so liegt der interessante Fall vor, dass der führende Fluktuations-Kanal die Physik der 4-Bein-Röhre vermutlich im gesamten Bereich zwischen Dichte 1/8 und 1/4 bestimmt. Dies wäre auch eine vielversprechende Analogie zum zweidimensionalen Modell. Hier deuten neuste Erkenntnisse darauf hin, dass die Lokalisierung gebundener Zustände die gesamte Physik im Bereich niedriger Dichte erklären [92]. Die gebundenen Zustände des zweidimensionalen Systems sind wahrscheinlich physikalisch analog zu dem gebundenen Zustand aus zwei Teilchen für Dichte 1/8 aus Kapitel 5.1.1.2. Darüberhinaus sind die gebundenen Zustände im zweidimensionalen Fall auch mit

den Streifen-Strukturen im Regime mittlerer Dichte kompatibel. Damit scheint die Physik des zweidimensionalen Modells vollständig auf die von uns zuvor präsentierten, rudimentären Prozesse zurückzuführen zu sein.

Wir betrachten wieder nur die führenden Prozesse des effektiven Modells in zweiter Ordnung. Ausgehend von den Überlegungen der Vorkapitel, scheint es ein sinnvoller Ansatz zu sein, eine Streifen-Struktur aus drei Teilchen zu betrachten. Dieser Zustand unterliegt im effektiven Modell zweiter Ordnung erneut keinen Wechselwirkungen, kann aber mehrfach korrelierte Hüpfsterme C_1 nutzen, um die Energie zu minimieren. Hier sind die dominanten Kopplungen der verschiedenen Streifen-Strukturen untereinander nicht direkt ersichtlich. Für die Dichte $1/4$ sind die Fluktuationen einer Streifen-Struktur stark genug um einen semi-klassischen Zustand zu stabilisieren. Die Kopplungen verschiedener Streifen-Strukturen ist nicht dominant. Für Dichte $1/8$ ist hingegen die starke Verschränkung verschiedener Streifen-Strukturen der führende physikalische Effekt. Wir betrachten dies nun für die Dichte $3/16$. Zunächst haben wir im periodischen Cluster $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ insgesamt 32 mögliche Streifen-Strukturen aus drei Teilchen. Dabei liegen in 16 Streifen-Strukturen die drei Teilchen auf vertikalen Dimeren und in 16 Streifen-Strukturen liegen die drei Teilchen auf horizontalen Dimeren.

Wir zeigen in Bild 5.4 die 16 Streifen-Strukturen mit belegten vertikalen Dimeren. Wir beschränken uns im Folgenden auf diese Zustände, da diese in sehr guter Näherung von den anderen 16 Streifen-Strukturen entkoppelt sind. Erst eine Anwendung von (mindestens) fünf korrelierten Hüpfstermen des effektiven Modells in Ordnung zwei koppelt die Streifen-Strukturen mit Teilchen auf vertikalen und horizontalen Dimeren. Dabei sind die nötigen Zwischen-Zustände energetisch sehr kostspielig, da mehrfach die Wechselwirkung V_1 bezahlt wird. Wir werden im Folgenden die 16 Streifen-Strukturen weiter voneinander entkoppeln, um die führenden Effekte erneut auf einen sehr kleinen Hilbertraum einzuschränken.

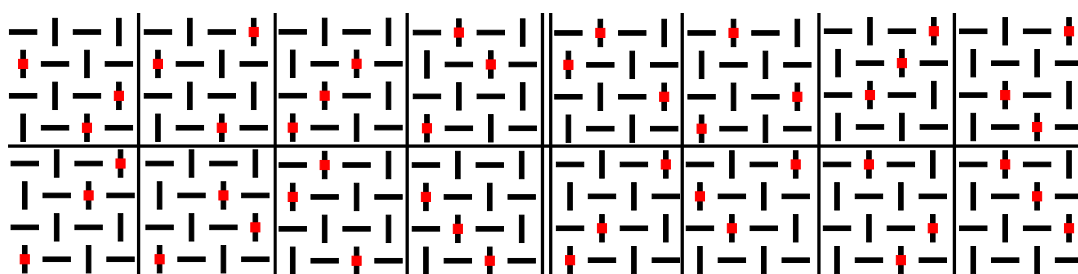


Abbildung 5.4: Wir zeigen die Streifen-Strukturen aus drei Teilchen auf vertikalen Dimeren im periodischen $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ Cluster. Dabei haben wir das System und die Teilchen auf die bekannte Weise dargestellt. Wir haben eine Trennlinie zwischen die 16 Zustände eingefügt, da diese Zustände im effektiven Modell in Ordnung zwei (fast) entkoppelt sind. Das Teilchen in der Mitte einer Streifen-Struktur ist recht mobil und die Verschiebung eines Teilchens am Ende einer Streifen-Struktur in x-Richtung benötigt mehrere Prozesse, was diese Trennung motiviert. Innerhalb einer Klasse von Streifen-Strukturen, kann durch zweimalige Nutzung des korrelierten Hüpfsterms C_1 oder der Abfolge der drei korrelierten Hüpfsterme C_1 , C_3 und C_1 eine Kopplung der Streifen entlang der gleichen Orientierung $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ oder $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ erreicht werden. Die Kopplung der Streifen-Strukturen verschiedener Orientierung derselben Klasse gelingt nur durch eine komplexere Abfolge von korrelierten Hüpfstermen, mit recht kostspieligen Zwischen-Zuständen.

In Bild 5.4 haben wir zwischen die 16 Zustände eine Trennlinie eingeführt, die die Streifen-Strukturen auf vertikalen Dimeren in zwei Klassen mit je acht Streifen-Strukturen aufteilt. Betrachten wir das effektive Modell in zweiter Ordnung genauer, so sieht man, dass die linke Klasse von Streifen-Strukturen und die rechte Klasse von Streifen-Strukturen in guter Näherung entkoppelt sind. Es gibt Abfolgen der korrelierten Hüpfterme C_1 bis C_4 , die eine Streifen-Struktur aus der linken Klasse an eine Streifen-Struktur der rechten Klasse koppeln, wobei mindestens acht Prozesse nötig sind. Zudem treten Zwischen-Zustände auf, die mehrfach die Wechselwirkungen V_1 und V_3 enthalten. Wir entkoppeln die beiden Klassen daher und reduzieren den relevanten Hilbertraum auf acht Streifen-Strukturen. Zum Vergleich sei angemerkt, dass innerhalb einer Klasse die Abfolge von korrelierten Hüpftermen C_1 und C_1 sowie C_1 , C_3 und C_1 zu einer Kopplung der Streifen-Strukturen des Clusters führt. In den Zwischen-Zustände wird nur eine der kostspieligen Wechselwirkungen V_1 wirksam. Wir haben in Abbildung 5.5 im oberen Teil des Bildes Beispiele für die eben genannten dominanten Prozesse dargestellt.

Wir beschreiben das System wieder nur durch die relevantesten Prozesse und dazu haben wir eine Ansammlung an möglichen Prozessen in Abbildung 5.5 gegeben. Allgemein bringen die eben genannten Fluktuations-Prozesse, die innerhalb von drei Anwendungen eine Streifen-Struktur einer Klasse mit gleicher Orientierung aus Abbildung 5.4 in eine andere (oder dieselbe) Streifen-Struktur derselben Klasse und Orientierung überführt, den höchsten Energiegewinn. Hier liegt also ein analoger Fall vor wie beim Plateau der Dichte $1/8$, wo durch wenige korrelierte Hüpfterme eine starke Kopplung der Streifen-Strukturen erreicht wird. Dies ist in der Abfolge der Prozesse dargestellt, die wir im oberen Teil von Abbildung 5.5 zeigen. Dabei sei angemerkt, dass die korrelierten Hüpfterme jeweils das Teilchen betreffen, das ursprünglich in der Mitte des Streifens liegt. Dadurch werden aber nur Streifen-Strukturen gekoppelt, die dieselbe Orientierung zwischen $\delta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ oder $\delta = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ haben.

Es existieren, wie im unteren Teil der Abbildung 5.5 angedeutet, noch viele weitere Möglichkeiten für Fluktuations-Prozesse durch die korrelierten Hüpfterme C_1 bis C_4 . So können z. B. die Teilchen bewegt werden, die sich am Ende einer ursprünglichen Streifen-Struktur befinden. Verfolgen wir diesen Fluktuations-Kanal weiter, so können Streifen-Strukturen einer Klasse mit den verschiedenen Orientierungen $\delta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $\delta = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ gekoppelt werden. Dazu sind vier korrelierte Hüpfterme C_1 nötig und kostspielige Zwischen-Zustände. Anders als beim $1/8$ -Plateau liegen viele Kopplungen der Streifen-Strukturen untereinander energetisch in verschiedenen Energieskalen und nur die Kopplung von vier der eigentlich 16 Streifen-Strukturen auf vertikalen Dimeren ist energetisch günstig. Die genannten vier Streifen-Strukturen sind durch die Fluktuation des mittleren Teilchens gekoppelt. Die Teilchen am Ende der Struktur sind ortsfest, was in Analogie zum $1/4$ -Plateau steht. Hier fluktuiert eine ortsfeste Streifen-Struktur. Zusammengefasst werden wir den Ansatz verfolgen, das $3/16$ Plateau als Hybriden der Erklärungen für das Plateau der Dichte $1/8$ und $1/4$ zu beschreiben.

Wir beschränken uns auf die genannten Fluktuations-Kanäle und vier Streifen-Strukturen einer Klasse werden miteinander gekoppelt. Die vier Streifen-Strukturen stellen den minimalen Satz von nötigen Streifen-Strukturen dar, um die dominanten Fluktuations-Prozesse im effektiven

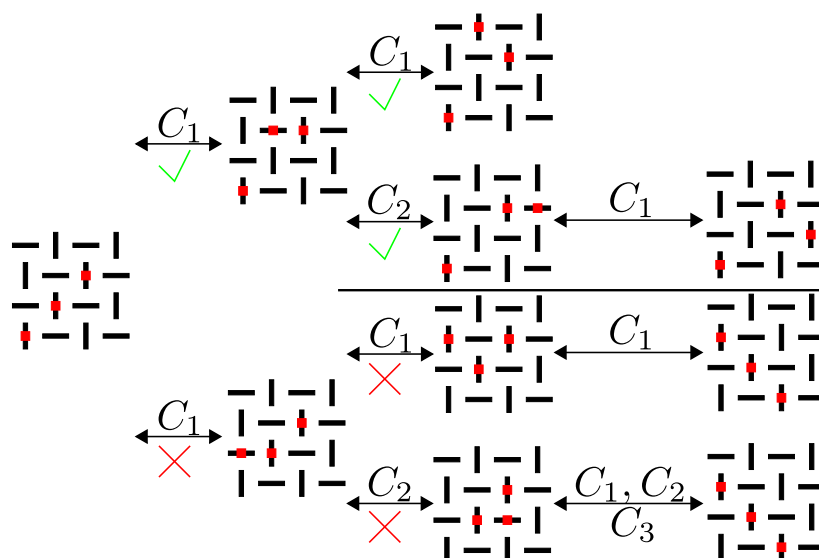


Abbildung 5.5: Wir geben einige Beispiele für mögliche Fluktuations-Prozesse einer Streifen-Struktur auf vertikalen Dimeren an. Im oberen Teil sind die Prozesse gezeigt, die die Streifen-Strukturen einer Klasse und derselben Orientierung koppeln. Im unteren Teil haben wir Beispiele für weitere Fluktuations-Prozesse gegeben. Hier wird eine Kopplung von Streifen-Strukturen nur durch eine große Anzahl von Prozesse erreicht oder es entstehen kostspielige Zwischen- oder End-Zustände, so dass der Energiegewinn dieser Prozesse zunächst vernachlässigt werden kann.

Modell zweiter Ordnung zu beschreiben. Bei der Anwendung des korrelierten Hüpfers C_1 treten vier Zwischen-Zustände auf. In den Zwischen-Zuständen liegen die Teilchen am Ende der ursprünglichen Streifen-Struktur weiterhin im Abstand $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$. Das Teilchen in der Mitte springt so, dass es als Nächster-Nachbar neben einem anderen Teilchen liegt und erzeugt eine Wechselwirkung V_1 . Insgesamt sieht unser reduziertes Bild einen Hilbertraum der Dimension acht vor.

Wir geben den Hamiltonoperator des reduzierten Hilbertraumes wieder als Matrix an und nummerieren die Zustände so, dass die ersten vier Zustände die vier genannten Streifen-Strukturen auf vertikalen Dimeren sind, die jeweils die Orientierung $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ haben. Die Zwischen-Zustände bekommen die Nummern fünf bis acht.

Das mittlere Teilchen einer Streifen-Struktur kann in zwei mögliche Zwischen-Zustände mit dem korrelierten Hüpfprozess $C_1 = (1/4) (J'/J)^2 + \dots$ springen. Die Zwischenzustände koppeln aufgrund des korrelierten Hüpfprozesses $C_3 = (1/4) (J'/J)^2 + \dots$ noch untereinander. Im effektiven Modell zweiter Ordnung haben die Streifen-Strukturen die Kosten $V_S = 3\mu = 3 - 3(J'/J)^2 + \dots$ und die Zwischenzustände verursachen die Kosten $V_S = 3\mu + V_1 = 3 + (1/2) (J'/J) - (5/2) (J'/J)^2 + \dots$. Der reduzierte Hamiltonoperator der dominanten Fluktuations-Prozesse

schreibt sich dann

$$H = \begin{pmatrix} V_S & 0 & 0 & 0 & +C_1 & +C_1 & 0 & 0 \\ 0 & V_S & 0 & 0 & -C_1 & -C_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_S & 0 & 0 & 0 & +C_1 & +C_1 \\ 0 & 0 & 0 & V_S & 0 & 0 & -C_1 & -C_1 \\ +C_1 & -C_1 & 0 & 0 & V_Z & 0 & C_2 & 0 \\ +C_1 & -C_1 & 0 & 0 & 0 & V_Z & 0 & C_2 \\ 0 & 0 & +C_1 & -C_1 & C_2 & 0 & V_Z & 0 \\ 0 & 0 & +C_1 & -C_1 & 0 & C_2 & 0 & V_Z \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Die Matrix 5.10 hat die folgenden acht Eigenwerte ³:

$$\begin{aligned} H_{1,2} &= V_S \quad , \quad H_{3,4} = V_Z \pm C_2 \\ H_{5,6} &= \frac{V_S + V_Z}{2} + \frac{C_2}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(V_Z - V_S - C_2)^2 + 16C_1^2} \\ H_{7,8} &= \frac{V_S + V_Z}{2} - \frac{C_2}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(V_Z - V_S + C_2)^2 + 16C_1^2} \end{aligned}$$

Der Eigenwert $H_8 = \frac{V_S + V_Z}{2} - \frac{C_2}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(V_Z - V_S + C_2)^2 + 16C_1^2}$ beschreibt den Grundzustand. Dies wird wiederum durch Entwickeln der Wurzel deutlich. Der Eigenvektor \vec{v}_8 zum Eigenwert H_8 ist gegeben als

$$\begin{aligned} \vec{v}_8 &= \frac{1}{2\sqrt{1+K_8^2}} \left(-\frac{K_8}{2} \quad +\frac{K_8}{2} \quad -\frac{K_8}{2} \quad +\frac{K_8}{2} \quad -1 \quad -1 \quad 1 \quad 1 \right)^T \quad \text{mit} \quad (5.11) \\ K_8 &= \frac{V_S - V_Z + C_2}{2 C_1} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(V_Z - V_S + C_2)^2 + 16 C_1^2} \quad . \end{aligned}$$

Wir vergleichen die Energie H_8 unseres vereinfachten Ansatzes nun mit dem klassischen Ergebnis und der DMRG-Lösung, um eine Abschätzung der Energie des Ansatzes zu erhalten. Um eine Abschätzung der klassischen Lösung für ein 3/16-Plateau zu erhalten, haben wir eine klassische Rechnung auf dem $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ -Cluster durchgeführt, ohne die korrelierten Hüpfsterme aus dem effektiven Modell einzubeziehen. Wir sind auf die Lösung mit den folgenden Wechselwirkungen bzw. der folgenden Energie gestoßen

$$\begin{aligned} (E/N_S)_{3/16}^{\text{klassisch}} \Big|_{J'/J=0.3} &= \frac{({}^v)A^{(0,0)} + 2({}^h)A^{(0,0)} + 2({}^h)A_{(2,0)}^{(2,0),(0,0)} + 2({}^v)A_{(1,2)}^{(1,2),(0,0)}}{32} \Big|_{J'/J=0.3} - \frac{3}{8} \\ &= -0.29081 \quad . \quad (5.12) \end{aligned}$$

Wir geben an dieser Stelle die Energie der DMRG-Lösung für ein offenes $\mathcal{C}^{8-4,y}$ Cluster zum

³Eigenwert und Eigenvektoren der Matrix wurden exakt mit Maple bestimmt

Vergleich an. Die Energie pro Spin des DMRG-Resultates für Dichte $3/16$ lässt sich damit abschätzen zu

$$(E/N_S)^{\text{DMRG}} \Big|_{\frac{J'}{J}=0.3} = -0.29115 \quad . \quad (5.13)$$

Man beachte, dass das Quanten-Resultat der DMRG erneut in der Größenordnung 10^{-4} niedriger liegt, als die klassische Lösung. Wir kommen zur Grundzustandsenergie H_8 unseres Ansatzes. Für eine verbesserte Genauigkeit, haben wir für die Kosten der Streifen-Struktur V_S und der Zwischen-Zustände V_Z erneut die vollen Kosten des effektiven Modells in Ordnung 14 verwendet und auch für die korrelierten Hüpfsterme C_1 und C_3 die Amplituden in Ordnung 14 benutzt. Es ergibt sich wieder eine Energie, die niedriger liegt als das klassische Ergebnis und eine gute Übereinstimmung mit der DMRG zeigt:

$$(E/N_S)_{3/16}^{\text{Quanten}} \Big|_{\frac{J'}{J}=0.3} = \frac{H_8^{\text{volle Reihen}} \Big|_{\frac{J'}{J}=0.3}}{32} - \frac{3}{8} = -0.29101 \quad .$$

Wie auch schon für die Dichten $1/8$ und $1/4$ ist die (annähernde) Übereinstimmung der Energie in der relevanten Energieskala von 10^{-4} ein Hinweis dafür, dass unser vereinfachtes Bild der Physik eine korrekte Interpretation der physikalischen Eigenschaften liefert. Die Energie des effektiven Modells wird in einer ED für kleine Systeme zudem qualitativ mit der DMRG übereinstimmen. Die Wellenfunktion des Systems wird unser vereinfachtes Bild bestätigen und wir nehmen vorweg, dass unser vereinfachtes Bild die wesentliche Physik bereits beschreibt.

5.1.2 Numerische Diagonalisierung endlicher Cluster

Im Folgenden wenden wir uns den Ergebnissen der ED zu. Wir betrachten zunächst die Beschreibung kleiner endlicher Systeme in der effektiven Teilchen-Beschreibung der PCUT (siehe auch Kapitel 3.1.4). Ziel wird es sein, durch die effektive Beschreibung derselben Systeme, die wir mit der DMRG berechnet haben, ein Bindeglied zwischen den vereinfachten Interpretationen des vorherigen Unterkapitels und der numerischen Genauigkeit der DMRG herzustellen. Wir liefern den Beweis, dass die Interpretationen der vorherigen Unterkapitel den richtigen Grundzustand des Systems annähern.

Liegt eine quantitative Übereinstimmungen der Grundzustandsenergie und der Magnetisierung zwischen der DMRG und der ED vor, muss die perturbative Beschreibung der Systeme korrekt sein. Dann müssen die Interpretationen der vorherigen Unterkapitel die Physik beschreiben, was wir anhand der Wellenfunktion des Systems zeigen werden, die wir als Ergebnis der ED erhalten. Im folgenden Unterkapitel zeigen wir Ergebnisse der ED für die Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ und $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ bei Dichte $n = 1/8$ und Dichte $n = 1/4$. Wir werden uns wieder auf den numerisch stabilen Störparameter $J'/J = 0.3$ beschränken, um die Konvergenz der DMRG und des effektiven Modells zu gewährleisten.

Die PCUT generiert ein effektives Modell, das teilchenzahlerhaltend ist, unabhängig davon ob wir ein endliches System beschreiben oder den thermodynamischen Limes betrachten. Die Dichte im System ist daher eine Erhaltungsgröße und verschiedene Dichten im System können unabhängig diagonalisiert werden. Wir wählen die Fock-Basis im Kanal maximaler Magnetisierung S^z (siehe auch Kapitel 3.1.4). Die Verteilung von N_{t+} Teilchen auf N_C Gitterplätze spannt den Hilbertraum der Dichte n mit $n = N_{t+}/N_C$ auf. Die Dimension des Hilbertraums ist $N_{\mathcal{M}} = N_C! / (N_{t+}! (N_C - N_{t+})!)$ und die effektive Matrix eines Clusters bei gegebener Dichte \mathcal{M} hat die Dimension $N_{\mathcal{M}} \otimes N_{\mathcal{M}}$. Alle Finite-Size-Effekte des Clusters werden einbezogen. So kann eine direkte Gegenüberstellung der ED mit den DMRG-Ergebnissen durchgeführt werden.

Die Diagonalisierungen der Systeme wird mit der GSL durchgeführt. Die Diagonalisierungsroutine transformiert die symmetrischen, reellen Matrizen \mathcal{M} auf bi-diagonal Gestalt. Anschließend werden die Eigenwerte dieser Matrix bestimmt und die Rechnung liefert alle $N_{\mathcal{M}}$ Eigenwerten und Eigenvektoren von \mathcal{M} . Die Matrix wird während der Rechnung im RAM des Rechners gespeichert. Dadurch stößt man für größere Systeme schnell an die Grenzen der Ressourcen. In Kapitel 5.1.2.2 präsentieren wir daher ein Verfahren, einen reduzierten Hilbertraum zu bestimmen, der die relevante Physik beinhaltet, so dass die effektive Matrix des Unterraumes von unseren Routinen behandelt werden kann. Das Verfahren zur Trunkierung des Hilbertraumes ist der Erzeugung eines Krylov-Unterraumes äquivalent (siehe auch Kapitel B.1.1). Wir werden mit diesem Verfahren, das wir trunkierte effektive Beschreibung nennen, größere Systeme diagonalisieren, die ansonsten über die Kapazität der Ressourcen hinaus gehen. Speziell werden wir so für das Cluster $\mathcal{C}^{8-4,y}$ bei Dichte $n = 1/8$ und für das Cluster $\mathcal{C}^{6-4,y}$ bei Dichte $n = 1/4$ zu quantitativen Ergebnissen kommen.

Als Ergebnis der ED speichern wir die Grundzustandsenergie E/N_S , normiert auf die Anzahl der Spins im System und den dazugehörigen Eigenvektor, der die Wellenfunktion des Systems $|\Phi\rangle$ im effektiven Teilchen-Bild darstellt. Mit der Wellenfunktion $|\Phi\rangle$ in der effektiven Beschreibung und der effektiven Observablen $\mathcal{O}_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ der PCUT können wir die Magnetisierung im ursprünglichen Modell bestimmen. Konkret führen wir die Rücktransformation der Magnetisierung eines endlichen Systems im Zustand $|\Phi\rangle$ über

$$\langle \Phi | \left(S_i^{z,(\beta)} \right)_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} | \Phi \rangle = \langle \Phi | U U^\dagger \left(S_i^{z,(\beta)} \right)_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} U U^\dagger | \Phi \rangle = \langle \Phi_{\text{Spin}} | S_i^{z,(\beta)} | \Phi_{\text{Spin}} \rangle \quad (5.14)$$

durch (siehe auch Kapitel 3.1.3 und 3.1.4).

5.1.2.1 Volle numerische Diagonalisierung endlicher Cluster

In diesem Kapitel präsentieren wir die Resultate der ED für die effektive Beschreibung der Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ und $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ bei Dichte $n = 1/8$ und $n = 1/4$. Die Grundzustandsenergie E/N_S und die z-Komponente der lokalen Magnetisierungen werden den Ergebnissen der DMRG für $J'/J = 0.3$ gegenübergestellt. Für die Dichte $1/4$ gehen wir expliziter auf die Konvergenz der Ergebnisse

hinsichtlich der Ordnung des effektiven Modells ein. Zuletzt diskutieren wir den Überlapp der Ergebnisse mit den Ansätzen des Kapitels 5.1.1.

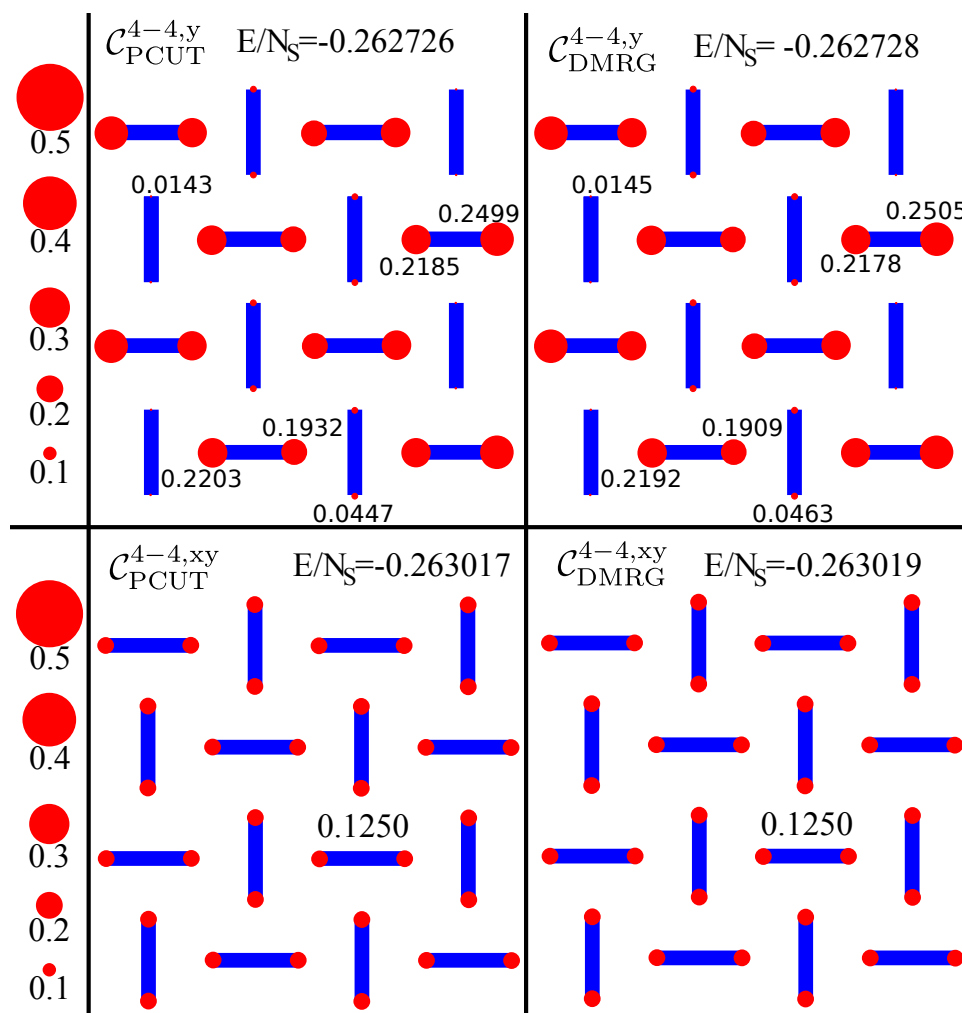


Abbildung 5.6: Gegenüberstellung der Energie und des Magnetisierungsprofils der DMRG und der ED für $J'/J = 0.3$ in den angegebenen Clustern bei Dichte $1/4$. Das Cluster ist durch blaue Balken angedeutet und die z-Komponente der Magnetisierung bestimmt den Durchmesser der roten Kugeln. Dabei zeigen alle Momente die wir für diese Dichte finden in Richtung des externen Feldes.

Das Bild 5.6 zeigt die Gegenüberstellung der Energie und des Magnetisierungsprofils für die eben genannten Cluster für Dichte $n = 1/4$. Die Zahlenwerte in Abbildung 5.6 geben die symmetrisch verschiedenen, lokalen Momente explizit an. Für beide PCUT-Ergebnisse wurde die effektive Matrix \mathcal{M} des Cluster in Ordnung 10 abgeleitet. Die Rücktransformation wurde dann in Ordnung sieben in J'/J durchgeführt. Für die Dichte $n = 1/4$ hat der Hilbertraum für vier Teilchen auf 16 Plätze die Dimension $N_{\mathcal{M}} = 1820$.

Es zeigen sich für beide Systeme allgemein sehr gute Übereinstimmungen der DMRG-Energie $(E/N_S)_{1/4}^{\text{DMRG}}$ mit der Energie der ED $(E/N_S)_{1/4}^{\text{PCUT}}$. Die Energiedifferenz der beiden Lösungen beträgt für beide betrachteten Systeme $\Delta(E/N_S) = (E/N_S)_{1/4}^{\text{PCUT}} - (E/N_S)_{1/4}^{\text{DMRG}} = 2 \cdot 10^{-6}$. Wir erinnern daran, dass diese Größenordnung ebenfalls die Konvergenz-Schranke der DMRG-Ergebnisse darstellt. Wir scheinen, energetisch gesehen, exakt denselben Zustand durch die effektive Beschreibung gefunden zu haben, wie die DMRG. Dies muss noch durch die Betrachtung

Ordnung	E/N	$\Delta(E/N_S)_{1/4}$
4	-0.262945	$+2.2 \cdot 10^{-4}$
6	-0.262667	$-6.1 \cdot 10^{-5}$
8	-0.262744	$-1.6 \cdot 10^{-5}$
10	-0.262726	$+2.0 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 5.1: Konvergenz der Grundzustandsenergie E/N_S im Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ für $J/J = 0.3$ bei einer Dichte von $n = 1/4$. Die erste Spalte zeigt die Ordnung der effektiven Matrix \mathcal{M} . Die zweite und dritte Spalte zeigt die Grundzustandsenergie E/N_S und die Energiedifferenz dieser Energie zum DMRG-Ergebnis $\Delta(E/N_S)_{1/4} = (E/N_S)_{1/4}^{\text{PCUT}} - (E/N_S)_{1/4}^{\text{DMRG}}$. Dieses Beispiel zeigt exemplarisch, dass wir durch die effektive Beschreibung von Clustern in Ordnung 10 für $J'/J = 0.3$ auf eine ausreichende Nachkommastelle konvergiert sind.

des Magnetisierungsprofils verifiziert werden.

Folglich betrachten wir nun die Magnetisierungsprofile der beiden Lösungen. Da sich vier effektive Teilchen im System befinden, addieren sich die lokalen Momente in beiden Lösungen zu vier auf, was leicht zu überprüfen ist. Wir erkennen keine Verletzung dieser Größe, was für die Konvergenz der Methoden spricht. Das periodische System ist homogen magnetisiert mit einem Moment von 0.125 auf jedem Spin. Außerdem finden wir sechs symmetrisch verschiedene lokale Momente im offenen System, die wir in den Bildern jeweils einmalig als Zahlenwert angeben. Die lokalen Momente der beiden Lösungen liegen in derselben Größenordnung, so dass strukturell der identische Zustand in beiden Systemen berechnet wird. Dabei weichen die Zahlenwerte der lokalen Momente in der dritten bis vierten Nachkommastelle ab. Diese Abweichung ist zu gering, um in dem Bild zum Vorschein zu treten. Die DMRG ist konvergiert und wir vermuten, dass es sich bei den Abweichungen um Effekte der endlichen Ordnung der PCUT-Beschreibung handelt.

Die Magnetisierungsprofile des offenen Systems $\mathcal{C}^{4-4,y}$ weisen mit beiden Methoden eine starke Magnetisierung an den horizontalen Dimeren auf. Am Rand des Systems zeigen die Spins der horizontalen Dimere in guter Näherung ein halbes Moment. Die Spins der horizontalen Dimere im Inneren des Systems besitzen typischerweise eine Amplitude zwischen 0.2 bis 0.22, wobei die kleineren Momente weiterhin im Inneren des Systems liegen. Die restliche Magnetisierung findet sich (größtenteils) auf den Spins der vertikalen Dimere im Inneren des Systems. Am Rand des Systems sind die vertikalen Dimere fast unmagnetisch. Betrachten wir nun das periodische System, so liegt in beiden Lösungen auf jedem Spin im System ein Moment 0.125 vor. Wir nehmen vorweg, dass sich die Ergebnisse als Überlagerung der semi-klassischen Streifen-Strukturen aus Unterkapitel 5.1.1.1 verstehen lassen. Dabei überlagern im periodischen System sowohl Streifen-Strukturen auf vertikalen als auch horizontalen Dimeren, was die homogene Magnetisierung erklärt und klarerweise ein Artefakt für die Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre darstellt. Im offenen System überlagern dagegen nur die Streifen-Strukturen auf horizontalen Dimeren. Das chemische Potenzial eines vertikalen Dimers am Rand des offenen Systems ist stark erhöht. Die Überlagerung reduziert sich daher auf die Streifen-Strukturen auf horizontalen Streifen. Die stärkere Magnetisierung am Rand des offenen Systems ist somit ein Randeffect.

Wir gehen für die Dichte $1/4$ und das $\mathcal{C}^{4-4,y}$ Cluster nun expliziter auf die Konvergenz bezüglich der Störungsordnung ein, um ein Gefühl für die Größenordnungen zu bekommen. In Tabelle 5.1 fassen wir die Ergebnisse der Energie für verschiedene Ordnungen im genannten Cluster zusammen. Wir sehen anhand der Energiedifferenzen in der dritten Spalte, dass die Erhöhung der Ordnung zur Konvergenz in Richtung des DMRG-Ergebnisses führt. Die Energiedifferenz der Grundzustandsenergie in Ordnung 10 liegt in der Größenordnung 10^{-6} . Damit erreichen wir mit der effektiven Beschreibung von Clustern in Ordnung 10 die Größenordnung der Konvergenz der DMRG. Dabei liegt die perturbative Rechnung energetisch betrachtet nicht immer oberhalb oder unterhalb der DMRG-Lösung. Wir finden zum Teil in niedrigen Ordnungen Energien, die deutlich niedriger liegen als die Energie der DMRG. Diese Ergebnisse sind einer noch nicht konvergierten, perturbativen Beschreibung des Systems geschuldet.

Die Interpretationen der Grundzustände für die Dichten $1/8$ und $1/4$ beruht auf der Stabilisierung durch dieselben perturbativen Mechanismen, dem dominanten korrelierten Hüpfen C_1 . Höhere Ordnungen erweitern die Beschreibung um Prozesse, die an der führenden Physik nichts ändern. Daher ändert sich die Größenordnung der Konvergenz mit zunehmender Ordnung bei anderen Randbedingungen und Dichten nicht. Wir werden im Folgenden immer Ergebnisse in Ordnung 10 zeigen, die typischerweise ebenfalls bis auf die Größenordnung 10^{-6} konvergiert sind, wie das gegebene Beispiel für die Dichte $1/4$. Für andere Werte von J'/J liegt die Konvergenz zur DMRG in Ordnung 10 in einer anderen Größenordnung und die Ableitung der effektiven Matrix zu noch höherer Ordnung wird gegebenenfalls notwendig.

Wir betrachten nun die Ergebnisse für die Grundzustandsenergie und das Magnetisierungsprofil auf den beiden Clustern bei Dichte $n = 1/8$. In Abbildung 5.7 stellen wir die Energie und das Magnetisierungsprofil für das Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ dar. Die PCUT-Ergebnisse sind erneut durch die effektive Beschreibung in Ordnung 10 berechnet und die Rücktransformation wurde in Ordnung sieben in J'/J durchgeführt. Für die Dichte $n = 1/8$ hat der Hilbertraum für zwei Teilchen auf 16 Plätzen die Dimension $N_{\mathcal{M}} = 120$.

Wir betrachten zuerst die beiden Energien $(E/N_S)^{\text{DMRG}}_{1/8}$ und $(E/N_S)^{\text{PCUT}}_{1/8}$ auf den zwei Systemen $\mathcal{C}^{4-4,y}$ und $\mathcal{C}^{4-4,xy}$. Auf dem periodischen System betragen die Energien $(E/N_S)^{\text{PCUT}}_{1/8} = -0.319265$ und $(E/N_S)^{\text{PCUT}}_{1/8} = -0.319265$. Die Energiedifferenz beträgt konkret $\Delta(E/N_S) = (E/N_S)^{\text{PCUT}}_{1/8} - (E/N_S)^{\text{DMRG}}_{1/8} = 2 \cdot 10^{-6}$ für das offene System und ist in der Größenordnung 10^{-7} für das periodische System. Wir sehen erneut deutliche Hinweise darauf, dass die effektive Beschreibung der Cluster denselben Zustand wie die DMRG bestimmt.

Nun gehen wir auf das Magnetisierungsprofil der DMRG und der ED auf dem Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ ein. Die Dichte von zwei Teilchen im System korrespondiert zu einem totalen Moment in z-Richtung von 2. In der Lösung liegen sechs symmetrisch verschiedene magnetische Momente vor. Zunächst ist die strukturelle Übereinstimmung der beiden Methoden gut zu erkennen. Die Abweichungen der Zahlenwerte belaufen sich erneut auf 10^{-4} . Neben der energetischen Übereinstimmung zeigt das Magnetisierungsprofil nun klar, dass die beiden Methoden erneut dieselben Lösungen stabilisieren.

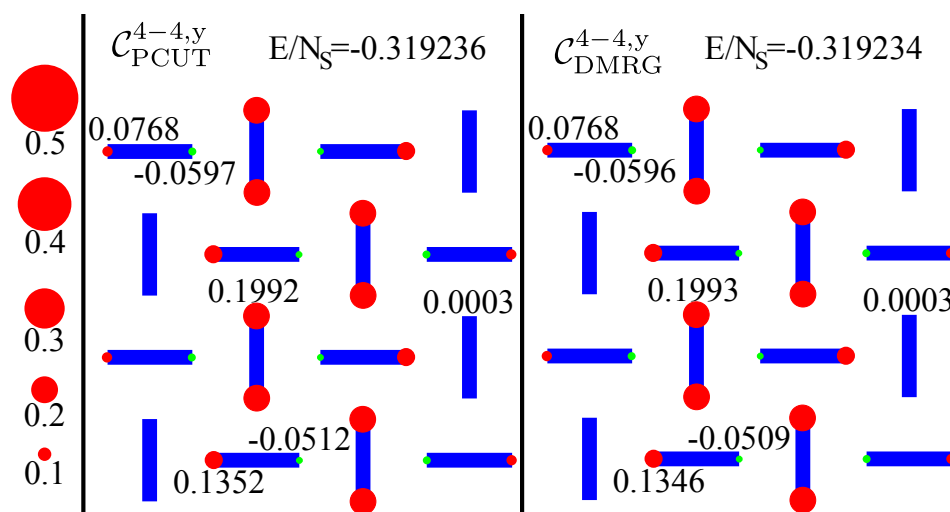


Abbildung 5.7: Gegenüberstellung der Energie und des Magnetisierungsprofils der DMRG und der ED für $J'/J = 0.3$ in den angegebenen Clustern bei Dichte $1/8$. Das Cluster ist durch blaue Balken angedeutet und die z-Komponente der Magnetisierung bestimmt den Durchmesser der roten (grünen) Kugeln, wobei der Spin in (gegen) die Feldrichtung polarisiert ist.

Das Magnetisierungsprofil des offenen Clusters $\mathcal{C}^{4-4,y}$ zeigt die größten Magnetisierungen auf den vertikalen Dimeren im Inneren des Systems, die ein Moment von etwa 0.2 zeigen. Die horizontalen Dimere zeigen das charakteristische Magnetisierungsprofil, das wir von isolierten Triplonen kennen. Dabei besitzt der in Feldrichtung polarisierte Spin auf einem horizontalen Dimer am Rand des Systems ein deutlich kleineres Moment als der entsprechende Spin im Inneren des Systems. Die Spins an horizontalen Dimeren, die gegen die Feldrichtung polarisiert sind, haben am Rand und im Inneren etwa denselben Moment. Die Spins an vertikalen Dimeren am Rand sind unmagnetisch. Das Ergebnis auf dem offenen System deckt sich sehr gut mit der Interpretation des kohärenten Zustandes aus Kapitel 5.1.1.2. Im offenen System liegt der gebundene Zustand aufgrund der Randeffekte im Zentrum des Systems vor.

Wir fassen zusammen, dass wir bisher eine sehr klare Übereinstimmung der Resultate für die Grundzustandsenergie und das Magnetisierungsprofil mit den beiden Methoden sehen. Dabei ist die Übereinstimmung innerhalb der Konvergenz gegeben und wir schlussfolgern, dass wir dieselben Ergebnisse in zwei verschiedenen physikalischen Bildern vorliegen haben. Man beachte, dass wir unsere PCUT-Ergebnisse aus der effektiven Beschreibung der Cluster im Teilchen-Bild berechnet haben. Damit ist nun, zumindest für kleine Systeme, gezeigt, dass die perturbative Beschreibung, die wir auch nutzen, um das effektive Modell im thermodynamischen Limes abzuleiten, gültig ist. Wir werden nun klären, ob die unterschiedlichen Ergebnisse der klassischen Betrachtung aus Kapitel 4 an der nicht-klassischen Natur des Grundzustandes liegen. Dazu werden wir die Grundzustands-Wellenfunktion der ED betrachten. Uns interessiert speziell der Überlapp der Wellenfunktion der ED mit den Wellenfunktionen der Ansätze für das $1/8$ -Plateau (aus Unterkapitel 5.1.1.2) und das $1/4$ -Plateau (aus Unterkapitel 5.1.1.1).

Dazu rekapitulieren wir zuerst die Wellenfunktionen der Interpretationen aus den vorherigen Unterkapiteln. Für das offene System bei Dichte $n = 1/8$ haben wir den Eigenvektor der reduzierten

A_i	$ i\rangle_{1/8}^{\text{Ansatz}}$	A_i	$ i\rangle_{1/8}^{\text{Ansatz}}$	A_i	$ i\rangle_{1/8}^{\text{Ansatz}}$	A_i	$ i\rangle_{1/8}^{\text{Ansatz}}$
0.4803		0.4803		-0.4803		-0.4803	
-0.1389		-0.1389		-0.1389		-0.1389	
A_i	$ i\rangle_{1/4}^{\text{Ansatz}}$	A_i	$ i\rangle_{1/4}^{\text{Ansatz}}$	A_i	$ i\rangle_{1/4}^{\text{Ansatz}}$	A_i	$ i\rangle_{1/4}^{\text{Ansatz}}$
0.9323							
-0.1279		-0.1279		-0.1279		-0.1279	
-0.1279		-0.1279		-0.1279		-0.1279	

Abbildung 5.8: Symbolische Zusammenfassung der Wellenfunktionen der Ansätze aus Kapitel 5.1.1 für $J'/J = 0.3$ als Überlagerung der gezeigten Zustände. Wir zeigen jeweils tabellarisch die Amplitude A_i eines Zustandes $|i\rangle$, der optisch rechts neben der Amplitude gezeigt ist. Das Cluster ist durch schwarze Balken angedeutet und rote Quadrate stellen die Teilchen im System dar. Im oberen Teil ist die Wellenfunktion 5.6 aus Unterkapitel 5.1.1.2 bei Dichte $1/8$ zu sehen. Im unteren Teil ist die Wellenfunktion 5.3 aus Unterkapitel 5.1.1.1 bei Dichte $1/4$ gezeigt. Die Amplituden wurden durch die Nutzung der vollen thermodynamischen Amplituden berechnet.

Rechnung in Gleichung 5.6 angegeben. Die acht Amplituden des Eigenvektors korrespondieren zu den Amplituden der acht Zustände aus Abbildung 5.3. Im Wesentlichen liegen zwei Typen von Zwei-Teilchen-Zuständen vor. Der erste Typ mit Amplitude A_S ist die einfachste Form einer Streifen-Struktur, in der zwei Teilchen im Abstand $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ oder $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ liegen. Der zweite Typ hat die Amplitude A_Z , wobei hier die beiden Teilchen horizontal nebeneinander liegen. Werten wir die beiden Typen in führender Ordnung im effektiven Modell in Ordnung zwei für $J'/J = 0.3$ aus, so hat der erste Typ eine Amplitude von $|A_S| = 0.4884$ und der zweite Typ eine Amplitude von $|A_Z| = 0.1073$. Um die Ergebnisse quantitativ zu verbessern, haben wir in Unterkapitel 5.1.1.2 bereits mehrfach die vollen thermodynamischen Amplituden eingesetzt. Nutzen wir diesen Trick auch hier, so erhalten wir für die Amplituden $|A_S| = 0.4803$ und $|A_Z| = 0.1389$. Wir haben den Zustand mit diesen Amplituden zudem in Tabelle 5.8 oben symbolisch dargestellt.

Nun betrachten wir die rudimentäre Wellenfunktion für das Cluster $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ bei Dichte $n = 1/4$ (siehe Gleichung 5.3). Die Amplituden gehören zu den neun Zuständen, die wir in Abbildung 5.2 angegeben haben. Wie bereits erläutert ist der erste Zustand eine Streifen-Struktur aus vier Teilchen auf vertikalen Dimeren und die Amplitude sei A_S . Die anderen acht Zustände haben die Amplitude A_Z . In diesen Zwischen-Zuständen liegen zwei Teilchen als Nächste-Nachbarn vor. Betrachten wir nur das effektive Modell in zweiter Ordnung findet man $|A_S| = 0.9585$ und $|A_Z| = 0.1008$ für $J'/J = 0.3$. Erweitern wir die Rechnungen nun so, dass wir alle Wechselwirkungen zu hoher Ordnung für beide Typen einsetzen, so erhalten wir eine qualitativ bessere Abschätzung

für den Grundzustand mit $|A_S| = 0.9323$ und $|A_Z| = 0.1279$. Wir zeigen den eben genannten Zustand mit den vollen thermodynamischen Amplituden symbolisch in Tabelle 5.8 unten.

Wir betrachten nun den Überlapp ρ der eben diskutierten Ansätze mit Wellenfunktionen $|\Phi^{\text{Ansatz}}\rangle$ und der Wellenfunktionen aus der ED $|\Phi\rangle$ mit $\rho = \langle \Phi^{\text{Ansatz}} | \Phi \rangle$

$$\begin{aligned}\rho_{1/8}^{4-4,y} &= \langle \phi_{1/8}^{\text{Ansatz},y} | \phi_{1/8}^{4x4,y} \rangle = 0.9226 \\ \rho_{1/8}^{4-4,xy} &= \langle \phi_{1/8}^{\text{Ansatz},xy} | \phi_{1/8}^{4x4,xy} \rangle = 0.9855 \\ \rho_{1/4}^{4-4,y} &= \langle \phi_{1/4}^{\text{Ansatz},x} | \phi_{1/4}^{4x4,y} \rangle = 0.8903 \\ \rho_{1/4}^{4-4,xy} &= \langle \phi_{1/4}^{\text{Ansatz},xy} | \phi_{1/4}^{4x4,xy} \rangle = 0.8850 \quad .\end{aligned}$$

Wir sehen, dass die Zahlenwerte für den Überlapp ρ typischerweise bei 0.9 liegt. Dies deutet dafür hin, dass die zuvor konstruierten Ansätze für den Zustand des Systems maßgeblich die Physik beschreiben. Damit haben wir sehr deutliche Hinweise darauf, dass die DMRG-Lösungen durch unsere, hier erläuterten Ideen und Interpretationen erklärt werden. Die Zustände $|\Phi_{1/8}^{\text{Ansatz},xy}\rangle$, $|\Phi_{1/8}^{\text{Ansatz},xy}\rangle$ und $|\Phi_{1/8}^{\text{Ansatz},xy}\rangle$ sind hier als einfache Überlagerung der Ansätze gegeben, da in einer Diagonalisierung eine Überlagerung der Ansatz-Zustände aufgrund der Cluster-symmetrie vorliegt.

A_i	$ i\rangle_{1/8}^{4x4,y}$	A_i	$ i\rangle_{1/8}^{4x4,y}$	A_i	$ i\rangle_{1/8}^{4x4,y}$	A_i	$ i\rangle_{1/8}^{4x4,y}$
0.4424		0.4424		-0.4424		-0.4424	
0.1710		0.1710		-0.1710		-0.1710	
-0.1308		-0.1308		-0.1308		-0.1308	

Abbildung 5.9: Zusammenfassung der Wellenfunktion der ED des Clusters $\mathcal{C}^{4-4,y}$ bei Dichte $1/8$ für $J'/J = 0.3$. Wir stellen die Wellenfunktion als Überlagerung der relevantesten Zustände $|i\rangle$ mit Amplitude A_i dar. Als relevante Zustände haben wir Zustände mit $|A_i| > 0.1$ dargestellt.

Als nächstes betrachten wir nun die Wellenfunktion der ED. Dazu haben wir die Wellenfunktion des Clusters $\mathcal{C}^{4-4,y}$ für $n = 1/8$ vereinfacht in Tabelle 5.9 dargestellt. Eine analoge Tabelle für $n = 1/4$ und die Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ und $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ zeigen wir in Tabelle 5.10.

Die Zustände mit größtem Gewicht für $n = 1/8$ auf dem Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ sind die vier Streifen-Strukturen aus zwei Teilchen auf vertikalen Dimeren, die im Inneren des Clusters liegen. Die Amplitude dieser Zustände ist mit 0.44 etwas geringer als die Amplitude 0.48 des Ansatzes. Der Zwischen-Zustand unseres Ansatzes (beide Teilchen wechselwirken mit V_1) ist zudem als relevanter Zustand vertreten. Die Amplitude des Zwischen-Zustandes ist mit 0.13 etwa gleich groß wie im Ansatz. In der Diagonalisierung finden wir, dass die Streifen-Strukturen aus zwei Teilchen auf horizontalen Dimeren eine weitere Klasse von relevanten Zuständen darstellen.

A_i	$ i\rangle_{1/4}^{4\times 4,y}$	A_i	$ i\rangle_{1/4}^{4\times 4,y}$	A_i	$ i\rangle_{1/4}^{4\times 4,y}$	A_i	$ i\rangle_{1/4}^{4\times 4,y}$
0.4253		0.4253		0.4253		0.4253	
0.1678		0.1678		0.1678		0.1678	
-0.0693		-0.0693		0.0693		0.0693	
0.0693		0.0693		-0.0693		-0.0693	
-0.0689		-0.0689		0.0689		0.0689	
0.0689		0.0689		-0.0689		-0.0689	
0.0685		0.0685		0.0685		0.0685	
0.0685		0.0685		0.0685		0.0685	
0.0514		0.0514		0.0514		0.0514	
0.0514		0.0514		0.0514		0.0514	
A_i	$ i\rangle_{1/4}^{4\times 4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{1/4}^{4\times 4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{1/4}^{4\times 4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{1/4}^{4\times 4,xy}$
0.2861		0.2861		0.2861		0.2861	
0.2861		0.2861		0.2861		0.2861	
0.0929		0.0929		0.0929		0.0929	
0.0929		0.0929		0.0929		0.0929	
0.0929		0.0929		0.0929		0.0929	
0.0929		0.0929		0.0929		0.0929	

Abbildung 5.10: Zusammenfassung der Wellenfunktionen der ED der Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ und $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ bei Dichte $1/4$ für $J'/J = 0.3$. Wir stellen die Wellenfunktion hier als Überlagerung der relevantesten Zustände $|i\rangle$ mit Amplitude A_i dar. Als relevante Zustände haben wir alle Zustände mit einer Amplitude $A_i > 0.05$ dargestellt.

Diese haben eine Amplitude von etwa 0.17 und sind damit stärker im Zustand vertreten als die von uns eigentlich vorgesehenen Zwischen-Zustände. Die zweite Klasse von Streifen-Strukturen ist über Paar-Fluktuationen an die ursprünglichen Streifen-Strukturen gekoppelt. Neben dem korrelierten Hüpfen mit C_1 scheint die Paar-Fluktuation der beiden Streifen-Strukturen der zweite relevante Stabilisierungs-Mechanismus dieses Zustandes zu sein. Die Energie-Reduktion durch diesen Fluktuations-Prozess scheint größer zu sein als die Energie-Reduktion durch weitere korrelierte Hüpfsterme.

Wir wenden uns nun der Dichte $n = 1/4$ zu und beginnen mit dem offenen Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$. Die relevanteste Klasse von Zuständen sind die Streifen-Strukturen aus vier Teilchen auf horizontalen Dimeren. Die Streifen-Strukturen haben eine Amplitude von 0.44, was etwas geringer ist als die Amplitude von etwa 0.466 aus der symmetrisierten Wellenfunktion des Ansatzes. Betrachten wir den Ansatz weiter, so haben wir Zwischen-Zustände betrachtet, die aus dem korrelierten Hüpfsterm C_1 hervorgehen. Im Ansatz haben wir ein periodisches Cluster gewählt und die Amplitude der Zwischen-Zustände beträgt im symmetrisierten Fall etwa 0.064. Wir finden nun alle Zwischen-Zustände, die durch den offenen Rand im System vorliegen können wieder, wobei durch die Randeffekte verschiedene Amplituden für die Zwischen-Zustände auftreten, die vom Betrag ungefähr zwischen 0.05 bis 0.07 liegen. Analog zum Befund für die Dichte $1/8$ ist die Klasse von Zuständen mit der zweithöchsten Amplitude aber eine Streifen-Struktur, auf die einmal mit dem führenden Paar-Fluktuations-Term gewirkt wurde. Diese Zustände haben ein Gewicht von etwa 0.168. Weiter finden wir acht Zustände, die eine Amplitude von 0.0685 haben. Diese Zustände gehen aus einer Streifen-Struktur hervor, indem man einen korrelierten Hüpfsterm anwendet, der in Ordnung fünf beginnt. Diese Zustände scheinen relativ dominant in der Wellenfunktion, da der Zwischen-Zustand energetisch sehr nahe an dem klassischen Grundzustand liegt.

Betrachten wir zuletzt die Wellenfunktion auf dem periodischen System $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ bei Dichte $1/4$, so sehen wir erneut ein konsistentes Bild. Im periodischen System liegen acht Streifen-Strukturen mit gleicher Amplitude als Zustände mit größtem Gewicht vor. Es folgen die 16 Zwischen-Zustände, die durch die Anwendung der Paar-Fluktuation hervorgehen und die Zwischen-Zustände, die durch das korrelierte Hüpfen C_1 aus den Streifen-Strukturen auftreten.

Wir sehen durch die grobe Betrachtung der Wellenfunktion in beiden Clustern und für beide Dichten, dass wir eine hohe Übereinstimmung mit unseren Ansätzen erkennen. Damit haben wir für kleine Systeme die Physik des Systems geklärt. Im nächsten Unterkapitel werden wir durch ED von größeren Systemen mit der effektiven Beschreibung der PCUT und einem Vergleich mit der DMRG belegen, dass die präsentierten Mechanismen auch auf größeren Systemen gültig bleiben. Die effektive Beschreibung von Clustern muss wieder im Rahmen der Numerik dieselben Ergebnisse wie die DMRG liefern, denn nur in diesem Fall ist die perturbative Beschreibung des Systems korrekt.

5.1.2.2 Trunkierte numerische Diagonalisierung größerer endlicher Systeme

Im vorherigen Unterkapitel 5.1.2.1 haben wir unsere Interpretationen auf kleinen Systemen durch die Verwendung der PCUT in Ordnung 10 zur effektiven Beschreibung von Clustern etabliert. Wir haben jedoch bisher noch keine Hinweise darauf, dass unsere Interpretationen auch für größere Cluster korrekt sind. Wir erinnern daran, dass unser Bild von der Physik des $1/8$ -Plateaus der 4-Bein-Röhre eine Delokalisierung von zwei Teilchen zu einer kohärenten Überlagerung entlang der y -Richtung vorsieht. Das Plateau der Dichte $1/4$ kann mikroskopisch durch eine semi-klassische Streifen-Struktur verstanden werden. Diese Interpretationen konnten wir anhand von Fallbeispielen untermauern. Die DMRG-Ergebnisse deuten zwar an, dass sich unsere Interpretationen kanonisch auf größere Systeme übertragen lassen, aber wir zielen nun auf einen Beweis durch eine effektive Beschreibung von größeren Clustern ab, um unsere Interpretationen endgültig zu bestätigen.

Wie angesprochen kann die Diagonalisierung der effektiven Matrix \mathcal{M} von größeren Clustern erneut als Bindeglied zwischen den numerischen Ergebnissen der DMRG und den Interpretationen in effektiven Bild dienen. Wir können mit unseren Methoden der effektiven Beschreibung von Clustern jedoch nur wenige weitere Fallbeispiele für die Dichte $1/8$ und die Dichte $1/4$ berechnen. In der DMRG ist es wesentlich einfacher, ein größeres, offenes Cluster, wie z. B. $\mathcal{C}^{8-4,y}$ oder $\mathcal{C}^{16-4,y}$, zu diagonalisieren als mit der ED. Wir werden für die Dichte $n = 1/8$ ein System diagonalisieren, in dem zwei gebundene Zustände vorliegen. Zudem werden wir für die Dichte $n = 1/4$ ein System diagonalisieren, in dem eine Streifen-Struktur aus sechs Teilchen vorliegt, d. h. wir betrachten das Cluster $\mathcal{C}^{8-4,y}$ bei $n = 1/8$ und das Cluster $\mathcal{C}^{6-4,y}$ bei $n = 1/4$.

Für die genannten Systeme sind die Dimensionen des Hilbertraums 35.960 für das $\mathcal{C}^{8-4,y}$ Cluster bei Dichte $1/8$ und 134.596 für das $\mathcal{C}^{6-4,y}$ Cluster bei Dichte $1/4$. Eine vollständige Diagonalisierung der effektiven Matrix \mathcal{M} dieser Dimensionen ist aussichtslos, was an zwei Punkten liegt. Die erste Komplikation liegt darin, dass zu jedem Zustand eine PCUT-Rechnung durchgeführt werden müsste, die für eine ausreichende Konvergenz für $J'/J = 0.3$ in Ordnung 10 vorliegen sollte. Bei dieser Anzahl von Zuständen kann die Anzahl von benötigten Rechnungen aber nicht durchgeführt werden. Zudem ist die effektive Matrix \mathcal{M} nicht dünn besetzt. Für die genannten Systeme erhalten wir bei Dichte $1/8$ in Ordnung 10 typischerweise für einen Zustand $|i\rangle$ eine Kopplung zu 300-500 anderen Zuständen. Beim analogen Fall für Dichte $1/4$ finden wir sogar um die 7000 Kopplungen pro Zustand $|i\rangle$. Selbst in dem Fall, dass die Matrixelemente der effektiven Matrix vorliegen, können die Matrizen unmöglich gespeichert werden. Wir werden deswegen die schon etablierten Ansätze der Zustände nutzen, um eine trunkierte Beschreibung zu finden.

Erinnern wir uns an die Wellenfunktionen der ED auf kleinen Systemen, so haben wir die typische exponentielle Hierarchie der Amplituden der Zustände gesehen, die auch in der DMRG genutzt wird. Wir haben die relevanten Zustände gleicher Amplituden zu Klassen zusammengefasst und die Amplituden der Klassen von Zustände liegen in der Wellenfunktion in einer exponentiell verlaufenden Hierarchie vor, so dass meist nur wenige Zustände ausreichen, um den Zustand des

Systems gut zu erklären. Wir werden diesen Befund daher aufgreifen und zielen auf die Bestimmung eines reduzierten Hilbertraumes ab, der möglichst viele derjenigen Zustände enthalten soll, die in der eigentlichen Wellenfunktion des Systems mit hoher Amplitude auftreten. Die ab initio Idee ist, dass eine geeignete trunkierte Basis für die Physik der 4-Bein-Röhre aus dem effektiven Hamiltonoperator und den Streifen-Strukturen aufgebaut werden kann. Durch Anwendung des effektiven Hamiltonoperators $H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ in einer endlichen Ordnung auf eine Streifen-Struktur werden Zustände bestimmt, die in der endlichen Ordnung an die Streifen-Struktur koppeln. Diese Zustände liegen demnach perturbativ nahe an der Streifen-Struktur.

Der ab initio Ansatz sieht daher vor, die Zustände, die perturbativ nahe an den Streifen-Strukturen liegen, als trunkierten Hilbertraum zu nutzen. Wir werden im Folgenden nicht nur die Zustände zulassen, die perturbativ nahe an den Streifen-Strukturen liegen. Wir nehmen auch Zustände auf, die perturbativ nahe an den Zuständen liegen, die durch den korrelierten Hüpfterm C_1 oder den dominanten Paar-Fluktuations-Term aus den Streifen-Strukturen hervorgehen. So erhält man einen trunkierten Hilbertraum auf Basis von Start-Zuständen. Die Wahl der Start-Zustände ist durch das sehr konsistente Bild der relevanten Zustände auf den kleinen Clustern $\mathcal{C}^{4-4,y}$ und $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ motiviert, die wir in den Tabellen 5.10 und 5.11 angegeben haben.

Typischerweise ist die Dimension des trunkierten Hilbertraums nach dem ersten Schritt aber noch zu groß, um mit einer effektiven Beschreibung behandelt werden zu können. Daher haben wir einen zweiten Trunkierungs-Schritt mittels eines Cutoffs χ eingefügt. Wir betrachten nun die neuen Zustände in der trunkierten Basis, die nicht Teil der Start-Zustände sind. Diese Zustände haben die diagonalen Wechselwirkungskosten U_{Neu} und sind mit einer Amplitude t an einen der Start-Zustände gekoppelt, wobei der Start-Zustand die diagonalen Wechselwirkungskosten U_{Start} hat. Wir sind nun an der perturbativen Relevanz der Zustände interessiert. Dafür ist die Größe $t^2/\Delta U$ mit $\Delta U = (U_{\text{Start}} - U_{\text{Neu}})$ ein perturbativ kontrolliertes Maß, denn die Bedingung $t \ll \Delta U$ ist hart erfüllt. Unser Verfahren sieht vor, alle Zustände die $t^2/\Delta U < \chi$ erfüllen, aus dem trunkierten Hilbertraum zu entfernen.

Durch dieses zweistufige Verfahren können wir einen Hilbertraum für die zuvor definierten Systeme bestimmen, bei dem die Dimension nun eine ED erlaubt. Zwischen den Zuständen des trunkierten Hilbertraumes werden alle Matrixelemente bestimmt. Die daraus folgende Matrix \mathcal{M} der effektiven Beschreibung wird mit ED behandelt. Wir haben in dem vorherigen Kapitel gesehen, dass Ordnung 10 typischerweise ausreicht, um konvergente Ergebnisse zu erzielen. Daher ist es sinnvoll, im ersten Schritt alle Zustände, die in Ordnung 10 perturbativ nahe an den Start-Zuständen liegen zu bestimmen. Wir haben dann im zweiten Schritt mit $\chi = 10^{-8}$ für Dichte 1/8 und $\chi = 10^{-6}$ für Dichte 1/4 gearbeitet, um den Hilbertraum auf eine Dimension zu bringen, die wir behandeln können. Die effektive Matrix des trunkierten Hilbertraumes wird dann in Ordnung 10 aufgestellt und gelöst. Wir betonen, dass dieses Verfahren mit einem ab initio Ansatz arbeitet. Die Qualität der Ergebnisse kann nicht auf kontrolliertem Weg überprüft werden. Wir nutzen daher die Lösungen der DMRG, um zu zeigen, dass wir mit diesem Verfahren und dem genannten Ansatz das System quantitativ beschreiben können.

Wir zeigen das Magnetisierungsprofil und die Grundzustandsenergie E/N_S für das Cluster $\mathcal{C}^{6-4,y}$ bei Dichte $1/4$ im oberen Teil von Abbildung 5.11 und im unteren Teil von Abbildung 5.11 sind die genannten Größen für das $\mathcal{C}^{8-4,y}$ Cluster bei Dichte $n = 1/8$ gezeigt.

Wir betrachten zuerst die Energie für $n = 1/4$. Wir finden, wie schon auf den kleinen Systemen, eine sehr gute Übereinstimmung. Die DMRG-Energie beträgt $(E/N_S)_{1/4}^{\text{DMRG}} = -0.262780$. Unser Verfahren führt in Ordnung 10 mit $\chi = 10^{-6}$ auf die Energie $(E/N_S)_{1/4}^{\text{PCUT}} = -0.262776$ und mit $\chi = 10^{-5}$ auf die Energie $(E/N_S)_{1/4}^{\text{PCUT}} = -0.262775$. Wir sehen, dass die Energie der ED als Funktion des numerischen Parameters χ konvergiert ist und die Abweichung der beiden Methoden beträgt $\Delta(E/N_S) = (E/N_S)_{1/4}^{\text{PCUT}} - (E/N_S)_{1/4}^{\text{DMRG}} = 4 \cdot 10^{-6}$.

Analoges sehen wir auch für die Dichte $n = 1/8$. Die Grundzustandsenergie der DMRG-Lösung beträgt $(E/N_S)_{1/8}^{\text{DMRG}} = -0.319239$. Mit der trunktierten effektiven Beschreibung in Ordnung 10 erhalten wir für $\chi = 10^{-8}$ die Energie $(E/N_S)_{1/8}^{\text{PCUT}} = -0.319237$ und mit $\chi = 10^{-7}$ bestimmen wir die Energie zu $(E/N_S)_{1/8}^{\text{PCUT}} = -0.319236$. Wir sehen erneut, dass die Energie $(E/N_S)_{1/8}^{\text{PCUT}}$ bezüglich des Cutoffs χ konvergiert ist und im numerischen Rahmen wieder identisch mit der DMRG-Energie liegt, wobei die Energiedifferenz hier $\Delta(E/N_S) = (E/N_S)_{1/8}^{\text{PCUT}} - (E/N_S)_{1/8}^{\text{DMRG}} = 2 \cdot 10^{-6}$ beträgt. Zusammenfassend deuten die Energien erneut darauf hin, dass die (reduzierte) effektive Beschreibung denselben Zustand findet wie die DMRG, was nun durch das Magnetisierungsprofil bestätigt wird.

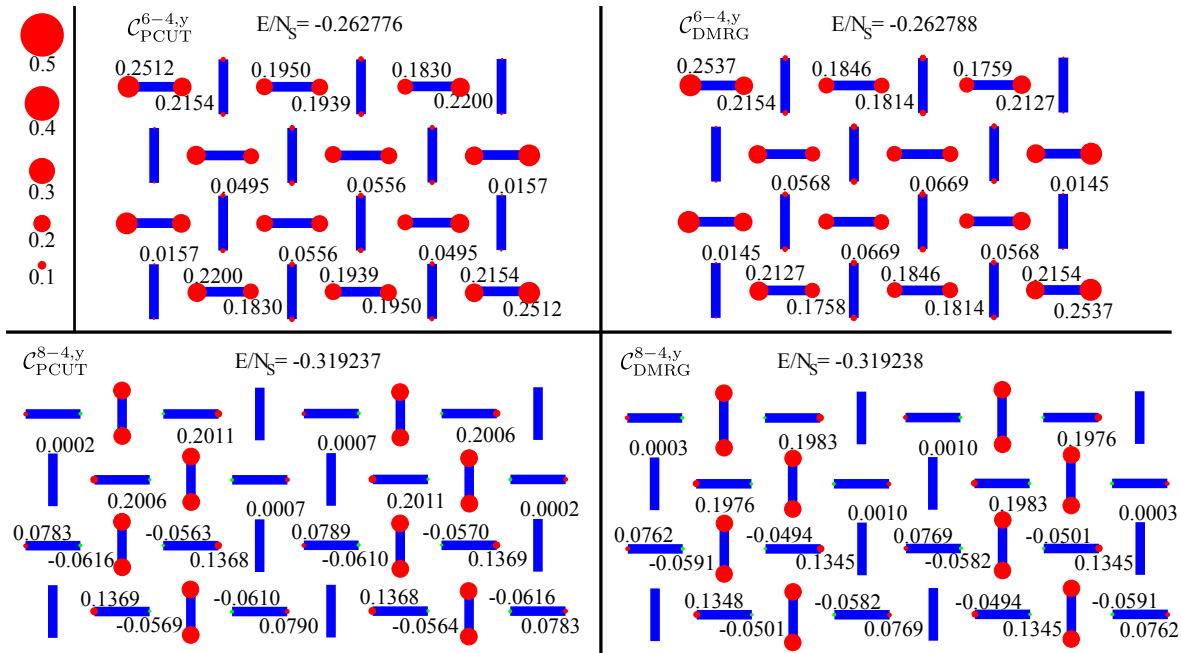


Abbildung 5.11: Gegenüberstellung der Energie und des Magnetisierungsprofils der DMRG (rechts) und der ED des trunktierten effektiven Hilbertraumes (links) für $J'/J = 0.3$ in den angegebenen Clustern bei Dichte $1/4$ (obere Bilder) und $1/8$ (untere Bilder). Das Cluster ist durch blaue Balken angedeutet und die z-Komponente der Magnetisierung bestimmt den Durchmesser der roten (grünen) Kugeln, die für Momente in (gegen) die Feldrichtung stehen und den angegebenen Zahlenwerten entsprechen.

Wir betrachten nun die Magnetisierungsprofile für $n = 1/4$. Wir haben die Rücktransformation der Wellenfunktion der effektiven Beschreibung aufgrund der großen Dimension des Hilbertraumes nur in Ordnung drei in J'/J durchgeführt. Trotzdem sehen wir eine quantitative Übereinstimmung der Ergebnisse. Mit beiden Methoden finden wir ein äquivalentes Magnetisierungsprofil. Dabei weichen die Zahlenwerte in der dritten Nachkommastelle ab, was zu kleinen aber erkennbaren Abweichungen führt. Dies ist aber eine Konsequenz der Rücktransformation in geringer Ordnung und die Übereinstimmungen sind im Rahmen der Numerik sehr gut. Die Summe der lokalen Momente muss für sechs Teilchen in einem System aus $N_C = 24$ Plätzen sechs sein und diese Symmetrie ist in beiden Lösungen nicht verletzt. Wir sehen, dass die wesentliche Magnetisierung auf den Spins der horizontalen Dimere liegt. Die Spins an vertikalen Dimeren sind nur leicht, aber erkennbar magnetisiert. Das Magnetisierungsprofil ist analog zu dem Magnetisierungsprofil im $\mathcal{C}^{4-4,y}$ Cluster bei Dichte $1/4$. Die Wellenfunktion zeigt erneut dominante Amplituden bei den erwarteten Zuständen. Dies ist ein klarer Beweis dafür, dass die Überlagerung der semi-klassischen Streifen-Strukturen für Dichte $1/4$ auch auf größeren Systemen die mikroskopische Erklärung des Grundzustandes darstellt.

Für den Cluster $\mathcal{C}^{8-4,y}$ mit $n = 1/8$ haben wir die Rücktransformation in Ordnung fünf in J'/J bestimmt. Betrachten wir die Magnetisierungsprofile, so ergibt sich mit beiden Methoden ein äquivalentes Magnetisierungsprofil. Die lokalen Momente addieren sich in beiden Systemen zu vier. Die Zahlenwerte für die lokalen Momente weichen in der dritten Nachkommastelle ab. Erneut führt dies zu leichten Abweichungen. Allgemein können wir aber von einer guten Übereinstimmung der Magnetisierungsprofile der beiden Methoden ausgehen. Dabei erkennt man sehr gut die Stabilisierung von zwei kohärenten Zwei-Teilchen-Zuständen. Betrachten wir die Wellenfunktion der ED, so ist diese Interpretation gegeben, denn erneut sind die Start-Zustände der Rechnung die Zustände mit höchstem Gewicht in der Wellenfunktion des Systems. Auch in diesem Beispiel hat sich die analoge Erweiterung des Zustandes auf den kleineren Systemen auf das größere System fortgesetzt. Wir können nun endgültig davon ausgehen, dass die DMRG-Zustände der 4-Bein-Röhre für Dichte $1/8$ als kohärente Zwei-Teilchen-Zustände zu verstehen sind.

Wir betonen, dass es sich bei den präsentierten Ergebnissen um eine Plausibilitätsüberprüfung für größere Systeme handelt. Das vorgestellte Verfahren ist durch empirische Ansätze herausgearbeitet worden. Die Methode beansprucht stark die Ressourcen Zeit und Speicher, so dass wir einen Ausbau dieses Verfahrens nicht für sinnvoll halten. Weiter ist es mit dem Verfahren a priori nicht möglich, die Qualität einer Rechnung abzuschätzen. So sind die Ergebnisse z. B. sehr sensitiv auf die Wahl der Start-Zustände. Oft können wir durch eine eingeschränkte Wahl der Start-Zustände nicht die selbst gesteckte Konvergenz-Schranke zur DMRG-Energie von 10^{-6} erreichen. Die Schwierigkeiten der effektiven Beschreibung von Clustern mit der PCUT haben uns motiviert die 4-Bein-Röhre erneut mit dem effektiven thermodynamischen Modell zu beschreiben. Wir haben insbesondere gezeigt, dass die effektive Beschreibung korrekt ist. Weiter ist nun gezeigt, dass die Fehlerquelle der klassischen Lösungen in der nicht quantenmechanischen

Beschreibung des effektiven Modells liegt, was zu den sehr unterschiedlichen Lösungen zwischen der DMRG und der klassischen Näherung geführt hat.

5.2 Diagonalisierung des thermodynamischen effektiven Modells

Wir haben in den Unterkapiteln 5.1.1 und 5.1.2 die wesentliche Physik der 4-Bein-Röhre bei den Dichten $1/8$ und $1/4$ herausgearbeitet, indem wir uns in unserer effektiven Beschreibung auf endliche Cluster beschränkt haben. So können die Ergebnisse mit der DMRG bestmöglich verglichen werden, denn beide Methoden diagonalisieren die gleichen Systeme. Wir haben insbesondere gesehen, dass die effektive Beschreibung korrekt ist. Die Lösung der effektiven Modelle muss dazu mit Methoden geschehen, die Quanteneffekte nicht unterschätzen.

Nun bietet es sich an, das thermodynamische effektive Modell zu untersuchen. Die effektive Beschreibung von Clustern ist numerisch sehr aufwendig, da sowohl die Bestimmung der Matrixelemente, als auch das Lösen der effektiven Matrix \mathcal{M} für größere Cluster schnell unmöglich wird. Beide Punkte können aber mit dem thermodynamischen effektiven Modell besser behandelt werden. Das thermodynamische effektive Modell ist zunächst universell für jedes 4-Bein-Röhren-Cluster. Das Modell selbst ist im thermodynamischen Limes bestimmt, aber durch die Lösung dieses Modells auf endlichen Clustern ergeben sich Finite-Size-Effekte. Weiterhin liegt das effektive Modell auf Operator-Level vor, so dass effektivere Diagonalisierungsverfahren, wie das Lanczos-Verfahren (siehe Kapitel B.1), verwendet werden können, um die Matrix \mathcal{M} eines endlichen Systems zu diagonalisieren.

Wir gehen im nächsten Unterkapitel 5.2.1 auf die Konvergenz und weitere numerische Details unseres Lanczos-Verfahrens ein. In Kapitel 5.2.2 wenden wir uns dann dem Phasendiagramm des effektiven Modells zu und diskutieren in Kapitel 5.2.3 die Magnetisierungsprofile und Wellenfunktionen der Lösungen.

5.2.1 Methodisches Vorgehen beim Diagonalisieren

Der effektive Hamiltonoperator ist teilchenzahlerhaltend und damit blockdiagonal in der Dichte n (siehe auch Kapitel 3.1.4). Daher können die verschiedenen Dichten $n = N_{t^+}/N_{\mathcal{C}}$ in einem Cluster \mathcal{C} aus $N_{\mathcal{C}}$ Dimer-Plätzen unabhängig voneinander diagonalisiert werden. Da wir weiterhin im Kanal maximaler Magnetisierung bleiben, kürzen wir im Folgenden die Teilchenanzahl von t^+ -Triplets im System N_{t^+} mit N ab, so dass die Dichte $n = N/N_{\mathcal{C}}$ ist.

Die Konvergenz der Grundzustandsenergie E_0^n eines Clusters \mathcal{C} bei Dichte n E_n^0 ist die entscheidende numerische Herausforderung beim Lanczos-Verfahren. Wir betrachten die Konvergenz in diesem Unterkapitel für die Cluster $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ und $\mathcal{C}^{8-4,y}$ mit $N = 4$ und $N = 6$ Teilchen, d. h. $n = 1/8$ und $n = 3/16$ und bei $J'/J = 0.1, 0.3$ und 0.5 .

Wir untersuchen die Konvergenz der Methode, indem wir die Grundzustandsenergie pro Spin $E_0^n/N_S = E_0^n/(2N_C)$ in Abhängigkeit von der Anzahl der Lanczos-Iterations-Schritten m betrachten. Wir nutzen in unserem Algorithmus zwei unterschiedliche Start-Vektoren, die wir mit A0 und A1 bezeichnen. Der Start-Vektor A0 gibt jedem Zustand des Systems die gleiche Amplitude $1/\sqrt{D_{\mathcal{M}}}$. Dabei bezeichnet $D_{\mathcal{M}} = N_C / (N! \cdot (N_C - N)!)$ die Dimension des Hilbertraumes. Für den Start-Vektor A1 nutzen wir alle Streifen-Strukturen des Systems, die mit der gleichen Amplitude $1/\sqrt{N_{\text{Streifen}}}$ im Start-Vektor auftreten. Die Größe N_{Streifen} bezeichnet die Anzahl der Streifen-Strukturen des Systems für Dichte n und die restlichen Zustände erhalten zu Beginn die Amplitude Null.

Darüberhinaus ist unsere Konvergenz von einem numerischen Parameter q abhängig. q gibt die Anzahl der Bits an, die zum Speichern der Gleitkommazahlen der Rechnung verwendet werden. Die Erhöhung der Bitanzahl q macht die Rechnung numerisch stabiler. Für größeres q treten die Effekte eines Orthogonalitäts-Verlustes im Verlauf der Rechnung erst für eine größere Anzahl von Iterationsschritten m auf. Damit kann die Orthogonalität auf technischen Weg überprüft werden. Treten für verschiedene q -Werte unterschiedliche Energie auf, ist die Orthogonalität in einer Rechnung verloren gegangen und die Ergebnisse sind unbrauchbar. Wir haben typischerweise Rechnungen mit $q = 192$ und $q = 256$ durchgeführt.

Die Konvergenz der Grundzustandsenergie für $n = 1/8$ ist in Bild 5.12 gezeigt, wobei wir von oben nach unten die Konvergenz für $J'/J = 0.1, 0.3$ und 0.5 zeigen. Pro Bild sind acht Datensätze gezeigt. Wir zeigen für das offene und periodische System jeweils die Konvergenz bezüglich der Start-Vektoren A0 und A1 mit $q = 192$ und 256 . Zunächst liegen die Datenpunkte für den numerischen Parameter q immer übereinander, unabhängig von J'/J , dem Start-Vektor oder den Randbedingungen, selbst für eine größere Anzahl von Iterationsschritten, wie $m = 200$. Wir merken an, dass wir in den neun Nachkommastellen unserer Rohdaten für $m = 200$ in keinem Fall Unterschiede zwischen $q = 192$ und 256 feststellen.

Allgemein sehen wir, dass die Rechnungen mit verschiedenen Start-Vektoren für beide Randbedingungen und unabhängig von J'/J spätestens bei $m = 200$ Iterationsschritten auf dieselbe Energie konvergieren. Typischerweise konvergiert der Start-Vektor A1 schneller und es sind 50 bis 70 Iterationsschritte nötig. Wir haben dies bereits angedeutet und weisen darauf hin, dass die Konvergenz für den recht kleinen Wert $J'/J = 0.1$ die meisten Iterationsschritte benötigt. Der Start-Vektor A0 erreicht erst nach wesentlich mehr Iterationsschritten eine ausreichende Konvergenz. Beginnen wir bei kleinen J'/J , so sind etwa 180, 100 und 60 Iterationsschritte nötig, um zu konvergieren.

Die Grundzustandsenergie ist auf dem offenen System niedriger als im entsprechenden periodischen System. In der effektiven Beschreibung von Clustern und der DMRG haben wir gesehen, dass sich dies genau andersherum verhält. Dies konnte man perturbativ verstehen, denn die Plätze am Rand eines offenen Systems zeigen ein stark erhöhtes chemisches Potenzial. Lösen wir hingegen das thermodynamische, effektive Modell auf einem offenen System, so können die Teilchen am Rand des Systems mit den universellen Amplituden fluktuieren. Dabei werden aber

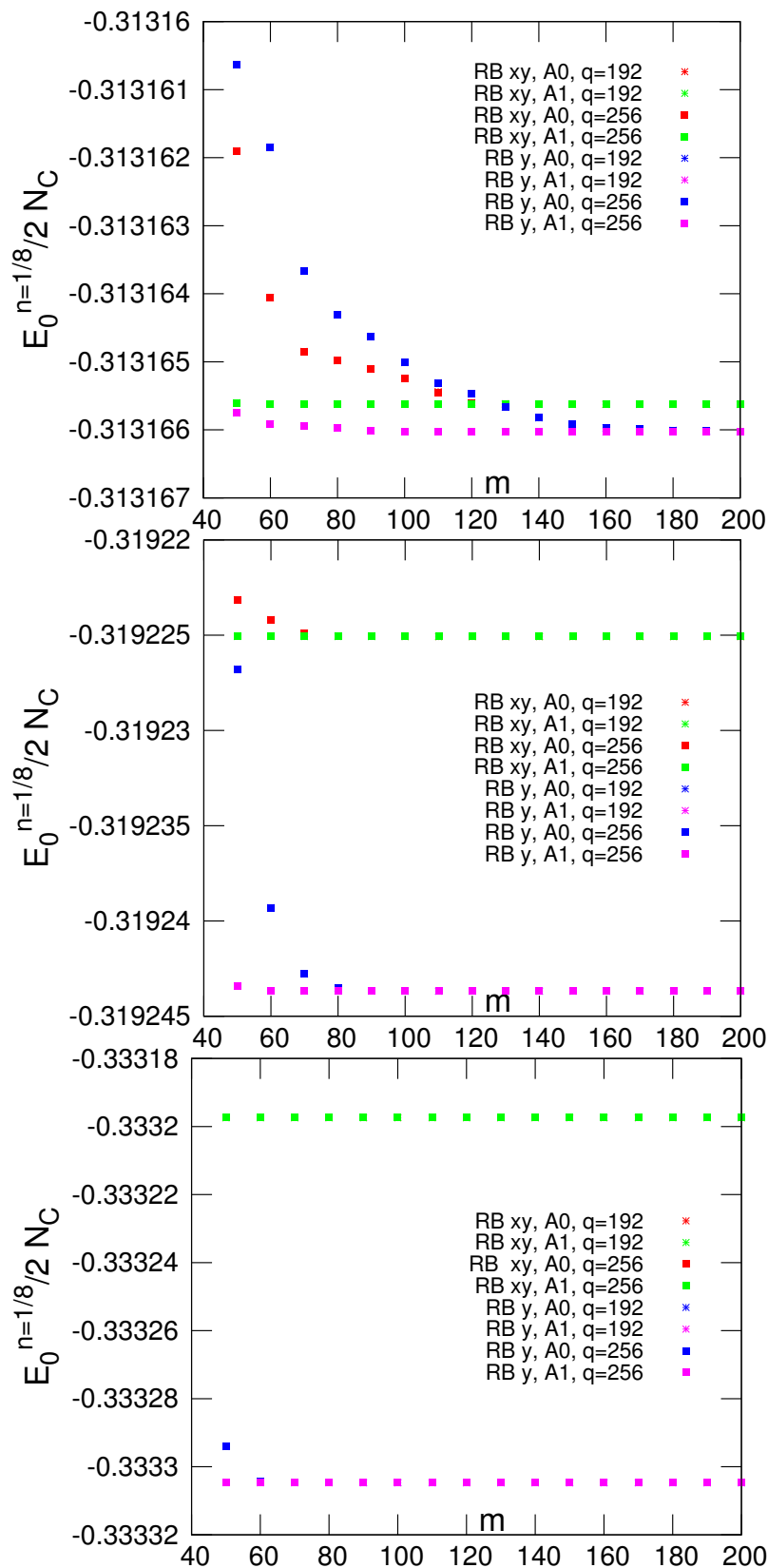


Abbildung 5.12: Konvergenz der Grundzustandsenergie $E_0^{n=1/8}$ auf den Clustern $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ und $\mathcal{C}^{8-4,y}$ bei Dichte $n = 1/8$. Wir kürzen die Bezeichnungen der Systeme mit RB xy und y im Bild ab. Von oben nach unten betrachten wir $J'/J = 0.1, 0.3$ und 0.5 . Die Datenpunkte für $q = 192$ und 256 liegen immer aufeinander.

die periodischen Wechselwirkungen nicht wirksam, die im entsprechenden periodischen System auftreten. Wir merken an, dass die niedrigere Energie eine Konsequenz des Randes des Systems ist. Daher sind die Grundzustandsenergien der periodischen Systeme bessere Abschätzungen für die Energie des Systems im thermodynamischen Limes.

Die Konvergenz der Grundzustandsenergie für Dichte $3/16$ in Abhängigkeit von den Iterationsschritten m ist in Abbildung 5.13 dargestellt. Auch in diesem Beispiel liegen die Ergebnisse für beide betrachtete Werte $q = 192$ und 256 immer übereinander, d. h. selbst für $m = 200$ sind alle neun Nachkommastellen der Grundzustandsenergie für beide Werte von q identisch. Wir schlussfolgern, dass $q = 192$ eine hinreichend stabile numerische Berechnung erlaubt, so dass in den folgenden Kapiteln immer $q = 192$ gesetzt wurde.

Wir vergleichen nun die Konvergenz der zwei Start-Vektoren A0 und A1 bei Dichte $3/16$ für verschiedene J'/J . Für $J'/J = 0.1$ erreichen die Rechnungen für beide Start-Vektoren nach $m = 200$ Schritten eine Genauigkeit von 10^{-6} für beide Randbedingungen. Im periodischen System konvergieren beide Startwerte zum selben Ergebnis und für $m = 200$ liegen die Energien mindestens in der Skala 10^{-7} übereinander. Im offenen System sehen wir für $m = 200$ noch Unterschiede zwischen beiden Startwerten, die in der Skala 10^{-6} liegen. Die Energien sind insgesamt hinreichend konvergiert, wobei der kleine Störparameter erneut dafür sorgt, dass erst durch recht viele Iterationsschritte die Konvergenz erreicht wird. Für größere J'/J konvergieren die beiden Start-Vektoren A0 und A1 für das periodische System innerhalb von $m = 200$ Iterationsschritten. Im offenen Cluster $\mathcal{C}^{8-4,y}$ sehen wir für größere J'/J , dass nur die Rechnung mit dem Start-Vektor A0 konvergiert ist. Allgemein konvergiert der Start-Vektor A0 für größere J'/J bei $m = 120$ und nur für kleinere J'/J sind mehr Iterationsschritte nötig um die Energie-Skala von 10^{-6} aufzulösen.

In den drei Beispielen für verschiedene J'/J sieht man zudem gut das typische Verhalten der beiden Start-Vektoren in Abhängigkeit von den Iterationsschritten m . Der Start-Vektor A0 zeigt einen kontinuierlich wirkenden Verlauf in Abhängigkeit von m . Dabei beobachten wir nie den Fall, dass die Energie des Start-Vektors A0 nochmals verändert wird, falls die Grundzustandsenergie ein Plateau für große Iterationsschritte erreicht. Mit diesem Start-Vektor konvergieren die Rechnungen kontinuierlich zum Grundzustand. Der Start-Vektor A1 zeigt typischerweise ein Plateau-Verhalten mit Sprüngen in der Energie. Für $J'/J = 0.1$ sehen wir sogar, dass sich ein Plateau zwischen $m = 60$ bis 190 Iterationsschritten zeigt und erst mit 200 Iterationsschritten springt die Energie dann wiederum erkennbar auf einen niedrigeren Zahlenwert.

Dieses Verhalten ist auch physikalisch plausibel. Im Start-Vektor A0 hat jeder Zustand des Hilbertraumes eine endliche Amplitude. Im Verlauf des Verfahrens wird mit dem Hamiltonoperator mehrfach auf diesen Zustand gewirkt. Dabei werden die Amplituden des Grundzustandes optimiert und die Konvergenz erfolgt kontinuierlich zum Grundzustand, denn die relevanten Zustände sind bereits im Start-Vektor enthalten. Der Start-Vektor A1 hat nur eine endliche Anzahl von Zuständen mit endlicher Amplitude. Die Wirkung des Hamiltonoperators optimiert die Amplituden und zudem erhalten Zustände, die zuvor eine Amplitude Null hatten, eine endliche

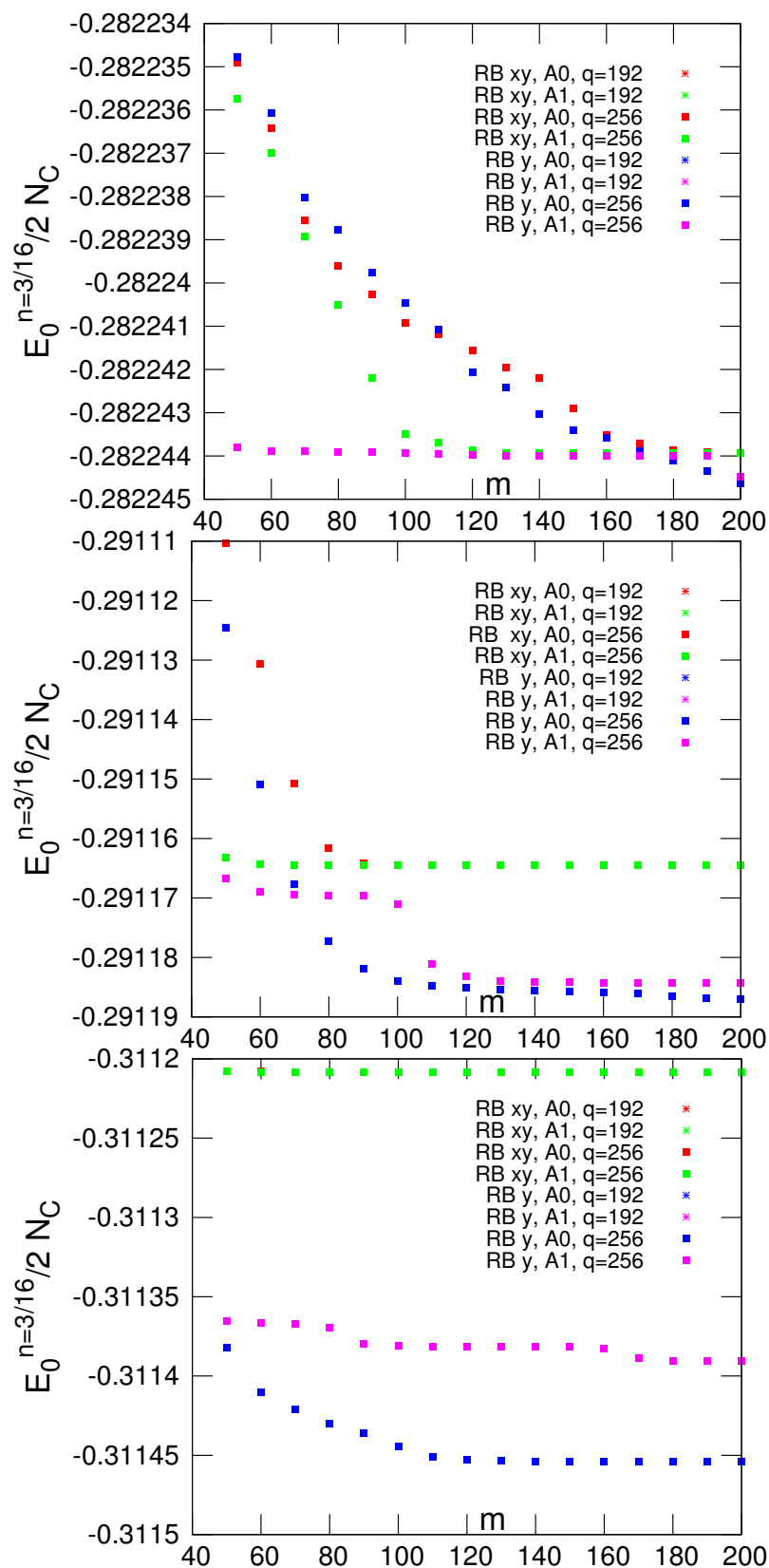


Abbildung 5.13: Konvergenz der Grundzustandsenergie $E_0^{n=3/16}$ auf den Clustern $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ und $\mathcal{C}^{8-4,y}$ bei Dichte $n = 3/16$. Wir kürzen die Bezeichnungen der Systeme mit RB xy und y im Bild ab. Von oben nach unten betrachten wir $J'/J = 0.1, 0.3$ und 0.5 . Die Datenpunkte für $q = 192$ und 256 liegen immer aufeinander.

Amplitude. Wir sehen, dass in diesem Ansatz für den Start-Vektor relevante Zustände erst im Verlauf der Rechnung eine endliche Amplitude erhalten und dann optimiert werden können. So kann das Verfahren mit dem Start-Vektor A1 zunächst eine lokale Lösung im vorhandenen Unterraum der Zustände mit endlicher Amplitude finden und springt aus dieser Lösung auf einen Zustand mit deutlich niedrigerer Energie, wenn neue relevante Zustände eine endliche Amplitude erhalten.

Wir fassen die Befunde zusammen. Die Konvergenz von periodischen Systemen erfolgt stabil und kann typischerweise mit dem Start-Vektor A1 rasch erreicht werden. Dabei konvergiert die Energie für kleine J'/J langsamer. Die Anzahl von $m = 120$ Iterationsschritten ist eine gute universale Abschätzung für die Konvergenz von A1 in periodischen Systemen. Die Konvergenz von offenen Systemen ist typischerweise schwieriger zu erreichen, wie wir bei Dichte $3/16$ gesehen haben. Für die Dichte $3/16$ konvergiert der Start-Vektor A0 erneut für ungefähr $m = 120$ Iterationsschritte, wobei der Start-Vektor A1 kein konvergentes Ergebnis liefert. Für kleinere J'/J konvergiert der Start-Vektor A0 recht langsam, aber für $m = 120$ findet man mit dem Start-Vektor A1 ein lokales Minimum, das energetisch nahe dem Grundzustand liegt. Die Anzahl von $m = 120$ Iterationsschritten scheint daher ein geeigneter universeller Mittelwert zwischen numerischem Aufwand und Konvergenz zu sein, den wir im Folgenden für das Lanczos-Verfahren nutzen werden.

5.2.2 Phasendiagramm

Wir haben Cluster der Länge $L_D = 4, 6$ und 8 mit periodischen und offenen Randbedingungen diagonalisiert, wobei in diesen Systemen $N_C = 16, 24$ und 32 Dimer-Plätze vorliegen. Die Systeme der Länge $L_D = 4$ und 6 haben wir bis Dichte $1/2$ betrachtet, sprechen aber im Wesentlichen über die Dichten $n \leq 1/4$. Der Dichte-Bereich oberhalb von $1/4$ wird durch das effektive Modell nicht ausreichend beschrieben, da in diesem Dichteregime Mehr-Teilchen-Prozesse relevant werden. Wir vernachlässigen aber im effektiven Modell Mehr-Teilchen-Prozesse. Wir erinnern daran, dass unsere Interpretationen für die Dichten $1/8$ und $1/4$ darauf hindeuten, dass die Physik des Bereiches $n \leq 1/4$ von den Zwei-Teilchen-Prozessen bestimmt wird. Die Systeme der Länge $L_D = 8$ konnten wir bis Dichte $n = 1/4$ berechnen. Dabei zeigen wir die Ergebnisse des Start-Vektors mit niedrigster Energie für $m = 123$ Iterationsschritte und $q = 192$.

Wir zeigen die Teilchen-Dichte n im System in Abhängigkeit vom externen Magnetfeld h . Die Bilder 5.14, 5.15 und 5.16 zeigen die Phasendiagramme für $J'/J = 0.1, 0.3$ und 0.5 . Für $J'/J = 0.3$ zeigen wir zudem die DMRG-Phasendiagramme für die Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ und $\mathcal{C}^{8-4,y}$. Wir beschränken uns in unserer Diskussion auf den Bereich kleiner Dichten $n \leq 1/4$. Das ist möglich, da jedes System die Dichte $1/4$ realisieren kann und wir finden ein Plateau dieser Dichte konsistent in allen Systemen. In den Bildern haben wir gestrichelte horizontale Linien zur Orientierung eingefügt, wobei die schwarzen Linien die erlaubten Dichten in den Clustern $\mathcal{C}^{8-4,y}$ und $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ zeigen und die grauen Linien die erlaubten Dichten in den Clustern $\mathcal{C}^{6-4,y}$ und $\mathcal{C}^{6-4,xy}$ darstellen. Damit die Phasendiagramme der verschiedenen Systeme erkennbar bleiben und nicht direkt übereinander

liegen, haben wir die Phasendiagramme jeweils ein wenig nach oben verschoben. Dabei folgen wir in der Verschiebung immer dem Verlauf der Legende des Bildes. Das System, das sich in der Legende unten findet, ist im Bild am meisten nach oben verschoben und das erste System der Legende ist gar nicht verschoben. Die Kurven liegen aber alle auf der nächst-gelegenen schwarzen bzw. grauen horizontalen Linie.

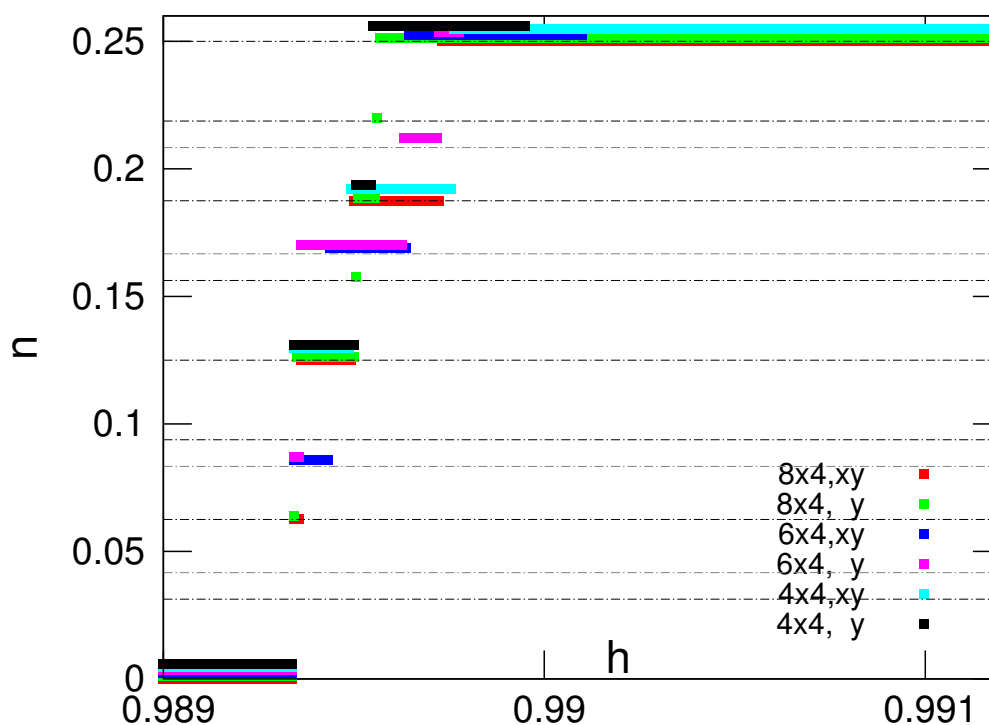


Abbildung 5.14: Wir zeigen die Dichte n in Abhängigkeit vom angelegten Feld h für $J'/J = 0.1$ im Bereich $n \leq 1/4$ für die angegebenen Cluster. Auf den Systemen wird das thermodynamische effektive Modell gelöst. Wir gehen im Text auf die horizontalen Linien und die Verschiebung der Kurven ein.

In den Cluster $\mathcal{C}^{4-4,y}$ und $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ mit $N_C = 16$ Plätzen stabilisieren sich Plateaus der Dichte $1/8$, $3/16$ und $1/4$ für $J'/J = 0.1$. Diese Sequenz beinhaltet genau die drei Plateaus, die wir als Ansatz in Kapitel 5.1.1 diskutiert haben. Aufgrund der verschiedenen Randbedingungen der Cluster zeigen die Plateaus aber leichte Unterschiede in der Breite. Die Breite des $1/8$ -Plateaus zwischen der periodischen und offenen Betrachtung des Systems ist hier nahezu identisch. In den Clustern $\mathcal{C}^{6-4,y}$ und $\mathcal{C}^{6-4,xy}$ aus 24 Plätzen finden wir die Plateaus der Dichte $1/12$, $1/6$, $5/24$ und $1/4$, wobei wir das sehr schmale $5/24$ Plateau nur mit offenen Randbedingungen sehen. Hierbei fällt auf, dass kein Plateau der Dichte $1/8$ stabilisiert wird. In den Clustern $\mathcal{C}^{6-4,y}$ und $\mathcal{C}^{6-4,xy}$ müssten drei Teilchen für eine Dichte von $n = 1/8$ eingefügt werden. Nach unseren Interpretationen ist die Physik des $1/8$ -Plateaus dieser Systeme aber verschieden von den $1/8$ -Plateaus, die aus Zwei-Teilchen-Zuständen bestehen. Daher ist es konsistent, dass sich dieses Plateau auf den Systemen mit $N_C = 24$ Dimeren nicht findet. Zuletzt zeigen die größten betrachteten Cluster $\mathcal{C}^{8-4,y}$ und $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ eine Abfolge von Plateaus der Dichte $1/16$, $1/8$, $5/32$, $3/16$, $7/32$ und $1/4$. Dabei treten die schmalen Plateaus der Dichte $5/32$ und $7/32$ nur im offenen System auf.

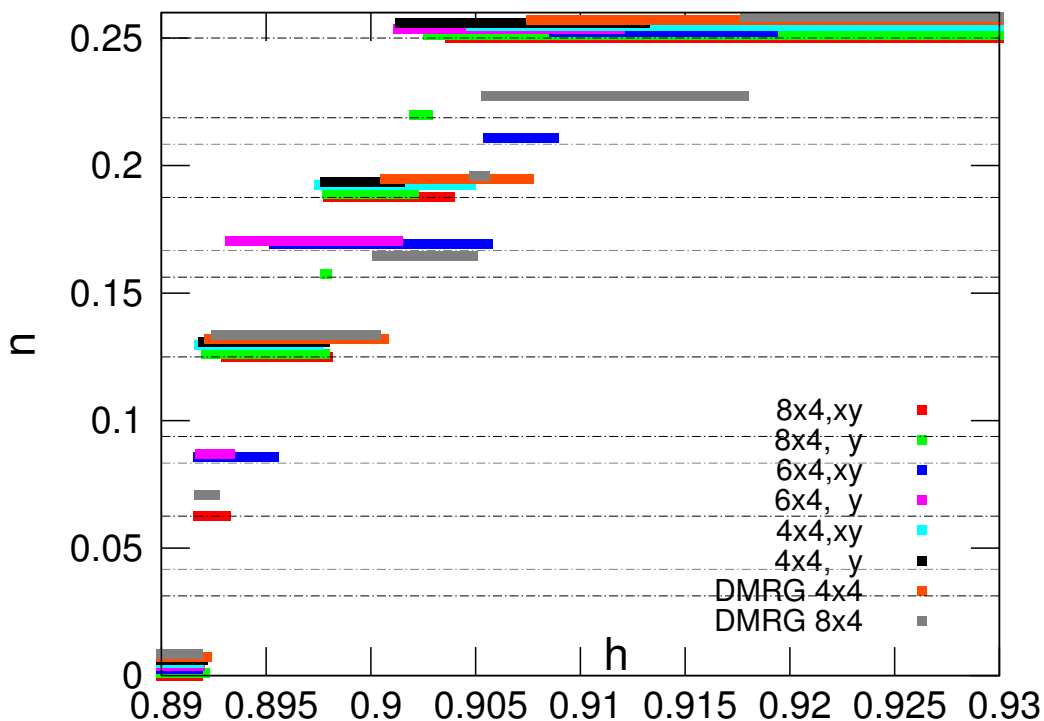


Abbildung 5.15: Wir zeigen die Dichte n in Abhängigkeit vom angelegten Feld h für $J'/J = 0.3$ im Bereich $n \leq 1/4$ für die angegebenen Cluster. Auf den Systemen wird das thermodynamische effektive Modell gelöst und wir zeigen DMRG-Daten. Wir gehen im Text auf die horizontalen Linien und die Verschiebung der Kurven ein.

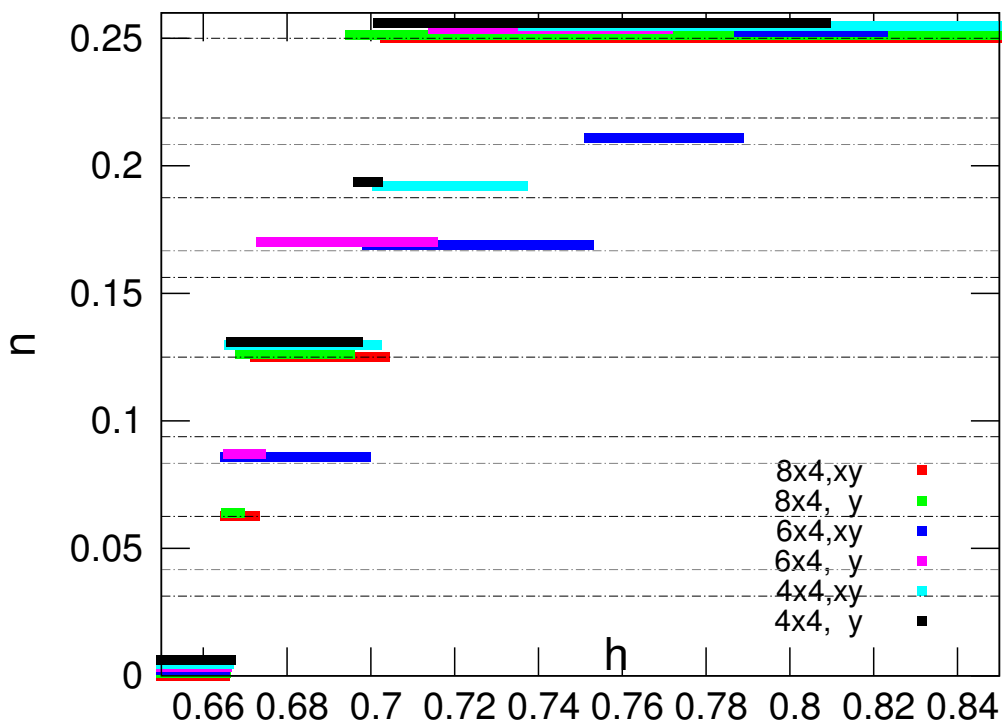


Abbildung 5.16: Wir zeigen die Dichte n in Abhängigkeit vom angelegten Feld h für $J'/J = 0.5$ im Bereich $n \leq 1/4$ für die angegebenen Cluster. Auf den Systemen wird das thermodynamische effektive Modell gelöst. Wir gehen im Text auf die horizontalen Linien und die Verschiebung der Kurven ein.

Betrachten wir die Phasendiagramme für $J'/J = 0.3$, so ändert sich die Abfolge der Plateaus in den Systemen nicht wesentlich. Ein interessanter Punkt ist hier, dass wir im Cluster $\mathcal{C}^{8-4,y}$ kein Plateau der Dichte $1/16$ mehr finden. Das System springt in dem großen Cluster direkt auf die Dichte $1/8$. Der Stabilitäts-Bereich des $1/8$ -Plateaus ist in allen betrachteten Systemen und Methoden sehr konsistent. Betrachten wir nun die DMRG-Daten, so ist das Phasendiagramm des Clusters $\mathcal{C}^{4-4,y}$ konsistent zu der Lösung des effektiven Modells auf demselben System. Das DMRG-Phasendiagramm des Clusters $\mathcal{C}^{8-4,y}$ zeigt auch die Stabilisierung von Plateaus der Dichte $1/16$, $1/8$, $3/16$ und $1/4$. Das Plateau der Dichte $3/16$ ist aber sehr schmal und die DMRG findet dazu Plateaus der Dichte $5/32$ und $7/32$, die in der Lösung des effektiven Modells auch gesehen werden, aber deutlich schmaler ausfallen.

Unser Phasendiagramm für $J'/J = 0.5$ zeigt erneut im Wesentlichen die identischen Abfolgen von Plateaus für die verschiedenen Systeme, erneut mit leichten Modifikationen. Die auffällige Beobachtung ist, dass wir mit beiden Systemen aus $N_C = 32$ Plätzen kein Plateau der Dichte $3/16$ finden, sondern einen direkten Übergang von $1/8$ zu $1/4$ feststellen. Wir finden in den $\mathcal{C}^{8-4,y}$ und $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ Clustern die Abfolge $1/16$, $1/8$ und $1/4$, wobei die Plateaus für beide Systeme in einem konsistenten Bereich stabilisiert werden. Speziell die Breiten des $1/8$ -Plateaus sind sehr konsistent zueinander und relativ unabhängig von der Systemgröße oder den Randbedingungen. Wir erinnern daran, dass unsere Interpretation entsprechend, in den Systemen aus $N_C = 32$ Plätzen zwei gebundene Zustände aus zwei Teilchen vorliegen. Die Abstände von zwei kohärenten gebundenen Zuständen sind groß genug, dass die Wechselwirkungen zwischen diesen zwei Zuständen sehr klein sind. Daher ist es auch plausibel, dass wir keine quantitativen Änderungen feststellen, wenn wir ein System mit einem oder zwei Zwei-Teilchen-Zuständen betrachten, denn die Physik wird vom lokalen Verhalten der zwei Teilchen bestimmt.

Wir fassen die wichtigsten Punkte zusammen. Die Systeme mit $N_C = 16$ und 32 Plätzen sind die Cluster, in denen unsere Interpretationen von der Physik für die Dichte $1/8$ und $1/4$ analog angewendet werden können. Mit vorherigen Beobachtungen konsistent, finden wir Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$. Entsprechend finden wir kein $1/8$ Plateau in Clustern aus $N_C = 24$ Plätzen. Diese Systemgröße für die Dichte $1/8$ bedingt 3 Teilchen im Clustern, so dass unsere Ideen von gebundene Zwei-Teilchen-Zuständen nicht realisiert werden können. Die Lösung für die Dichte $1/8$ in den Clustern aus $N_C = 24$ Plätzen ist in der Tat energetisch ungünstig. Die semi-klassischen Streifen-Strukturen können in allen Systemen gebildet werden und wir finden auch in jedem betrachteten System ein Plateau der Dichte $1/4$. Der Bereich zwischen diesen Dichten ist mit den betrachteten Systemen nicht einheitlich zu beschreiben. Für $J'/J = 0.1$ und 0.3 haben wir Hinweise für eine Zwischen-Phase der Dichte $3/16$ gesehen, die aber bei $J'/J = 0.5$ nicht vorliegt. Die verschiedenen Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$ werden in einem konsistenten Bereich realisiert und die Ergebnisse sind für diese beiden Plateaus konsistent zur DMRG. Wir schlussfolgern daraus, dass wir weitere Hinweise dafür sehen, dass Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$ im Phasendiagramm des thermodynamischen Limes vorliegen.

Man beachte, dass wir mit der DMRG zudem bereits größere endliche Systeme betrachtet haben.

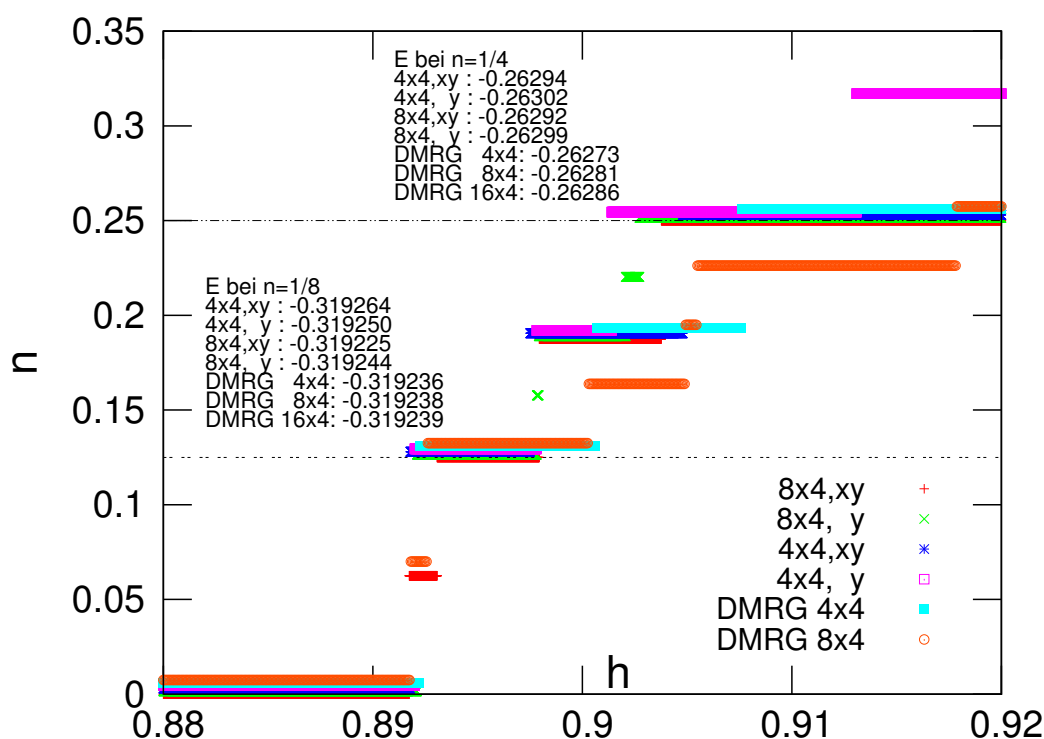


Abbildung 5.17: Wir zeigen die relevanten Ergebnisse für die Dichte n in Abhängigkeit vom angelegten Feld h für $J'/J = 0.3$ im Bereich $n \leq 1/4$ für die angegebenen Cluster. Wir haben für Dichte $1/8$ und $1/4$ vertikale Linien zur Orientierung eingefügt. Wir fassen in diesem Bild die Energien der verschiedenen Systeme und Methoden für diese beiden Plateaus zusammen.

Die konsistente Stabilisierung der Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$ in konsistenten Feldbereichen, lässt auf die Stabilisierung von Plateaus dieser Dichten im thermodynamischen Limes schließen. Wir werden uns den mikroskopischen Details im nächsten Kapitel zuwenden, nehmen aber vorweg, dass auch im thermodynamischen Modell unsere Interpretationen weiterhin gültig sind.

Die Stabilisierung von Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$ im thermodynamischen Limes ist wahrscheinlich. Daher fassen wir für $J'/J = 0.3$ die Grundzustandsenergien und die Phasendiagramme der Lanczos-Diagonalisierung und der DMRG auf den relevanten Systemen in Abbildung 5.17 zusammen. Wir wenden uns im folgenden Unterkapitel nun den Magnetisierungsprofilen und den Wellenfunktionen zu, um zu zeigen, dass die dominante Physik, dargestellt in Kapitel 5.1.1, auch in den Lösungen des thermodynamischen effektiven Modells vorliegen.

5.2.3 Plateau-Strukturen

Im Folgenden wenden wir uns den Magnetisierungsprofilen zu, die wir aus der Diagonalisierung endlicher Systeme mit dem Lanczos-Verfahren bestimmt haben. Dabei wird die Dynamik im System durch das thermodynamische effektive Modell beschrieben. Wir werden uns im Folgenden speziell mit den Magnetisierungsprofilen auf den größeren Clustern $\mathcal{C}^{8-4,y}$ und $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ beschäftigen und hierbei auch die Grundzustands-Wellenfunktionen dieser Systeme betrachten, um unser Verständnis der Physik zu untermauern. Aufgrund der Relevanz der Dichten $1/8$, $3/16$ und $1/4$

für Plateaus im thermodynamischen Limes, besprechen wir die Cluster $\mathcal{C}^{8-4,y}$ und $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ im Folgenden bei den genannten Dichten und beschränken uns für eine stabile Numerik auf den Störparameter $J'/J = 0.3$.

Die Magnetisierungsprofile in der magnetischen Sprache des ursprünglichen Modells werden, wie zu Beginn von Kapitel 5.1.2 beschrieben, über die Rücktransformation der Wellenfunktion bestimmt. Diese stellt eine Überlagerung aller Zustände des Hilbertraumes mit den entsprechenden Amplituden des Grundzustandes dar. Diese Amplituden sind durch den Eigenvektor des Grundzustandes der Lanczos-Methode bestimmt. Wir haben aber das bekannte Problem, dass die Dimension des betrachteten Hilbertraumes zu groß ist, um die Rücktransformation der vollen Wellenfunktion durchzuführen. Daher werden wir das Magnetisierungsprofil des Grundzustandes $|\Phi\rangle$ mit der Formel

$$\langle\Phi|\left(S_{\vec{i}}^{z,\beta}\right)_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}|\Phi^{\text{Trunk}}\rangle = S_{\text{eff},i}^z \quad (5.15)$$

bestimmen. Wir erinnern daran, dass $\left(S_{\vec{i}}^{z,\beta}\right)_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$ die effektive Observable eines Spins am Ort \vec{i} ist. Die Wellenfunktion $|\Phi^{\text{Trunk}}\rangle$ stellt die Wellenfunktion $|\Phi\rangle$ dar, wobei alle Amplituden, die kleiner sind als ein Cutoff χ , auf Null gesetzt werden. Diese reduzierte Wellenfunktion wird normiert und als Start-Zustand für die Observablen-Bestimmung verwendet, wobei der Cutoff den Hilbertraum stark reduziert und damit die Berechnung der Observablen erst ermöglicht.

Wir kommen nun zu den numerischen Eckdaten der Ergebnisse, die wir in den nächsten Unterkapiteln präsentieren. Für Dichte $1/8$, $3/16$ und $1/4$ haben wir $\chi = 10^{-6}$, 10^{-5} und 10^{-4} gewählt. Die effektive Observable wurde meist in Ordnung drei in J'/J bestimmt, wobei diese Ordnung für $J'/J = 0.3$ typischerweise ausreichend ist, um lokale Magnetisierungen auf die vierte oder fünfte Nachkommastelle genau zu berechnen.

5.2.3.1 1/4 Plateau

Wir zeigen die z-Komponente der Magnetisierung für die Cluster $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ und $\mathcal{C}^{8-4,y}$ bei $n = 1/4$ in Abbildung 5.18. Im periodischen System sehen wir erneut ein sehr homogenes Bild. Das dominante magnetische Moment befindet sich auf den Spins der vertikalen Dimere und hat die Amplitude 0.1983. Auf den Spins der horizontalen Dimere finden wir ein Moment von 0.0517. Die lokalen Momente addieren sich sehr genau zu dem totalen Moment vier, was den vier Teilchen im System entspricht.

Wir erinnern daran, dass die Prozesse des effektiven Modells für die 4-Bein-Röhre symmetriebrochen sind und die analogen, um 90° gedrehten Prozesse für Teilchen auf vertikalen oder horizontalen Dimeren unterschiedliche Amplituden haben. Diese Amplituden begünstigen die vertikalen Dimere, so dass sich das Ergebnis als Überlagerung von Streifen-Strukturen auf vertikalen Dimeren verstehen lässt. Bezüglich der effektiven Observablen sei angemerkt, dass sich

durch die Nutzung der effektiven Observablen in Ordnung fünf ebenfalls die gerundeten Zahlenwerte 0.1983 und 0.0517 für die beiden Amplituden zeigen. Dies ist exemplarisch dafür, dass die Betrachtung der effektiven Observablen in Ordnung drei ausreichend ist. Im Allgemeinen treten Unterschiede in Momenten in der Größenordnung 10^{-5} in höheren Ordnungen auf. Es ist im Folgenden daher ausreichend für $J'/J = 0.3$ die Rücktransformation in Ordnung drei in J'/J durchzuführen.

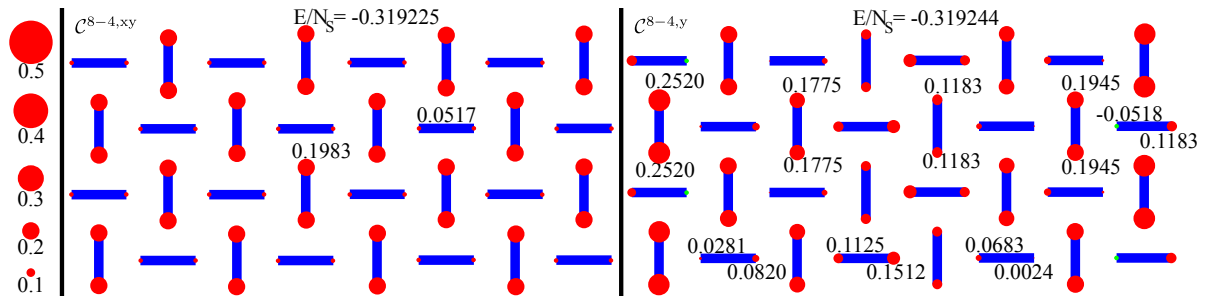


Abbildung 5.18: Wir zeigen die z-Komponente der Magnetisierung auf den Clustern $\mathcal{C}^{8-4,y}$ und $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ bei Dichte $1/4$ für den Störparameter $J'/J = 0.3$. Wir nutzen die effektive Observable in Ordnung drei in J'/J und die Wellenfunktion $|\Phi\rangle^{\text{trunk}}$ wird mit dem Gewicht $\chi = 10^{-4}$ trunziert.

Betrachten wir nun das offene System, so sehen wir Unterschiede in der Magnetisierung sowohl am Rand des Systems als auch im Inneren. Die wesentliche Magnetisierung liegt auf den vertikalen Dimeren am Rand, wobei die Spins ein Moment von etwa 0.25 zeigen. Eine Spalte weiter nach innen liegt ein Moment von 0.1945 auf den Spins an vertikalen Dimeren vor, was vergleichbar ist zum Moment im periodischen System. Die vertikalen Dimere, die noch näher am Zentrum des Systems liegen, haben ein weiter reduziertes Moment, so dass die Momente 0.1775 und im Zentrum 0.1183 vorliegen.

Die horizontalen Dimere am Rand zeigen ein magnetisches Profil, das an die benachbarten horizontalen Dimere eines vertikalen isolierten Triplons erinnert. Dieses Profil tritt an den horizontalen Dimeren am Rand des Systems besonders deutlich vor. Typischerweise würde man erwarten, dass die positiven und negativen Momente eines horizontalen Dimers von den Magnetisierungen der benachbarten Dimere herrührt. Wir haben bereits gesehen, dass sich, sind beide vertikalen Dimere mit gleicher Magnetisierung stabilisiert, diese Momente zu einem sehr kleinen Moment aufaddieren. Da die Magnetisierungen an den vertikalen Dimeren zum Inneren des Systems kleiner werden, zeigen die horizontalen Dimere weiter innen im System noch das charakteristische Verhalten, dass der zum Zentrum gerichtete Spin ein größeres Moment hat als der Spin der zum Rand ausgerichtet ist. Das Magnetisierungsprofil der beiden Spalten am Rand ist in dem Teilchen-Bild konsistent mit der Belegung der Teilchen auf vertikale Dimere. Dabei haben im Inneren des Systems die Spins an horizontalen und vertikalen Dimeren etwa dieselbe Amplitude und Orientierung. In dem Teilchen-Bild liegen die Anregungen im Inneren also nicht klar auf vertikalen oder horizontalen Dimeren, sondern überlagern sich gleichmäßig auf diesen Plätzen. Zusammenfassend scheinen die Teilchen im Inneren des Systems gleichmäßig auf vertikalen und horizontalen Dimeren vorzuliegen, während sich die Magnetisierung am Rand wesentlich durch besetzte vertikale Dimere auszeichnet.

$ A_i $	$ \hat{z}\rangle_{1/4}^{8-4,xy}$	$ A_i $	$ \hat{z}\rangle_{1/4}^{8-4,xy}$	$ A_i $	$ \hat{z}\rangle_{1/4}^{8-4,xy}$	$ A_i $	$ \hat{z}\rangle_{1/4}^{8-4,xy}$
0.3118		0.3118		0.3118		0.3118	
0.0800		0.0800		0.0800		0.0800	
0.0800		0.0800		0.0800		0.0800	
0.0800		0.0800		0.0800		0.0800	
0.0800		0.0800		0.0800		0.0800	
0.0800		0.0800		0.0800		0.0800	
0.0800		0.0800		0.0800		0.0800	
0.0800		0.0800		0.0800		0.0800	
0.0800		0.0800		0.0800		0.0800	
0.0800		0.0800		0.0800		0.0800	
0.0547		0.0547		0.0547		0.0547	
0.0488		0.0488		0.0488		0.0488	
0.0488		0.0488		0.0488		0.0488	
0.0488		0.0488		0.0488		0.0488	
0.0488		0.0488		0.0488		0.0488	

Abbildung 5.19: Zusammenfassung der Wellenfunktionen des $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ Clusters bei Dichte $1/4$ für $J'/J = 0.3$. Die Wellenfunktion ist als Überlagerung der relevantesten Zustände dargestellt, wobei wir alle $|A_i| < 0.04$ als relevant bezeichnen. Im unteren Teil zeigen wir 16 Zustände mit $|A_i| = 0.0488$, wobei es noch 48 weitere Zustände dieser Amplitude gibt, die wir aus Platzgründen nicht zeigen.

Wir betrachten nun die Wellenfunktionen der Ergebnisse, um über die mikroskopischen Mechanismen zu sprechen. Dazu zeigen wir zunächst die Amplituden der relevantesten Zustände aus der Wellenfunktion auf dem $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ Cluster in Tabelle 5.19. Insgesamt ist die Wellenfunktion sehr konsistent mit den Bildern der Physik, die wir bereits kennen gelernt haben. Der relevanteste Typ von Zuständen sind die Streifen-Strukturen auf vertikalen Dimeren, wobei wir bei einem System der Länge $L_D = 8$ den Streifen zweimal periodisch um das System winden können. Diese vier Zustände haben eine Amplitude von $|A_i| = 0.3118$. Weiter finden wir 32 Zustände mit einer Amplitude $|A_i| = 0.08$, die aus den Streifen-Strukturen durch den dominanten Paar-Fluktuations-Term hervorgehen. Die Relevanz dieser Zustände haben wir in Kapitel 5.1.2 bereits gesehen. Innerhalb des Cutoffs finden wir noch zwei weitere Klassen von Zuständen. Diese Klassen sind die vier Streifen-Strukturen auf horizontalen Dimeren mit einer Amplitude 0.0547 und die Zwischen-Zustände, die durch korreliertes Hüpfen C_1 aus einer Streifen-Struktur auf vertikalen Dimeren hervorgehen. Es gibt 64 der genannten Zwischen-Zustände nach einem korrelierten Hüpfterm C_1 , die alle betragsmäßig dieselbe Amplitude 0.0488 haben.

Wir sprechen nun noch über die Wellenfunktion des offenen Systems, wobei wir keine explizite Tabelle zeigen möchten. Hier lässt sich die Physik im Wesentlichen ebenfalls auf die bekannte Physik beschränken. Der relevanteste Typ unter den Zuständen sind die Streifen-Strukturen auf vertikalen Dimeren. Typischerweise folgen dann die Zustände, die durch den dominanten Paar-Fluktuations-Term aus einer Streifen-Struktur hervorgehen. Dabei haben diese Zustände ein sehr hohes Gewicht, wenn die Teilchen im Inneren des Systems fluktuieren und ein sehr kleines Gewicht, fluktuieren Teilchen am Rand. Ein ähnliches Bild zeigt sich für die Zwischen-Zustände, die man durch den korrelierte Hüpfterm C_1 aus einer Streifen-Struktur erreicht. Die Randeffekte führen dazu, dass die Teilchen auf horizontalen Dimeren am Rand weniger fluktuieren. Daher zeigen die Zwischen-Zustände mit horizontalen belegten Dimeren im Inneren des Systems ein höheres Gewicht. Dieses mikroskopische Verhalten entspricht dem diskutierten Magnetisierungsprofil mit der starken Magnetisierung auf vertikalen Dimeren am Rand des Systems und der ausgeglichenen Magnetisierung zwischen vertikalen und horizontalen Dimeren im Inneren des Systems.

Zusammenfassend sei gesagt, dass der Grundzustand für Dichte $1/4$ auf den diskutierten Clustern mit dem thermodynamischen effektiven Modell wieder durch den Mechanismus aus Kapitel 5.1.1.1 erklärt wird. Es handelt sich bei den Magnetisierungsprofilen um die Überlagerung von semi-klassischen Streifen-Strukturen. Die Streifen-Strukturen werden durch dominantes korreliertes Hüpfen und durch dominante Paar-Fluktuation stabilisiert, da diese Fluktuationen einen erheblichen Energiegewinn im System ermöglichen.

5.2.3.2 $1/8$ Plateau

Die Magnetisierungsprofile aus der Diagonalisierung des thermodynamischen effektiven Modells für Dichte $1/8$ auf den Clustern $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ und $\mathcal{C}^{8-4,y}$ zeigen wir in Abbildung 5.20. Das Magnetisierungsprofil des periodischen Systems zeigt ein homogenes Bild mit starken Magnetisierungen

auf den vertikalen Dimeren und schwachen Magnetisierungen auf den horizontalen Dimeren. Die Zahlenwerte für die Magnetisierung belaufen sich auf 0.1136 und 0.0114, so dass sich die lokalen Momente zu zwei addieren. Die Magnetisierung liegt im Wesentlichen auf den vertikalen Dimeren, da eine Streifen-Struktur aus zwei Teilchen auf vertikalen Dimeren entlang der y-Richtung ungehindert fluktuiert. Der entsprechende Streifen-Zustand auf horizontalen Dimeren bewegt sich im Wesentlichen entlang der x-Richtung, so dass es zu Wechselwirkungen zwischen den zwei kohärenten Zuständen kommt, weshalb dieser Fluktuations-Kanal unterdrückt wird.

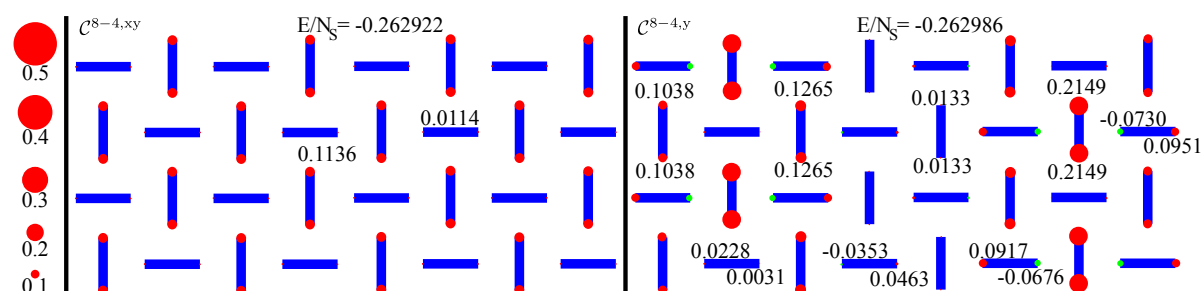


Abbildung 5.20: Wir zeigen die z-Komponente der Magnetisierung auf den Clustern $\mathcal{C}^{8-4,y}$ und $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ bei Dichte $1/8$ für den Störparameter $J'/J = 0.3$. Die effektive Observable ist in Ordnung drei in J'/J betrachtet und die Wellenfunktion $|\Phi^{\text{trunk}}\rangle$ wurde auf alle Zustände mit Amplituden größer als $\chi = 10^{-6}$ trunkiert.

Wir wenden uns der Magnetisierung des offenen Systems $\mathcal{C}^{8-4,y}$ zu. Das Magnetisierungsprofil dieses Systems lässt sich gut mit der Interpretation von zwei lokalisierten kohärenten Zuständen beschreiben. Zunächst sehen wir in den zwei Spalten im Inneren des Systems kaum Magnetisierung und links sowie rechts addieren sich die Momente zu zwei auf, so dass sich im linken und rechten Teil des Systems jeweils zwei Teilchen befinden müssen. Diese fluktuieren entlang der y-Richtung, was die starken Magnetisierungen auf den vertikalen Dimeren erklärt. Die Streifen-Strukturen aus zwei Teilchen auf vertikalen Dimeren können durch das korrelierte Hüpfen C_1 gerade in y-Richtung fluktuieren. Dabei nutzen wir im thermodynamischen effektiven Modell auch für die Teilchen am Rand des Systems das universelle chemische Potenzial, so dass die Kosten der vertikalen Dimere im gesamten System gleich sind. Daher kann auch eine Streifen-Struktur aus zwei Teilchen auf vertikalen Dimeren an den beiden äußeren Spalten des Systems energetisch günstig sein. Damit erklären sich die nennenswerten Momente auf den vertikalen Dimeren am Rand, die in der Größenordnung der Momente der dritten Spalte vom Rand aus liegen. Die horizontalen Dimere des Systems zeigen das charakteristische Verhalten von horizontalen Dimeren, das isolierte Triplonen auf vertikalen Dimeren zeigen. Entsprechend gehen wir in dem Teilchen-Bild davon aus, dass die Teilchen wesentlich auf vertikalen Dimeren liegen.

Wir verifizieren nun, dass die eben dargestellten Interpretationen der Magnetisierungsprofile gültig sind. Wir zeigen hierzu die Wellenfunktion des periodischen Systems $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ in Tabelle 5.21. Die Darstellung respektiert die Translationssymmetrie des Systems in x-Richtung. Wir zeigen die Teilchen-Belegung eines Zustandes innerhalb von vier Spalten auf der linken Seite des Doppelstriches und auf der rechten Seite zeigen wir den Zustand der verbleibenden Spalten. Dabei zeigen alle Zustände mit dieser Belegung dieselbe Amplitude, unabhängig davon in welcher Spalte die Teilchen nun liegen.

$ i\rangle_{1/8,L}^{8-4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{1/8,R}^{8-4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{1/8,R}^{8-4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{1/8,R}^{8-4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{1/8,R}^{8-4,xy}$
	-0.1094		0.1094		-0.1094		0.1094	
	-0.0330		-0.0330		-0.0330		-0.0330	
	0.1094		-0.1094		0.1094		-0.1094	
	0.0330		0.0330		0.0330		0.0330	
	-0.1094		0.1094		-0.1094		0.1094	
	-0.0330		-0.0330		-0.0330		-0.0330	
	0.1094		-0.1094		0.1094		-0.1094	
	0.0330		0.0330		0.0330		0.0330	
	-0.0330		0.0330		-0.0330		0.0330	
	-0.0330		0.0330		-0.0330		0.0330	
	-0.0330		0.0330		-0.0330		0.0330	
	-0.0330		0.0330		-0.0330		0.0330	

Abbildung 5.21: Zusammenfassung der Wellenfunktionen des $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ Clusters bei Dichte $1/8$ für $J'/J = 0.3$. Die Wellenfunktion ist als Überlagerung der relevantesten Zustände dargestellt, wobei wir alle $|A_i| < 0.03$ als relevant bezeichnen. Die Wellenfunktion untermauert wesentlich die Interpretation von zwei unabhängigen kohärenten Zuständen, weshalb wir das System hier reduziert als Vereinigung von zwei Teilen $|i\rangle_L$ und $|i\rangle_R$ der Länge $L_D = 4$ darstellen. Den Zustand in beliebigen vier Spalten des Systems ist im linken Teil zu sehen und mit einem vertikalen Doppelstrich vom Zustand der anderen vier Spalten getrennt. Wir zeigen die Amplitude $|A_i|$ des Gesamt-Zustandes bei den Zuständen auf der rechten Seite vom Doppelstrich.

Die Wellenfunktion zeigt, dass die Teilchen wesentlich auf den vertikalen Dimeren in einer Zwei-Teilchen-Streifen-Struktur liegen. Im System haben zwei Streifen-Strukturen aus zwei Teilchen den maximalen Abstand zueinander. Die genannten Zustände aus zwei Zwei-Teilchen-Streifen-Strukturen haben eine Amplitude von $|A_i| = 0.1094$ und sind die relevantesten Typen von Zuständen im System. Wir erinnern daran, dass wir in Tabelle 5.21 nur 16 der 64 genannten Zustände zeigen. Konsistent zu unseren Vorstellungen von der Physik ist der zweite Typ von relevanten Zuständen durch die Zwischen-Zustände gegeben, die aus der Anwendung des korrelierten Hüpfterms C_1 hervorgehen. Zusammenfassend lässt sich die Wellenfunktion als Überlagerung von zwei unabhängigen kohärenten Zwei-Teilchen-Zuständen verstehen. Um gegenseitige Einflüsse zu minimieren, fluktuieren die kohärenten Zustände in y -Richtung und haben den maximalen Abstand zueinander. Die Fluktuation in y -Richtung ist durch die korrelierten Hüpfsterme der vertikalen Dimere möglich und die Teilchen befinden sich wesentlich in Zuständen, die vertikale Teilchen belegen. Damit erklärt sich die starke Magnetisierung der vertikalen Dimere.

Wir gehen an dieser Stelle nicht detailliert auf die Wellenfunktion des offenen Systems ein, aber unsere Interpretationen finden sich in der Wellenfunktion erneut wieder. Wie vermutet ist der relevanteste Typ von Zuständen, wie schon auf dem periodischen System, durch Zwei-Teilchen-Streifen-Strukturen gegeben. Die Streifen-Strukturen liegen, wie durch das Magnetisierungsprofil vermutet, in der Nähe des linken bzw. rechten Randes des Systems. Die darauf folgenden Zustände zeigen, dass die zwei Teilchen der Streifen-Strukturen zu einem kohärenten Zustand binden, der sich hauptsächlich entlang der y -Richtung durch korreliertes Hüpfen mit dem Term C_1 bewegt.

Wir fassen zusammen, dass beide präsentierte Magnetisierungsprofile konsistent mit unserer Vorstellung von kohärenten Zwei-Teilchen-Zuständen sind, wie die Wellenfunktionen des Systems zeigen. Die betrachteten Systeme mit $N_C = 32$ Dimeren stabilisieren zwei kohärente Zwei-Teilchen-Zustände, wobei die Zustände typischerweise den größtmöglichen Abstand einnehmen. Die Wechselwirkung der zwei gebundenen Zustände des Systems untereinander sind vernachlässigbar klein und die Physik größerer System reduziert sich in sehr guter Näherung auf die bereits bekannte Physik von zwei Teilchen in einem System der Länge $L_D = 4$.

5.2.3.3 3/16 Plateau

Wir betrachten zum Abschluß die Lösung des thermodynamischen effektiven Modells auf den Clustern $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ und $\mathcal{C}^{8-4,y}$ für die Dichte 3/16. Die entsprechenden Magnetisierungsprofile sind in Abbildung 5.22 dargestellt. Das periodische System zeigt ein homogenes Magnetisierungsprofil mit starken Magnetisierungen auf den Spins der vertikalen Dimere und schwachen Magnetisierungen auf den Spins der horizontalen Dimere. Die Momente der Magnetisierung haben die Amplituden 0.1719 und 0.0156. Dies weist erneut auf die kohärente Bewegung von Teilchen entlang der y -Richtung hin.

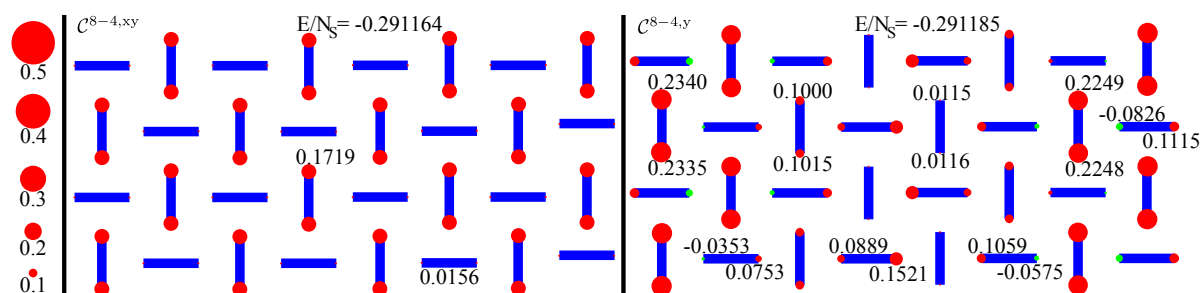


Abbildung 5.22: Wir zeigen die z-Komponente der Magnetisierung auf den Clustern $\mathcal{C}^{8-4,y}$ und $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ bei Dichte $3/16$ für den Störparameter $J'/J = 0.3$. Die effektive Observable ist in Ordnung drei in J'/J angewendet und die Wellenfunktion $|\Phi^{\text{trunk}}\rangle$ wurde auf alle Zustände mit Amplituden größer $\chi = 10^{-5}$ trunziert.

Wir zeigen im rechten Bild von Abbildung 5.22 das Magnetisierungsprofil des offenen Systems $\mathcal{C}^{8-4,y}$. In diesem Magnetisierungsprofil sehen wir ein unterschiedliches Verhalten der Momente am Rand und im Inneren des Systems. Am Rand ist die Magnetisierung im Wesentlichen auf den vertikalen Dimeren. Die Spins der vertikalen Dimere haben eine Amplitude zwischen 0.22 und 0.23. Die horizontalen Dimere zeigen hier erneut ein charakteristisches Magnetisierungsprofil, das ein isoliertes Triplon auf einem vertikalen Dimer auf den benachbarten horizontalen Dimeren zeigt. Im Inneren des Systems finden wir dagegen an den Spins auf vertikalen und horizontalen Dimeren dasselbe Moment und hier sieht die Magnetisierung sehr homogen aus.

A_i	$ i\rangle_{3/16}^{8-4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{3/16}^{8-4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{3/16}^{8-4,xy}$	A_i	$ i\rangle_{3/16}^{8-4,xy}$
-0.1515		0.1515		0.1515		-0.1515	
-0.1515		0.1515		0.1515		-0.1515	
-0.1515		0.1515		0.1515		-0.1515	
-0.1515		0.1515		0.1515		-0.1515	
0.0451		0.0451		0.0451		0.0451	
-0.0451		-0.0451		-0.0451		-0.0451	

Abbildung 5.23: Zusammenfassung der Wellenfunktionen des $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ Clusters bei Dichte $3/16$ für $J'/J = 0.3$. Die Wellenfunktion ist als Überlagerung der relevantesten Zustände dargestellt, wobei wir alle $|A_i| < 0.04$ als relevant bezeichnen. Wir haben einen horizontalen Doppelstrich eingefügt. Oberhalb dieser Markierung zeigen wir Zustände mit Amplitude $|A_i| = 0.1515$, wobei wir nur eine Hälfte der Zustände mit dieser Amplitude zeigen. Unterhalb der Markierung zeigen wir einen Typ von Zuständen mit Amplitude $|A_i| = 0.1515$. Dabei zeigen wir nur ein Viertel der Zustände dieser Amplitude.

Die Grundzustands-Wellenfunktion des Clusters $\mathcal{C}^{8-4,xy}$ ist mit dem bekannten Schema in Tabelle 5.23 dargestellt. Wir sehen, dass die relevantesten Zustände von zwei Streifen-Strukturen aus

drei Teilchen auf vertikalen Dimeren aufgebaut sind. Die zwei Streifen-Strukturen des Systems liegen immer so, dass die Teilchen am Rand des Streifens der Wechselwirkung $A_{(2,2)}^{(2,2),(0,0)}$ unterliegen. Wir finden 32 dieser Zustände, wobei wir 16 der genannten Zustände mit $|A_i| = 0.1515$ in Tabelle 5.23 zeigen. Weiter finden wir einen Typ von Zustand mit Amplitude $|A_i| = 0.0451$. In der Wellenfunktion finden wir 32 Zustände mit dieser Amplitude, wobei wir in der Tabelle 5.23 acht dieser Zustände zeigen. Dieser Typ ist mit den Streifen-Strukturen aus drei Teilchen durch die Anwendung des korrelierten Hüpfterms C_1 verbunden. Der korrelierte Hüpfterm wirkt auf das Teilchen in der Mitte der Streifen-Struktur. Wir sehen, dass die relevanten Zustände des $3/16$ -Plateaus gut mit der präsentierten reduzierten Rechnung in Kapitel 5.1.1.3 übereinstimmen. Wir haben in Kapitel 5.1.1.3 ein $3/16$ Plateau auf einem periodischen System der Länge $L_D = 4$ konstruiert, bei dem wir nur das mittlere Teilchen fluktuieren lassen. Auf einem System mit doppelter Länge finden wir zwei der genannten Streifen-Strukturen, die dominant durch die Fluktuation des mittleren Teilchens beschrieben sind. Das thermodynamische effektive Modell stabilisiert für die Dichte $3/16$ bei $J'/J = 0.3$ Ergebnisse, die konsistent mit dem zuvor präsentierten Ansatz sind.

Wir gehen nun kurz auf die Wellenfunktion des offenen Systems ein, ohne die Wellenfunktion explizit in einer Tabelle anzugeben. In dieser Wellenfunktion sind die relevantesten Zustände erneut durch zwei Streifen-Strukturen aus drei Teilchen auf vertikalen Dimeren gegeben. Die beiden Streifen-Strukturen liegen am Rand des Systems vor und die zwei Spalten im Inneren des Systems sind nicht besetzt. Dies erklärt die starke Magnetisierung auf den vertikalen Dimeren im Magnetisierungsprofil und auch die unmagnetischen vertikalen Dimere im Inneren des Systems. Dabei zeigen die weiteren Zustände mit großen Amplituden, dass die Teilchen einer Streifen-Struktur, die im Inneren des Systems liegen, stark durch korrelierte Hüpfterme und Paar-Fluktuations-Terme delokalisieren. Die Teilchen am Rand des Systems sind nahezu statisch, was man an den starken vertikalen Magnetisierungen sieht. Allgemein sind die Zustände der Wellenfunktion konsistent mit dem Bild von Streifen-Strukturen aus drei Teilchen, wobei im offenen System ein größerer Abstand zwischen den Streifen-Strukturen vorliegt. Dieser Abstand und der offene Rand bewirken, dass die Fluktuationen hauptsächlich die äußeren Teilchen der Streifen-Strukturen fluktuieren lassen. Das mittlere Teilchen fluktuiert auch, aber die Fluktuation dieses Teilchens stellt hier nicht den führenden Mechanismus für den Energiegewinn dar.

Wir fassen zusammen, dass wir mit dem thermodynamischen effektiven Modell auf größeren Systemen sehr konsistent die Physik unserer Ansätze wiederfinden. Das Plateau der Dichte $3/16$ ist aus Streifen-Strukturen aus drei Teilchen aufgebaut und diese Struktur wiederholt sich im System. Die äußeren Teilchen einer Streifen-Struktur bilden ein Gitter, das mit einem diamond $1/8$ -Plateau aus dem zweidimensionalen Modell korrespondiert. Das mittlere Teilchen fluktuiert in diesem Gitter stark entlang der y -Richtung und stellt eine delokalisierte Komponente im System dar.

5.3 Zusammenfassung

Die DMRG und die klassische Betrachtung des thermodynamischen effektiven Modells zeigen Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$. Es existieren aber deutliche Diskrepanzen in der Energie und dem Magnetisierungsprofil. In Kapitel 5.1.1 haben wir rudimentäre Wellenfunktionen für diese Dichten konstruiert, die auf den abschließenden Überlegungen der klassischen Betrachtung aus Kapitel 4 beruhen. Konkret haben wir die Cluster $\mathcal{C}^{4-4,xy}$ und $\mathcal{C}^{4-4,y}$ verwendet und für zwei, drei und vier Teilchen im System relevante Prozesse im System herausgearbeitet. Hier ist besonders der exotische und perturbativ ungewöhnlich starke korrelierte Hüpfterm C_1 aufgefallen. In der rudimentären Betrachtung kann für Dichte $1/8$ ein kohärenter Zwei-Teilchen-Zustand konstruiert werden, der entlang der y -Richtung verschränkt ist. Für Dichte $1/4$ findet man eine semi-klassische Streifen-Struktur. Die rudimentäre Betrachtung von drei Teilchen im System liefert eine Lösung, die sich wie ein Hybrid der Lösungen für $n = 1/8$ und $1/4$ verhält.

Um die rudimentären Ansätze als valide zu bestätigen, haben wir in Kapitel 5.1.2 die ED der effektiven Beschreibung von Clustern genutzt, da so direkt vergleichbare Ergebnisse zur DMRG bestimmt werden. Dabei haben wir kleine Systeme vollständig diagonalisiert und größere Systeme durch die trunkierte effektive Beschreibung behandelt. Es ist uns immer möglich, quantitative Ergebnisse zu bestimmen, was dafür spricht, dass die effektive Beschreibung des Systems korrekt ist. Weiter können wir durch die Betrachtung der Wellenfunktionen bestätigen, dass die rudimentären Ansätze die wesentliche Physik der Systeme beschreiben. Auf größeren Systemen können wir für $n = 1/8$ die Stabilisierung von zwei kohärenten Zwei-Teilchen-Zuständen bestätigen. Unsere Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Wechselwirkungen der kohärenten Zustände untereinander vernachlässigbar klein sind und dass die Physik durch Zwei-Teilchen-Prozesse bestimmt wird. Analoges gilt für $n = 1/4$, wo wir eine längere Streifen-Struktur im größeren System feststellen. Die Streifen-Struktur für $n = 1/4$ ist eine topologisch reduzierte Analogie zu der identischen Streifen-Struktur der Dichte $1/4$ im zweidimensionalen Modell.

Um die Ansätze auch als relevant im thermodynamischen Limes zu bestätigen, haben wir in Kapitel 5.2 das thermodynamische effektive Modell über ED auf endlichen Systemen gelöst. Die Phasendiagramme für verschiedene Cluster deuten auf die Stabilisierung von Plateaus der Dichte $1/8$ und $1/4$ zwischen $0 < J'/J < 0.5$ hin. Wir finden weiter ein Plateau der Dichte $3/16$ für kleine J'/J , das für größere Werte von J'/J nicht stabilisiert ist. Die Wellenfunktionen zeigen hier wieder, dass die Physik der Plateaus der Dichten $n = 1/8$, $3/16$ und $1/4$ unseren Vorstellungen entspricht. Die Diskussion des thermodynamischen effektiven Modells hat die Ansätze weiter untermauert, so dass wir überzeugt sind die relevante Physik des thermodynamischen Limes bestimmt zu haben.

Kapitel 6

Zweidimensionales Modell

Bislang haben wir uns im Wesentlichen mit der Shastry-Sutherland-4-Bein-Röhre für niedrige Dichten $n \leq 1/4$ beschäftigt. Unsere Ergebnisse zeigen prominente Plateaus der Dichten $1/8$ und $1/4$ und wir konnten mikroskopische Erklärungen für die Ergebnisse liefern, die sich analog zur Erklärung von Phänomenen im zweidimensionalen Modell übertragen lassen. Wir haben insbesondere auf der 4-Bein-Röhre eine Analogie zur zweidimensionalen Streifen-Struktur gefunden. Dies motiviert uns von theoretischer Seite das zweidimensionale Modell zu betrachten und uns auf das Dichtregime $1/4 \leq n \leq 1/2$ zu konzentrieren, das hauptsächlich durch Streifen-Strukturen bestimmt ist [86] [81] [57]. Weiter liegen experimentelle Daten aus Arbeit [57] für das Dichteregime $1/4 \leq n \leq 1/2$ vor. In dieser Arbeit wurde die Magnetisierungskurve von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ in sehr hohen Magnetfeldern bis 118 T gemessen. Bleiben wir für das folgende Kapitel in der Teilchensprache, so wurden konkret die Breiten der Plateaus bei Dichte $n = 1/3$ und $1/2$ bestimmt, wobei die Breite des $1/2$ -Plateaus in Arbeit [57] zum ersten Mal vollständig erfasst wird.

Im folgenden Unterkapitel 6.1 beschreiben wir die methodischen Aspekte. Genauer gesagt soll ein System bei fester Dichte n beschrieben werden, dass eine Streifen-Struktur stabilisiert. Die wesentliche Idee zur Beschreibung des System liegt darin, das Teilchen-Bild vollständig zu übernehmen und den Hamiltonoperator des Shastry-Sutherland-Modells so zu deformieren, dass wir Methoden der Störungs-Reihenentwicklungen zu hohen Ordnungen anwenden können. Zu einem Plateau der Dichte n bestimmen wir die Grundzustandsenergie E_0^n . Weiter definieren wir Teilchen- und Loch-Anregungen in den Streifen-Strukturen bei $n = 1/2$ und $n = 1/3$ und betrachten die Energielücken Δ_{T}^n und Δ_{L}^n dieser Anregungen. Wir gehen dann auf den experimentellen Teil der Arbeit [57] in Unterkapitel 6.2 ein. In Unterkapitel 6.3 diskutieren wir die Ergebnisse der Grundzustandsenergie und im anschließenden Unterkapitel 6.4 betrachten wir das Verhalten der Anregungen der Plateaus. Wir fassen die Ergebnisse in einem Phasendiagramm zusammen, das wir mit Ergebnissen anderer Methoden aus Arbeit [57] in Unterkapitel 6.5 vergleichen.

6.1 Methodisches Vorgehen

Unser Ziel ist es in diesem Unterkapitel, eine Beschreibung der experimentellen Magnetisierungsplateaus im Bereich mittlerer Dichte zu entwickeln. Dabei interessieren uns im Speziellen die Stabilitätsbereiche der Plateaus der Dichte $1/4$, $1/3$, $2/5$ und $1/2$. Als Stabilitätsbereich definieren wir die Breite des Plateaus zwischen den Feldstärken h_A^n und h_B^n .

Als theoretisches Werkzeug zur Beschreibung eines Plateaus nutzen wir verschiedene Methoden der Linked-Cluster-Expansion (LCE). Wir haben über die LCE in Kapitel 2.1.2 bereits gesprochen. Im Wesentlichen hat das effektive Modell, auf das wir abzielen, die universelle Gestalt 2.21. Die eigentliche Aufgabe besteht nun in der Bestimmung der Koeffizienten $A_{i_n, \dots, i_1}^{\vec{j}_n, \dots, \vec{j}_1}$, was wir bislang immer mit Hilfe der PCUT durchgeführt haben. Mit der PCUT hat sich diese Struktur per Konstruktion ergeben, aber die Gestalt 2.21 ist ein allgemeinerer Ansatz und resultiert auch aus anderen perturbativen Methoden. Die unitäre Transformation, die die Gestalt 2.21 erreicht, ist nicht eindeutig und so können die Koeffizienten $A_{i_n, \dots, i_1}^{\vec{j}_n, \dots, \vec{j}_1}$ aus verschiedenen Methoden unterschiedlich sein. Da die Transformation aber immer unitär ist, sind die physikalischen Observablen eindeutig, so dass man in der Wahl der Methode frei ist, innerhalb einer Rechnung aber konsistent bei einem Verfahren bleiben muss. Wir gehen nun auf Details ein und nehmen vorweg, dass wir neben der PCUT auch die Takahashi-Störungstheorie [154] [155] und den Löwdin-Formalismus [156] genutzt haben. Mit diesen Methoden erreichen wir für dieses Problem typischerweise eine höhere Ordnung als mit PCUT-Rechnungen.

Die Magnetfelder h_A^n und h_B^n können aus der Grundzustandsenergie E_0^n oder der Teilchen- und Loch-Lücke Δ^T bzw. Δ^L bestimmt werden, abhängig davon, ob an den Punkten h_A^n und h_B^n ein kritischer Punkt oder ein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt. Als Phasenübergang erster Ordnung verstehen wir im Folgenden immer einen Übergang zu einem Plateau anderer Dichte n' . Die Energie eines Plateaus der Dichte n im endlichen Feld h ist nach Formel 3.36 über eine Geradengleichung gegeben, in der das Feld h und die Dichte n die Steigung der Geraden bestimmen. Der eben genannte Phasenübergang erster Ordnung tritt ein, wenn sich die Geradengleichungen von zwei Plateaus unterschiedlicher Dichte n und n' an einem Punkt h_A^n oder h_B^n schneiden. h_A^n bzw. h_B^n legen in diesem Fall den Punkt im Phasendiagramm fest, an dem das System von einem Plateau in ein weiteres Plateau anderer Dichte springt. Schließt hingegen eine der Anregungslücken an den Feldstärken h_A^n und h_B^n , noch bevor das System einen Phasenübergang erster Ordnung vollzieht, kondensieren die Anregungen und das Plateau wird instabil. Da es sich bei diesen Kondensations-Phänomenen um Phasenübergänge zweiter Ordnung handelt, können die Stabilitätsgrenzen typischerweise mit perturbativen Verfahren gut bestimmt werden.

Wie erläutert sieht unser Ansatz vor, die konkreten Vorschläge für die Plateaus einzeln zu betrachten und die Ergebnisse für h_A^n und h_B^n nachträglich zu einem Phasendiagramm zusammenzufassen. Dabei ist man in der Beschreibung auf die Übergänge beschränkt, die man berechnet hat. Da wir die folgenden Rechnungen aber mit sehr konkreten Erwartungen an das Phasendiagramm durchführen, ist dies unproblematisch. Zudem ist die folgende Beschreibung der Plateaus auch nur für die Plateau-Phase gültig. Wir haben bereits angesprochen, dass im Material (in

guter Näherung) und in theoretischen Arbeiten, suprakristalline Phasen gefunden werden. In unserem Schema treten diese Phasen auf, wenn ein Plateau durch einen kritischen Punkt instabil wird und Anregungen des Plateaus kondensieren. Unsere Beschreibung kann aber keine Aussagen innerhalb der suprakristallinen Phasen treffen.

Der Mechanismus des Übergangs erster Ordnung ist dadurch bestimmt, dass die Energie eines Plateaus anderer Dichte im externen Feld h günstiger wird. Die feldabhängige Grundzustandsenergie E_h^n eines Plateaus mit N_{t+} Teilchen im externen Feld h ist gegeben als

$$E_h^n = E_0^n - N_{t+} \cdot h \quad . \quad (6.1)$$

Hier normieren wir die Energien nicht auf die Anzahl der Spins im System N_S , sondern auf die Anzahl der Dimere im System N_D . Die Gleichung 6.1 lässt sich daher auch in $E_h^n/N_D = E_0^n/N_D - n \cdot h$ mit der bekannten Dichte $n = N_{t+}/N_D$ umschreiben. Zusammengefasst können wir einen Phasenübergang erster Ordnung zwischen zwei Plateaus der Dichte n und n' am Punkt $E_h^n = E_h^{n'}$ mit

$$(h_{\text{A oder B}}^n)^{\text{Erste Ordnung}} = \frac{(E_0^n/N_D) - (E_0^{n'}/N_D)}{n - n'} \quad (6.2)$$

identifizieren. Dazu müssen wir die Energien der beiden Plateaus in der feldfreien Betrachtung E_0^n und $E_0^{n'}$ berechnen.

Die Magnetfelder h_A^n und h_B^n aus der Betrachtung der Grundzustandsenergie konstruieren ein (provisorisches) Phasendiagramm des Systems, das nur Phasenübergänge erster Ordnung enthält. Das Phasendiagramm ist gegebenenfalls um die angesprochenen kritischen Punkte der Plateaus zu erweitern. Ein Übergangspunkt zwischen zwei Plateau-Phasen ist nur relevant, wenn die kritischen Felder der Plateaus einen überlappenden Magnetfeld-Bereich zeigen. Schließt die Lücke eines Plateaus noch vor einem Energie-Schnittpunkt mit einem anderen Plateau, ist das Plateau nur bis zum kritischen Punkt stabil und der Schnittpunkt der zwei Energiegeraden hat keine physikalische Bedeutung mehr. An einem kritischen Punkt wird ein Übergang von einem Plateau in eine suprakristalline Phase beschrieben, wobei beide Phasen einen stetigen statischen Strukturfaktor zeigen, d.h. dass beide Phasen dieselbe Kommensurabilität haben.

Wir haben das (theoretische) iPEPS-Ergebnis für das Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells aus unserer Arbeit [57] in Kapitel 1.6 im rechten Bild der Abbildung 1.14 bereits gezeigt. Das Bild zeigt, dass die beiden beschriebenen Szenarien in der theoretischen Beschreibung des Modells im Magnetfeld relevant sind. Die Phasenübergänge erster Ordnung zwischen zwei Plateaus, die im Material auftreten, können mit unserem Schema direkt bestimmt werden. Weiter treten Phasenübergänge zweiter Ordnung auf. Ein Beispiel dafür ist der Übergang von einem 1/3-Plateau in einen 1/3-Suprakristall. Die von der iPEPS in Bild 1.14 bestimmten Übergänge von einer suprakristallinen Phase in eine andere suprakristalline Phase können durch unsere Methoden nicht nachvollzogen werden. Eine weitere Schwierigkeit zeigt sich beim 1/2-Plateau. In Bild 1.14 zeigen die iPEPS-Ergebnisse einige Bereiche im Phasendiagramm, in denen ein Übergang

vom 1/2-Plateau zu einem 1/3-Suprakristall stattfindet. Wir erinnern daran, dass die Komensurabilität beider Phasen verschieden ist. Es liegt deswegen ein Übergang erster Ordnung vor. Dieser kann durch unsere Methoden nicht bestimmt werden, da wir die Grundzustandsenergie der suprakristallinen Phase nicht bestimmen können. Zusammenfassend können wir mit Methoden der Reihenentwicklung einen Großteil der Physik des Phasendiagramms beschreiben.

Die Berechnung der Grundzustandsenergie E_0^n mit LCE-Methoden für ein Plateau der Dichte n benötigt einen eindeutigen Referenz-Zustand $|\Phi_0^n\rangle$ in einer effektiven Beschreibung. Die effektive Beschreibung (das Teilchen-Bild) wird vom ungestörten Anteil des Hamiltonoperators bestimmt. Details haben wir in Unterkapitel 3.1.1 beschrieben. Die Idee besteht darin, einen Ansatz für den Referenz-Zustand zu nehmen, der bereits eine gute (effektive) Beschreibung der Physik eines Plateaus liefert. Konkret erwarten wir für die Plateaus, dass im effektiven Teilchen-Bild Streifen-Strukturen die wesentliche mikroskopische Komponente des Zustandes sind und somit einen guten Startpunkt darstellen. Die effektive Beschreibung des Systems mit einem effektiven Hamiltonoperator (wie der effektive Hamiltonoperator der PCUT $H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}}$) erfasst dann die fehlenden Bestandteile des wahren Zustandes. Die Grundzustandsenergie E_0^n für den Referenz-Zustand $|\Phi_0^n\rangle$ kann z. B. mit der PCUT nach der Formel (analog zu Formel 2.31)

$$E_0^n = \langle \Phi_0^n | H_{\text{eff}}^{\text{PCUT}} | \Phi_0^n \rangle \quad (6.3)$$

bestimmt werden.

Wir betrachten ein System bei fester Dichte n . Genauer gesagt sei ein System als Cluster aus $N_C = N_D$ Dimer-Plätzen mit einer festen Anzahl an Teilchen N_{t+} im System gegeben, so dass die Dichte $n = N_D/N_C$ vorliegt. In dem Unterraum der System-Zustände fester Dichte n ist die genannte Streifen-Struktur nur eine Teilchen-Belegung unter weiteren Belegung, die Grundzustand zum ungestörten Hamiltonoperator \mathcal{H}_0 sind. Wir beschäftigen uns anschließend damit, einen gewünschten Referenz-Zustand $|\Phi_0^n\rangle$ unter den Zuständen der Dichte n energetisch als eindeutigen Grundzustand im ungestörten Spektrum zu realisieren. Zunächst geben wir die Streifen-Strukturen der genannten Dichten 1/4, 1/3, 2/5 und 1/2 an.

Aus der Literatur zur Theorie des Shastry-Sutherland-Modells, zusammen mit den Ergebnissen für das 1/4-Plateau auf der 4-Bein-Röhre dieser Arbeit, ergibt sich die mikroskopische Struktur der Plateaus für mittlere Dichten durch Streifen-Strukturen von Teilchen. Die Streifen-Strukturen sind keine Eigenzustände des Hamiltonoperators und Quanten-Fluktuationen müssen in diesem Bild ergänzt werden. Im Hinblick auf unser Schema sind deswegen die (nackten) Streifen-Strukturen aus Teilchen vermutlich ein guter Startpunkt. Wir geben in Bild 6.1 die (nackten) Streifen-Strukturen bei Dichte 1/4, 1/3, 2/5 und 1/2 an. Liegt in einem makroskopischen System eine kommensurable symmetriegebrochene Struktur vor, so spricht man auch von einer Super-Struktur. Die Super-Struktur kann durch eine Einheitszelle erfasst werden, die die kristallographisch verschiedenen Punkte der Super-Struktur angibt (siehe Abbildung 6.1).

Methodisch hat es sich als günstig erwiesen, periodische Cluster für die Rechnungen zu verwenden. Wir zielen zudem auf die Nutzung der Takahashi-Störungstheorie ab, die aus methodischen

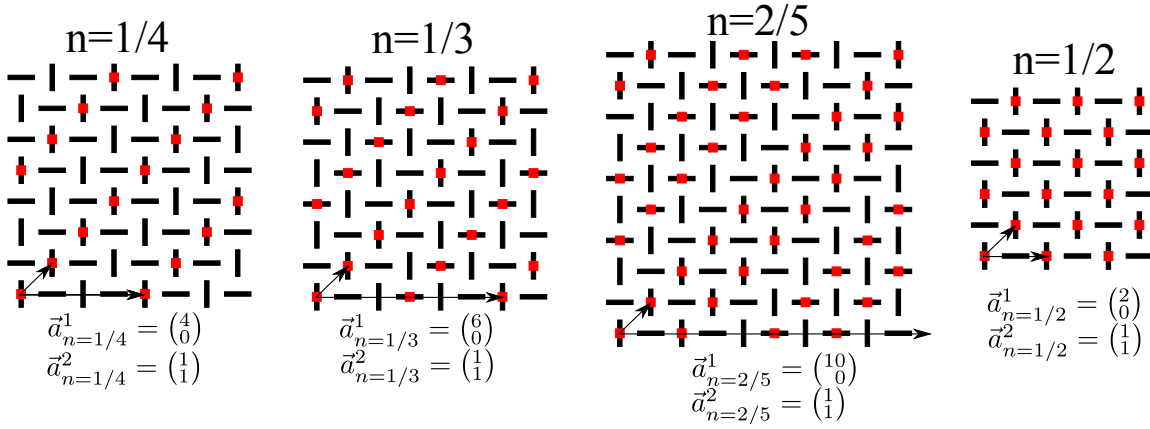


Abbildung 6.1: Auschnitte der Super-Strukturen von Streifen-Strukturen entlang der Raumrichtung $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ der relevanten Dichten n aus einem makroskopischen System. Schwarze Balken illustrieren das Shastry-Sutherland-Gitter und rote Quadrate stehen für die Teilchen-Anregungen (t^+ -Triplets). Die kristallographisch verschiedenen Plätze liegen in den mit Pfeilen eingezeichneten Einheitszellen mit Vektoren $\vec{a}^1 = \begin{pmatrix} \gamma \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\vec{a}^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Die Länge γ variiert für verschiedene Dichten.

Aspekten eine Verwendung von periodischen Clustern erfordert [155]. Bei der Beschreibung einer Streifen-Struktur der Dichte n dürfen nur periodische Cluster einbezogen werden, die kommensurabel zur Einheitszelle der entsprechenden Super-Struktur sind. In Abbildung 6.1 haben wir die Vektoren der Einheitszellen \vec{a}_n^1 und \vec{a}_n^2 unter den Super-Strukturen angegeben. Die Kommensurabilität der Cluster der Rechnung ist für ein System bei Dichte $1/2$ besonders einfach. Die Super-Struktur entspricht dem halbgefüllten System und bricht die Translationssymmetrie nicht, weshalb die Einheitszelle der Super-Struktur und des ursprünglichen Gitters identisch sind.

Die Streifen-Strukturen in Abbildung 6.1, die in die Raumrichtung $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ orientiert sind, sind nicht eindeutig. Durch Translationen oder die Nutzung des Vektors $\vec{a}^2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ (statt $\vec{a}^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$) für die Einheitszelle, finden wir weitere energetisch entartete Kandidaten für einen Referenz-Zustand. Im thermodynamischen Limes koppeln verschiedene Streifen-Strukturen aber nicht und wir können mit einem herausgegriffenen symmetriegebrochenen Referenz-Zustand arbeiten. Auf endlichen Systemen liegt zwar eine Kopplung verschiedener Referenz-Zustände vor, diese Kopplung trägt aber erst in vernachlässigbar hoher Ordnung bei. Daher betrachten wir im Folgenden eine herausgegriffene Streifen-Struktur als eindeutigen Referenz-Zustand.

Wir gehen nun dazu über den (ursprünglichen) Hamiltonoperator des Shastry-Sutherland-Modells im Magnetfeld B

$$\mathcal{H}_{\text{Shastry-Sutherland}} = J \sum_{(\vec{i}, \vec{j})} \vec{S}_{\vec{i}} \cdot \vec{S}_{\vec{j}} + J' \sum_{[\vec{i}, \vec{j}]} \vec{S}_{\vec{i}} \cdot \vec{S}_{\vec{j}} + B \sum_i S_i^z = J\mathcal{H}_0 + J'\mathcal{V} + B\mathcal{H}_{\text{Feld}} \quad (6.4)$$

zu modifizieren. Es sei angemerkt, dass wir nun kurzzeitig auf die Konvention verzichten, alle Formeln auf J normiert zu betrachten. Um die präsentierten Streifen-Strukturen als eindeutigen Grundzustand $|\Phi_0^n\rangle$ zu stabilisieren, beginnen wir damit ein Magnetfeld $\mathcal{H}_{\text{Feld}}$ der Stärke J zu \mathcal{H}_0 zu addieren. Um die Äquivalenz zum ursprünglichen Modell wiederherzustellen, muss das addierte Magnetfeld der Stärke J wieder subtrahiert werden. Diesen Anteil subtrahieren wir

nachträglich, zusammen mit dem externen Magnetfeld, wenn wir das Ergebnis im endlichen Feld betrachten.

Wir haben ein Feld der Stärke J zum ungestörten Teil des Hamiltonoperators addiert, so dass für $B = J$ der Singulett-Zustand $|s\rangle$ und der Triplett-Zustand $|t^+\rangle$ entartet sind. Im entarteten Punkt sind das t^0 -Triplett um eine Energie-Einheit J und das Triplett t^- um $2J$ vom Singulett und dem t^+ -Triplett getrennt. Betrachten wir ein System bei fester Dichte n , so haben wir nun ein System bei dem alle Zustände mit ausschließlich t^+ -Triplets entartet sind mit der ungestörten Energie $E_0^n = 0$. Wir addieren nun einen weiteren Term zum ungestörten Hamiltonoperator \mathcal{H}_0 , um aus den Zuständen der Dichte n die Streifen-Strukturen als eindeutige Referenz-Zustände $|\Phi_0^n\rangle$ herauszugreifen.

Den angesprochenen zusätzlichen Term bezeichnen wir als \mathcal{H}_{WW} (WW für Wechselwirkung). \mathcal{H}_{WW} beschreibt repulsive Dichte-Dichte-Wechselwirkungen zwischen t^+ -Triplets mit einer Amplitude J . Wir wechseln nun zurück zu unserer Konvention, alle Formeln und Hamiltonoperatoren auf J normiert zu betrachten. Der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator \mathcal{H}_{WW} ist dann definiert als

$$\mathcal{H}_{\text{WW}} = \sum_{\vec{i}} n_{\vec{i}} \sum_{\vec{j} \in \Omega^{(n)}} n_{\vec{j}} \quad . \quad (6.5)$$

Der Zähleroperator für t^+ -Triplets ist wie üblich definiert. Die Definition von \mathcal{H}_{WW} ist so zu verstehen, dass jeder Platz \vec{i} eine Wechselwirkungszone $\Omega^{(n)}$ besitzt. Die Wechselwirkungszone ist für jede Dichte n typischerweise unterschiedlich. Ist der Platz \vec{i} und ein Platz aus der Wechselwirkungs-Zone $\Omega^{(n)}$ jeweils mit einem t^+ -Triplett belegt, entstehen die Wechselwirkungskosten 1. Die Wechselwirkungen $\Omega^{(n)}$ sind für eine Dichte n so gewählt, dass die Verschiebung eines Triplets aus den präsentierten Streifen-Strukturen, eine Wechselwirkung verursacht. Durch die Wechselwirkungen ist garantiert, dass nur die betrachteten Streifen-Strukturen den eindeutigen Referenz-Zustand des Systems $|\Phi_0^n\rangle$ für Dichte n liefern. Typischerweise wählen wir die Wechselwirkungszone $\Omega^{(n)}$ für alle Teilchen gleich und führen nur zwei verschiedene Zonen für vertikale und horizontale Plätze ein, wenn es nötig ist.

Wir bringen unseren Ansatz nun in eine störungstheoretische Form, indem wir den Störparameter x einführen und definieren

$$\mathcal{H}_{\text{Mod}} = \underbrace{(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{Feld}} + \mathcal{H}_{\text{WW}})}_{\mathcal{H}_0} + x \underbrace{\left(\frac{J'}{J} \cdot \mathcal{V} - \mathcal{H}_{\text{WW}} \right)}_{\mathcal{V}} + (h - 1) \cdot \mathcal{H}_{\text{Feld}} \quad (6.6)$$

$$= \mathcal{H}'_0 + x \cdot \mathcal{V}' + (h - 1) \cdot \mathcal{H}_{\text{Feld}} \quad (6.7)$$

Für $x = 0$ besteht der Hamiltonoperator nur aus dem modifizierten ungestörten Hamiltonoperator \mathcal{H}'_0 . Hierbei handelt es sich um einen (verallgemeinerten) Zähleroperator, der die Anregungen im System zählt. Aufgrund des addierten Magnetfeldes verursachen nur die Triplets t^0 und t^-

Kosten oder der ungestörte Hamiltonoperator \mathcal{H}'_0 zählt weiter die ad hoc eingeführten Wechselwirkungen zwischen t^+ -Triplets, wenn eine Belegung verschieden von der Streifen-Struktur vorliegt. Die erweiterte Störung \mathcal{V}' ist aus der ursprünglichen Störung \mathcal{V} (proportional zu J'/J) und der Subtraktion der (in \mathcal{H}'_0) addierten repulsiven Wechselwirkungen gegeben. Beide Terme bilden die modifizierte Störung \mathcal{V}' , die proportional zu dem Störparameter x ist. Der Ansatz ist so konstruiert, dass für $x = 1$ das ursprüngliche Shastry-Sutherland-Modell wiederhergestellt wird.

Wir geben nun die konkreten Wechselwirkungen $\Omega^{(n)}$ an, die nötig sind um die Streifen-Strukturen der Dichten $1/4$, $1/3$, $2/5$ und $1/2$ (siehe Abbildung 6.1) als eindeutigen Grundzustand $|\Phi_0\rangle$ zu stabilisieren. Die Wechselwirkungen $\Omega^{(n)}$ werden zudem in Abbildung 6.2 graphisch dargestellt. Wir beginnen mit dem Plateau der Dichte $n = 1/2$. Hier ist es ersichtlich, dass die Umpositionierung eines Teilchens von einem vertikalen Dimer aus der Streifen-Struktur auf einen horizontalen Dimer dazu führt, dass zwei Teilchen nächste Nachbarn sind. Wählt man $\Omega^{n=1/2}$ nun als Summe der Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen eines Platzes, so greift dies die Streifen-Struktur als eindeutigen Grundzustand des Systems heraus. $\Omega^{n=1/2}$ als Summe aller Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen zu wählen ist zudem physikalisch plausibel, da die genannten Wechselwirkungen im effektiven Modell V_1 entsprechen und V_1 die dominante Wechselwirkung ist.

Für das Plateau der Dichte $n = 1/2$ zeigen wir im rechten Bild von Abbildung 6.2, dass ein belegter vertikaler Dimer keiner Nächste-Nachbar-Wechselwirkung unterliegt, ist das System in der Streifen-Struktur. Wir haben zudem die Wechselwirkungen eingezeichnet, denen ein Teilchen auf einem horizontalen Platz unterliegt. Jedes Teilchen im System hat dieselbe Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/2}$, unabhängig von der Orientierung des Dimers.

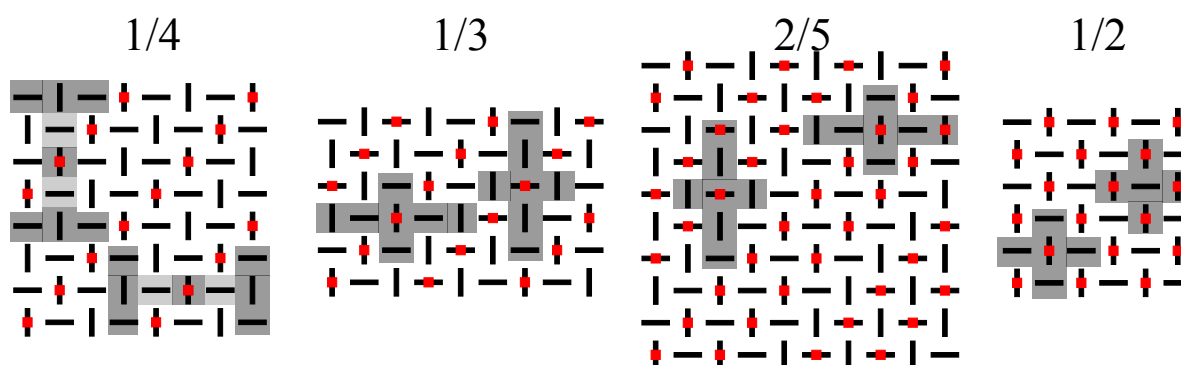


Abbildung 6.2: Wir zeigen für die verschiedenen Streifen-Strukturen den Satz an Wechselwirkungen $\Omega^{(n)}$, der im Hamiltonoperator \mathcal{H}_{WW} einbezogen wird. Teilchen sind als rote Quadrate eingezeichnet. Befindet sich (für jedes Teilchen) im dunkelgrau gefärbten Bereich des Teilchens ein weiteres Teilchen, so sind die Kosten 1 zu zahlen. Im Plateau der Dichte $1/4$ ist darauf zu achten, dass wir die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung nicht zu $\Omega^{n=1/4}$ einbeziehen. Weiter sind für das Plateau der Dichte $2/5$ die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen der Streifen-Struktur aus dem Hamiltonoperator \mathcal{H}_{WW} zu entfernen.

Wir kommen nun zu einer methodischen Anmerkung, die speziell die PCUT betrifft. Die Anmerkung betrifft die Störung $\mathcal{V}' = J'/J \cdot \mathcal{V} - \mathcal{H}_{\text{WW}}$. Der Störanteil des (ursprünglichen) Shastry-Sutherland-Modells \mathcal{V} wurde von uns im feldfreien Fall als $\mathcal{V} = T_{-1} + T_0 + T_{+1}$ (siehe Kapitel

3.1.3) dargestellt. Die Störung \mathcal{V} kann also nur ein Teilchen erzeugen bzw. vernichten und die Flavour benachbarter Teilchen ändern (siehe Tabelle 3.1). In unserem Schema wird aber nun die modifizierte Störung \mathcal{V}' , die den Anteil \mathcal{H}_{WW} enthält, einbezogen. Entsteht in der Rechnung durch die Wirkung der Störung ein (virtuelles) Teilchen, so müssen entweder die Kosten für das Teilchen bezahlt werden (wenn das Teilchen einem Triplet mit Flavour $|t^0\rangle$ oder $|t^-\rangle$ entspricht) oder es müssen die Wechselwirkungen dieses Teilchens mit den anderen Teilchen bezahlt werden, falls es sich bei beiden Teilchen um t^+ -Triplets handelt. Wir sehen also, dass der Störterm eine numerisch deutlich aufwendigere Gestalt haben muss. Es gilt für die PCUT

$$\mathcal{V}' = T_{-N_\Omega} + T_{-N_\Omega+1} + \dots + T_{N_\Omega-1} + T_{N_\Omega} \quad . \quad (6.8)$$

N_Ω gibt die Anzahl an Energielevels an, die die Störung durch eine Wirkung maximal aufsteigen bzw. absteigen kann. Der Wert von N_Ω hängt von der betrachteten Wechselwirkungszone $\Omega^{(n)}$ ab. Wir erläutern erhöht ein größerer Wert von N_Ω normalerweise den numerischen Aufwand deutlich, da alle (teilchenzahlerhaltenden) Kombinationen $T(\mathbf{m})$ (siehe Kapitel 2.1.1) für die PCUT bestimmt werden müssen.

Im Fall des 1/2-Plateaus mit der angesprochenen Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/2}$ ist $N_\Omega = 4$. Wir veranschaulichen dies anhand von Bild 6.3. In Bild 6.3 betrachten wir beispielhaft die Prozesse $\left(t_i^+\right)^\dagger \cdot \left(t_{i+\vec{e}_x}^0\right)^\dagger \cdot t_i^+ \cdot s_{i+\vec{e}_x}$ und $\left(t_i^0\right)^\dagger \cdot \left(t_{i+\vec{e}_x}^+\right)^\dagger \cdot t_i^+ \cdot s_{i+\vec{e}_x}$. Diese Prozesse treten in der effektiven Behandlung der (ursprünglichen) Störung \mathcal{V} und damit auch in der modifizierten Störung \mathcal{V}' auf (siehe Kapitel 3.1.3). Konkret wird in diesen Prozessen ein Teilchen auf einen unbesetzten Platz eingefügt, wobei das Teilchen die Flavour $|t^0\rangle$ oder $|t^+\rangle$ hat. Im ursprünglichen Modell erzeugen diese Terme aber immer nur ein Teilchen mit Kosten 1 und sind damit im T_{+1} -Block der Störung enthalten. Durch die Addition der Wechselwirkungen in \mathcal{V}' muss nun auf die genauen Kosten des eingefügten Teilchens geachtet werden.

In Abbildung 6.3 sehen wir im Bild links oben, dass die Polarisation eines Singulets zu einem t^0 -Triplet die Kosten eins hat, denn dieses Triplet-Flavour wechselwirkt nicht in \mathcal{H}'_0 . Betrachten wir die Zerlegung der Störung, so ist der Prozess $\left(t_i^+\right)^\dagger \cdot \left(t_{i+\vec{e}_x}^0\right)^\dagger \cdot t_i^+ \cdot s_{i+\vec{e}_x}$ erneut nur im T_{+1} -Block enthalten. Betrachten wir nun den Prozess $\left(t_i^0\right)^\dagger \cdot \left(t_{i+\vec{e}_x}^+\right)^\dagger \cdot t_i^+ \cdot s_{i+\vec{e}_x}$, so ersetzt dieser ein t^+ -Triplet durch ein t^0 -Triplet und polarisiert ein benachbartes Singulett zu einem t^+ -Triplet (siehe in Abbildung 6.3 links unten). Dieses t^+ -Triplet befindet sich nun als Nächster-Nachbar zu drei anderen t^+ -Triplets (von der Streifen-Struktur). Die Kosten für das t^0 -Triplet und die drei Wechselwirkungen summieren sich zu 4, so dass der Prozess $\left(t_i^0\right)^\dagger \cdot \left(t_{i+\vec{e}_x}^+\right)^\dagger \cdot t_i^+ \cdot s_{i+\vec{e}_x}$ in T_{+4} von \mathcal{V}' einbezogen werden muss. Da Wechselwirkungen nur auftreten, wenn ein t^+ -Triplet auf einen anderen Platz verschoben und dann ein t^0 -Triplet auf dem ursprünglichen Platz erzeugt wird, sind drei Wechselwirkungen auch die höchsten Kosten, die ein t^+ -Triplet durch einmaliges Wirken von \mathcal{V}' erzeugen kann. Daher ist für das 1/2-Plateau (mit den präsentierten Wechselwirkungen $\Omega^{n=1/2}$) die maximale Anzahl an erzeugten Anregungen pro Wirkung mit \mathcal{V}' durch $N_\Omega = 4$ gegeben. Weiter sei angemerkt, dass während einer Rechnung bereits weitere Teilchen einer Streifen-Struktur durch t^0 -Triplets ersetzt werden sein können. Daher muss der

Prozess $\left(t_i^0\right)^\dagger \cdot \left(t_{i+\vec{e}_x}^+\right)^\dagger \cdot t_i^+ \cdot s_{i+\vec{e}_x}$ in den Blöcken T_{+4}, T_{+3}, T_{+2} und T_{+1} aufgenommen werden, da nicht zwangsläufig drei t^+ -Teilchen als Nächste-Nachbarn des erzeugten t^+ -Teilchens vorliegen werden.

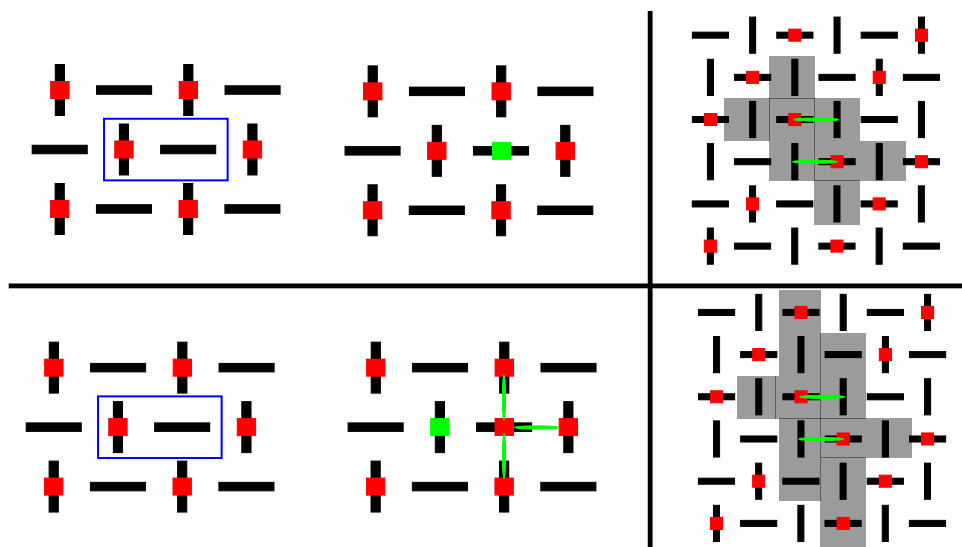


Abbildung 6.3: Wir zeigen auf der linken Seite zwei Prozesse, die durch die Störung V' induziert werden. Rote Quadrate zeigen $|t^+\rangle$ -Triplets und grüne Quadrate zeigen $|t^0\rangle$ -Triplets. Der obere Prozess zeigt eine Wirkung zwischen den blau eingerahmten Plätzen, wobei ein $|t^0\rangle$ -Triplet auf dem zuvor leeren Platz erzeugt wird. Die Energiedifferenz vor und nach dem Prozess ist 1. Der untere Prozess lässt das $|t^+\rangle$ -Triplet hüpfen und erzeugt ein $|t^0\rangle$ -Triplet am zuvor besetzten Platz. Dieser Prozess erzeugt Wechselwirkungen, die als grüne Linie eingezeichnet sind und hier ist die Energiedifferenz 4. Auf der rechten Seite zeigen wir eine zu kleine (oben) und die von uns genutzte (unten) Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/3}$ für das $1/3$ -Plateau, angewendet auf eine fast perfekte Streifen-Struktur.

Die Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/3}$ für das $1/3$ -Plateau muss aufgrund der Abstände zwischen den Teilchen-Streifen der Streifen-Struktur zwingend größer sein als $\Omega^{n=1/2}$. Die einbezogenen Wechselwirkungen korrespondieren im effektiven Modell zu den beiden dominanten Wechselwirkungen V_1 und V_3 . Dies bedingt, dass die Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/3}$ für vertikale und horizontale Plätze sich um eine 90° -Drehung unterscheiden.

Wir zeigen in Abbildung 6.3 im Bild rechts oben anhand eines Gegenbeispiels, dass $\Omega^{n=1/2}$ allein, die Streifen-Struktur für Dichte $1/3$ nicht als eindeutigen Referenz-Zustand $|\Phi_0^n\rangle$ festlegt. Konkret zeigen wir eine Streifen-Struktur, bei der wir auf zwei Teilchen den dominanten Paar-Fluktuations-Term angewendet haben, um das Gegenbeispiel zu konstruieren. Wir haben die Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/2}$ in diesem Zustand für die verschobenen Teilchen eingetragen. Dieser Zustand, der sich von der Streifen-Struktur unterscheidet, hat die Dichte $1/3$, aber mit $\Omega^{n=1/2}$ bezahlt der Zustand keine Wechselwirkungskosten und ist entsprechend ein weiterer Grundzustand. Um die Streifen-Struktur nun als eindeutigen Grundzustand $|\Phi_0^n\rangle$ zu realisieren, muss die Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/3}$ vergrößert werden. Vergrößern wir die Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/3}$ auf die von uns genutzte Zone $\Omega^{n=1/3}$, so liegen im Zustand des Gegenbeispiels nun Wechselwirkungen vor (siehe Abbildung 6.3 rechts unten).

Die Wahl der Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/3}$ ist zwar physikalisch plausibel, aber immer noch ein empirischer Ansatz. Prinzipiell kann die Zone $\Omega^{n=1/3}$ auch anders geformt sein und immer noch die Streifen-Struktur als Grundzustand $|\Phi_0^n\rangle$ auszeichnen. Dabei ist die von uns physikalisch motivierte Wahl die kleinste Zone, die dies leistet, was die Zahl N_Ω möglichst gering hält. Wir erinnern daran, dass die Größe der Wechselwirkungszone den numerischen Aufwand beeinflusst, aber nur ein (theoretisches) Hilfsmittel darstellt. Das Shastry-Sutherland-Modell wird für den Störparameter $x = 1$ wiederhergestellt und in diesem Fall heben sich die Terme des Hamiltonoperators \mathcal{H}_{WW} des Ansatzes 6.6 weg. Die Wahl der Wechselwirkungszone spielt für das exakte Endergebnis keine Rolle. Für die präsentierte Wechselwirkungszone $\Omega^{n=1/3}$ der Streifen-Struktur des 1/3-Plateaus ist $N_\Omega = 6$.

Nun beschreiben wir die Wechselwirkungszone $\Omega^{(n)}$ für die Plateaus der Dichten 1/4 und 2/5, wobei in beiden Fällen Besonderheiten auftreten. Für $n = 1/4$ haben wir in $\Omega^{n=1/4}$ die Wechselwirkungen einbezogen, die den Wechselwirkungen V_3 und V_4 des Shastry-Sutherland-Modells entsprechen. V_4 fasst die Wechselwirkungen des effektiven Modells mit Amplitude ${}^{(v)}A_{(2,1)}^{(2,1),(0,0)}$ zusammen, die in Ordnung vier beginnen. Da die Dichte in diesem Fall schon relativ niedrig ist, müssen diese Wechselwirkungen mit größerer Reichweite einbezogen werden. Die Wechselwirkungen, die den kurzreichweitigen und perturbativ dominanteren Wechselwirkungen V_1 und V_2 entsprechen, sind hingegen nicht einbezogen. Nutzt man die präsentierte Zone $\Omega^{n=1/4}$, so ist $N_\Omega = 7$. Für das Plateau der Dichte 2/5 nutzen wir die Wechselwirkungszone $\Omega^{n=2/5} \equiv \Omega^{n=1/3}$, die wir bereits zur Stabilisierung der Streifen-Strukturen für das Plateau der Dichte 1/3 genutzt haben (siehe Abbildung 6.2). In Bild 6.2 sehen wir aber, dass für $\Omega^{n=2/5}$ Wechselwirkungen innerhalb der Streifen-Struktur auftreten. Darum entfernen wir für das Plateau der Dichte 2/5 alle Wechselwirkungen, die die Teilchen der Streifen-Struktur betreffen, explizit aus dem Hamiltonoperator \mathcal{H}_{WW} .

Wir wenden uns den Anregungen in einem Plateau zu und zielen auf die Dispersion der Anregungen ab. Allgemein wird ein ausreichendes Magnetfeld in einem magnetischen System bei Vergrößerung Teilchen-Anregungen oder bei Verringerung Loch-Anregungen induzieren. Wir suchen diese Anregungen im Folgenden in den magnetischen Kanälen $\Delta S^z = \pm 1$, was in der effektiven Beschreibung dem Hinzufügen bzw. Entfernen eines einzelnen Teilchens entspricht. In Abbildung 6.1 haben wir mit Pfeilen die Einheitszelle der Super-Strukturen der Dichten eingezeichnet. Platzieren wir nun in einer Super-Struktur des Systems ein Teilchen auf einen freien Platz, so sprechen wir von einer (Teilchen-)Anregung. Analog können wir in einer Super-Struktur auch ein Teilchen entfernen. In diesem Fall entspricht das fehlende Teilchen der Streifen-Struktur einer Loch-Anregung. Wir haben den Zustand einer Streifen-Struktur als $|\Phi_0^n\rangle$ bezeichnet und erinnern an unsere Notationen für Zustände 3.37 aus Kapitel 3.1.4. Der System-Zustand $|\Phi_0^n\rangle$ ist durch eine Belegung von N_{t+} Teilchen auf N_C Plätze gegeben, die wir auch als $|\{\vec{i}\}_{N_{t+}}\rangle$ schreiben. Wir vereinen nun die volle Definition eines Zustandes und die Kurzschreibweise für den Zustand einer Streifen-Struktur $|\Phi_0^n\rangle$ zur Notation $|\Phi_0^n, \vec{i}, r\rangle$. Der Anteil Φ_0^n zeigt die N_{t+} Teilchen, die die Streifen-Struktur formen. Der Ortsvektor \vec{i} stellt die Position der Anregung dar. Für eine Teilchen-Anregung gilt $\vec{i} \notin \Phi_0^n$ und analog erfordert eine Loch-Anregung $\vec{i} \in \Phi_0^n$.

Der Index r gibt an, auf welchem kristallographisch verschiedenen Platz in der Einheitszelle der Super-Struktur die Anregung liegt.

Die Dispersion für ein Teilchen bzw. ein Loch kann aus den thermodynamischen irreduziblen Amplituden einer Anregung $A_{r',r}^{\vec{\delta}}$ bestimmt werden. Die Amplituden gehören zu Prozessen im thermodynamischen Limes, die eine Anregung am Ort \vec{i} und dem Einheitszellen-Platz r zum Ort $\vec{i} + \vec{\delta}$ am Einheitszellen-Platz r' überführen, wobei im thermodynamischen Limes die Amplituden durch den Abstand $\vec{\delta}$ und die Informationen über die Einheitszelle eindeutig bestimmt sind. Wie zuvor werden diese Amplituden aus den vollen Matrixelementen $\left(A_{r',r}^{\vec{\delta}}\right)^{\mathcal{Q}}$ einer Rechnung auf einem endlichen Cluster \mathcal{Q} über das Subtraktionsschema 2.35 bestimmt. Das volle Matrixelement einer Anregung definieren wir analog zur allgemeinen Definition der vollen Ein-Teilchen-Matrixelemente 2.31. Mit der eben eingeführten reduzierten Schreibweise für den Zustand des Systems sind die vollen Matrixelemente einer Anregung über

$$\left(A_{r',r}^{\vec{\delta}}\right)^{\mathcal{Q}} = \langle \Phi_0^n, \vec{i} + \vec{\delta}, r' | \mathcal{H}_{\text{eff}} | \Phi_0^n, \vec{i}, r \rangle \quad (6.9)$$

bestimmt.

Damit schreibt sich der thermodynamische effektive Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 der Anregungen eines Plateaus der Dichte n als

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{\vec{\delta}, r, r'} A_{r',r}^{\vec{\delta}} \sum_{\vec{i}}^{\text{UC}} b_{\vec{i} + \vec{\delta}, r'}^\dagger b_{\vec{i}, r} \quad (6.10)$$

Der Operator $b_{\vec{i}, r}^\dagger$ ($b_{\vec{i}, r}$) ist der Erzeuger- (Vernichter-)Operator der Teilchen- bzw. Loch-Anregung am Ort \vec{i} und Einheitszellen-Platz r . Für $\vec{\delta} = 0$ ist die entsprechende Amplitude $A_{r,r}^0$ die Amplitude des chemischen Potentials einer Anregung am Einheitszellen-Platz r . Für diese Amplitude erhalten wir über das Subtraktionsschema $A_{r,r}^0 = \left(A_{r,r}^0\right)^{\mathcal{Q}} - \left(E_0^n\right)^{\mathcal{Q}}$.

Der Satz an thermodynamischen Prozessen, die zu Ein-Teilchen-Hüpf-Termen korrespondieren ($\vec{\delta} \neq 0$), ist immer endlich, da wir unsere Rechnungen nur bis zu einer endlichen Ordnung bestimmen können. Der Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 einer Anregung wird nun durch Fourier-Transformation block-diagonalisiert. Wir definieren die Transformation über

$$b_{\vec{k}, r} = \frac{\sqrt{N_{\text{UC}}}}{\sqrt{N_{\mathcal{C}}}} \sum_{\vec{i}}^{N_{\text{UC}}} e^{-i \cdot \vec{k} \cdot \vec{i}} b_{\vec{i}, r} \quad b_{\vec{k}, r}^\dagger = \frac{\sqrt{N_{\text{UC}}}}{\sqrt{N_{\mathcal{C}}}} \sum_{\vec{i}}^{N_{\text{UC}}} e^{i \cdot \vec{k} \cdot \vec{i}} b_{\vec{i}, r}^\dagger \quad (6.11)$$

Die Summe durchläuft alle Einheitszellen des Clusters \mathcal{C} mit $N_{\mathcal{C}}$ Dimer-Plätzen. Die Ortsvektoren sind durch $\vec{i} = i_1 \vec{a}_1 + i_2 \vec{a}_2 + \vec{r}$ gegeben. Dabei durchlaufen die Zahlen i_1 und i_2 alle Einheitszellen eines Systems, wobei wir die Zahl der Einheitszellen als N_{UC} definiert haben. Die Einheitszelle hat die Einheitszellen-Vektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2 . Die Vektoren \vec{r} durchlaufen alle Plätze für ein Teilchen (bzw. Loch) innerhalb einer Einheitszelle. Weiter ist der Vektor \vec{k} der quantisierte Impuls des Teilchens, definiert als $\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2$. Die reziproken Gittervektoren \vec{b}_1 und

\vec{b}_2 sind zu den Einheitszellen-Vektoren der betrachteten Streifen-Struktur zu bestimmen. Die Definitionsbereiche von k_1 und k_2 liegen zwischen 0 und 2π .

Betrachten wir die Anätze für die Streifen-Strukturen in Abbildung 6.1 genauer, so sehen wir, dass abgesehen vom Plateau der Dichte $1/2$, alle Super-Strukturen eine Einheitszelle mit mehreren, kristallographisch verschiedenen Plätzen für Teilchen- und Loch-Anregungen haben. In diesem Fall diagonalisiert die Fourier-Transformation das System nicht vollständig und der Hamiltonoperator ist bezüglich der verschiedenen Impulse des Systems block-diagonal. Für jeden Impuls \vec{k} des Systems muss nur noch eine Matrix der Dimension m diagonalisiert werden, wobei m die Anzahl der verschiedenen Plätze für ein Teilchen bzw. ein Loch in der Einheitszelle bezeichnet. Der Wechsel in den Impuls-Raum mit Diagonalisierung des Impulses liefert die m Ein-Teilchen-Energien $\omega_r^T(\vec{k})$ (bzw. Ein-Loch-Energien $\omega_r^L(\vec{k})$) des Systems in der betrachteten Streifen-Struktur. Es gilt $r = 1, \dots, m$. Die genannten m Energien der einzelnen Anregungen werden auch als die m Energiebänder des betrachteten Systems bezeichnet.

Die Energielücke der Teilchen-Anregung ist definiert als Ein-Teilchen-Energie minimaler Energie

$$\Delta_T^n = \text{Min}_{\vec{k}, r} \omega_r^T(\vec{k}) \quad . \quad (6.12)$$

Addieren wir nun ein externes Magnetfeld der Stärke $h = \Delta^T$, so schließt die Energielücke. Es kommt zu einer Kondensation der Teilchen-Anregung und die Plateau-Phase wird instabil.

Für Loch-Anregungen ist darauf zu achten, dass die Richtung des Feldes umgedreht werden muss. Die Fragestellung ist also, wie weit man das externe Feld verringern muss, um eine Kondensation der Löcher zu bewirken. Diese Definition bedingt, dass wir die Lücke eines Loches Δ^L als Maximum der Ein-Loch-Dispersion $\omega_r^L(\vec{k})$ definieren

$$\Delta_L^n = \text{Max}_{\vec{k}, r} \omega_r^L(\vec{k}) \quad . \quad (6.13)$$

Wie zuvor haben die kritischen Punkte keine physikalische Aussage, wenn ein Phasenübergang erster Ordnung noch vor den kritischen Feldern im System vorliegt.

Die Belegung des Streifen-Struktur-Anteils Φ_0^n eines Zustandes $|\Phi_0^n, \vec{i}, r\rangle$ im Anfangs- und Endzustand ist identisch, so dass sich das System trotz der sehr hohen Anzahl an Teilchen, wie ein Ein-Anregungs-Problem verhält. Obwohl die Teilchen prinzipiell identisch und ununterscheidbar sind, lassen sich die Prozesse als Ein-Teilchen-Prozesse interpretieren, die Hüpfsterme oder das chemische Potenzial einer Anregung darstellen. Die Symmetrien des Shastry-Sutherland-Modells und die Eigenschaften der Methode lassen also nur Anregungen im System hüpfen, so dass wieder Zustände entstehen, die Teilchen-Anregungen entsprechen. Hat man nicht genug genügend Wechselwirkungen in der Wechselwirkungszone $\Omega^{(n)}$ einbezogen, so kommt es zu einem zerfließen der Streifen-Struktur.

Wir schließen nun mit einigen Kommentaren ab, die explizit die PCUT-Rechnung betreffen. Die modifizierte Störung \mathcal{V}' enthält die ursprüngliche Störung des Shastry-Sutherland-Modells

mit dem Vorfaktor J'/J . Im modifizierten Hamiltonoperator 6.6 erweitert sich der Vorfaktor dieses Anteils zu xJ'/J . Der Wechselwirkungsanteil \mathcal{H}_{WW} der modifizierten Störung ist rein proportional zum Störparameter x . Jeder Bestandteil von \mathcal{V}' hat nach Gleichung 6.8 Terme, die proportional zu xJ'/J sind. Betrachten wir Tabelle 3.1, in der die Prozesse des Shastry-Sutherland-Modells zusammengefasst sind, so übertragen sich alle dort aufgeführten Prozesse in die Blöcke T_0 , T_{+1} und T_{-1} mit einer Amplitude xJ'/J . Alle Prozesse, die effektiv ein Triplet t^+ bewegen, können aufgrund der Wechselwirkungen mit der Umgebung mehr als ein Energiequant im System anregen oder vernichten. Diese Terme werden zusätzlich in die Blöcke $T_{\pm 2}, \dots, T_{\pm N_\Omega}$ aufgenommen, ebenfalls mit einer Amplitude xJ'/J .

Die addierten Wechselwirkungen des Hamiltonoperators \mathcal{H}_{WW} sind (unserer Definition 6.8 entsprechend) als Dichte-Dichte-Wechselwirkungen zwischen zwei Teilchen definiert. Diese Prozesse erzeugen (oder vernichten) keine Anregungen und liefern daher nur einen diagonalen Beitrag zu T_0 . Diese Prozesse sind proportional zu x . Damit schreibt sich die modifizierte Störung detaillierter als

$$x\mathcal{V}' = xT_{-N_\Omega} \left(\frac{J'}{J} \right) + xT_{-N_\Omega+1} \left(\frac{J'}{J} \right) + \dots + xT_0 \left(\frac{J'}{J} \right) + xT_0^\circ + \dots + xT_{N_\Omega} \left(\frac{J'}{J} \right) \quad . \quad (6.14)$$

In dieser Formel ist T_0° die Summe der diagonalen Dichte-Dichte-Wechselwirkungen über alle Plätze im System

$$T_0^\circ = \sum_{\vec{i}} \sum_{\vec{j} \in \Omega^{(n)}} n_{\vec{i}} n_{\vec{j}} = \sum_{\vec{i}} \sum_{\vec{j} \in \Omega^{(n)}} b_{\vec{i}}^\dagger b_{\vec{j}}^\dagger b_{\vec{i}} b_{\vec{j}} \quad . \quad (6.15)$$

Da aufgrund der Eigenschaften des Shastry-Sutherland-Modells in einer $T(\mathbf{m})$ -Sequenz der PCUT ein T_0 -Operator nicht als erster oder letzter Operator auftritt, liefern alle $T(\mathbf{m})$ -Sequenzen einen Faktor $x^2 (J'/J)^2$. Die anderen Operatoren der $T(\mathbf{m})$ -Sequenz sind entweder zu x (ein T_0° -Operator wirkt) oder xJ'/J (sonst) proportional. Mit dieser Information ist nun verständlich, dass die Reihe in x und J'/J einer Amplitude A allgemein in einer LCE-Rechnung die folgende Struktur hat

$$\begin{aligned} A = & x^2 \left(K_{2,2} \left(\frac{J'}{J} \right)^2 \right) + x^3 \left(K_{3,3} \left(\frac{J'}{J} \right)^3 + K_{3,2} \left(\frac{J'}{J} \right)^2 \right) \\ & + x^4 \left(K_{4,4} \left(\frac{J'}{J} \right)^4 + \dots + K_{4,2} \left(\frac{J'}{J} \right)^2 \right) + \dots \\ & + x^p \left(K_{p,p} \left(\frac{J'}{J} \right)^p + \dots + K_{p,2} \left(\frac{J'}{J} \right)^2 \right) \quad , \end{aligned} \quad (6.16)$$

wobei p die maximale Ordnung der Rechnung im Störparameter x ist und $K_{x,J'/J}$ beschreibt die Koeffizienten der Reihe.

Abschließend sei angemerkt, dass man, um physikalischen Ergebnissen für das Shastry-Sutherland-Modell zu erhalten, für ein fixiertes J'/J bis zu $x = 1$ extrapolieren muss.

6.2 Experiment

Wir fassen die experimentellen Ergebnisse aus Arbeit [57] zusammen (siehe Abbildung 6.4). Im Experiment wurde ein Ein-Kristall des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ untersucht. Das Magnetfeld des Versuchs wird durch einen gepulsten Magneten erzeugt, der eine maximale Feldstärke von 118 T erzeugen kann. Dazu wurde die sogenannte vertical-type single coil technique genutzt. Weitere Details zu diesem Verfahren sind in der Veröffentlichung [157] beschrieben. Dabei können alle Informationen über die Magnetisierung aus $\frac{dM}{dt}$ gewonnen werden, wobei $\frac{dM}{dt}$ die Messgröße des Experimentes ist (siehe linkes Bild in Abbildung 6.4). Das externe Feld H ist parallel zur c -Achse des Kristalls orientiert. Während des Experimentes beträgt die Temperatur T des Systems 2.1 K.

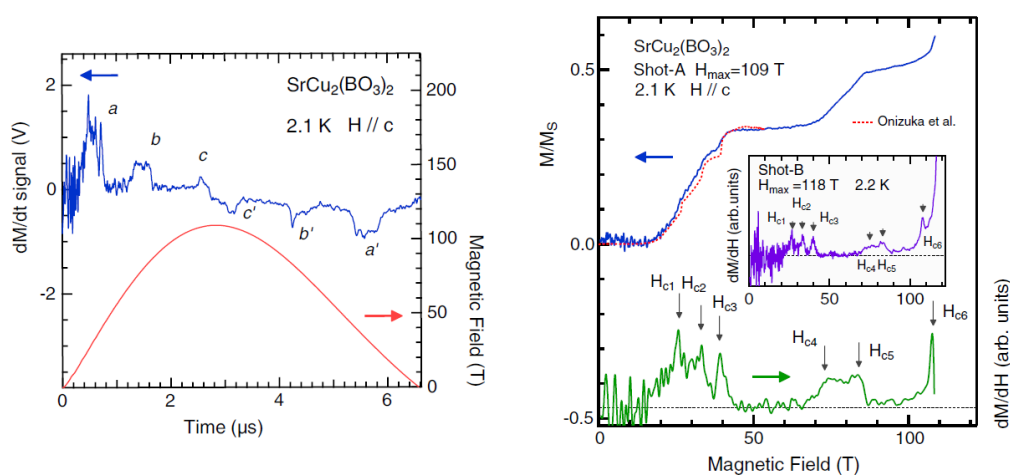


Abbildung 6.4: Links: Die rote Kurve zeigt den Verlauf des Magnetfeldes $H(t)$ der experimentellen destruktiven Methode. Die blaue Kurve zeigt das Messergebnis für $\frac{dM}{dt}$ als Funktion der Zeit t . Die prominenten Signale werden mit a , b , c , c' , b' und a' bezeichnet. Die gestrichelten (nicht-gestrichelten) Größen sind Signale für abnehmendes (zunehmendes) Magnetfeld. Rechts: Die Magnetisierungskurve M/M_{Sat} als Funktion des externen Feldes H ist oben als blaue Kurve gezeigt. Die rote Kurve zeigt die Ergebnisse aus [55]. Ein Zwischenergebnis der Rechnung sind die Kurven, die $\frac{dM}{dH}$ als Funktion des externen Feldes H zeigen. Die grüne Kurve zeigt $\frac{dM}{dH}$ für das Messergebnis auf der linken Seite und der Inset zeigt $\frac{dM}{dH}$ für eine erneute Messung als lila Kurve. In beiden Kurven sind markante Signale mittels der Symbole H_{cN} angedeutet.

Im linken Bild von Abbildung 6.4 ist das Ergebnis für dM/dt (blaue Kurve) und der Verlauf der Feldstärke des externen Feldes $H(t)$ (rote Kurve) eingezeichnet. Die destruktive Methode erzeugt ein Feld für etwa $7 \mu\text{s}$. Das Maximum der Feldstärke $H(t)$ befindet sich bei etwa $3 \mu\text{s}$. In der Aufnahme des Feldverlaufes dieses Versuchs liegt die Amplitude bei etwa 109 T. Der Verlauf ist zu Beginn und zu Ende linear und in der Nähe des Maximums parabelförmig. In der Abbildung sind die deutlichsten Signale als a , b und c für das steigende Feld und a' , b' und c' für den Bereich abfallender Feldstärke eingezeichnet. Dabei befinden sich die Signale für den steigenden und fallenden Bereich an denselben Feldstärken, was dafür spricht, dass keine Hysterese vorliegt. Diese Signale korrespondieren zu Phasenübergängen erster Ordnung, die zwischen den Plateaus des Systems stattfinden.

Im rechten Bild von Abbildung 6.4 ist im oberen Teil die Magnetisierung M/M_{Sat} als Funktion des externen Feldes H als blaue Kurve zu sehen. Die rote Kurve stellt die zuvor aufgenommene Magnetisierungskurve dar, veröffentlicht in Arbeit [55]. Die markantesten Eigenschaften der Magnetisierungskurve für die folgende Diskussion sind das breite Plateau der Dichte $1/3$, das zwischen den Feldstärken 39 T und 73 T (Breite von 34 T) stabilisiert ist. Es folgt ein Bereich mit einer glatt verlaufenden Magnetisierung, die linear bis etwa 84 T verläuft. Die Magnetisierung zeigt keine weiteren Plateaus, z. B. auch kein Plateau der Dichte $2/5$. Bei 84 T erkennt man einen Knick in der Magnetisierung und das Plateau der Dichte $1/2$ stabilisiert sich. Das Plateau der Dichte $1/2$ verläuft dann bis etwa 108 T mit einer Breite von 24 T. Die grüne Kurve bezieht sich auf die Messung im linken Bild der Abbildung 6.4. Die Kurve im Inset bezieht sich auf eine zweite Messung. In diesen Kurven sind die Übergänge in eine Plateau-Phase oder das Verlassen einer Plateau-Phase durch gut erkennbare Signale gekennzeichnet, die mit H_{cN} bezeichnet sind. Wir verweisen für eine weitere und detaillierte Diskussion dieser Kurven auf unsere Arbeit [57].

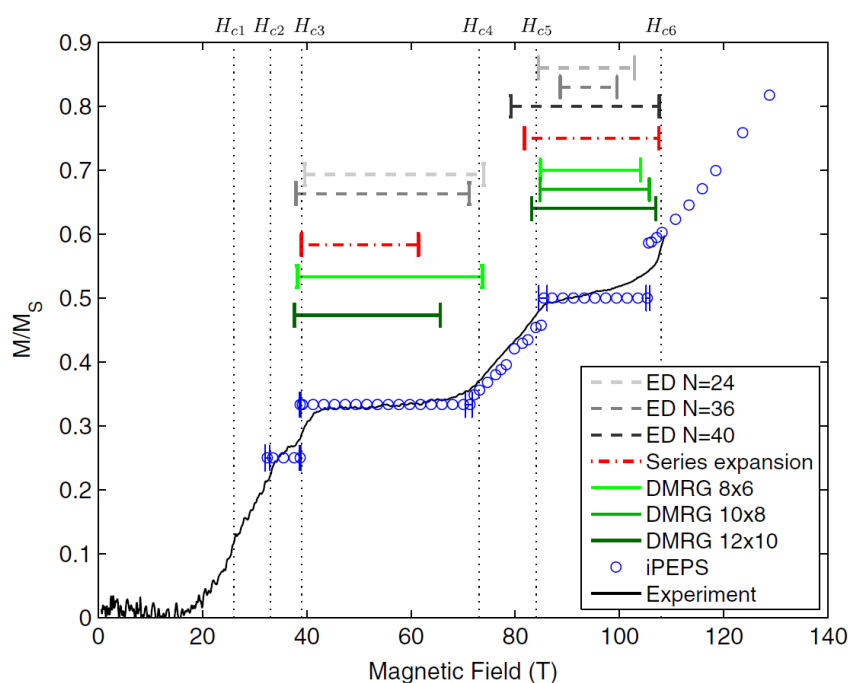


Abbildung 6.5: Wir zeigen die experimentelle Magnetisierungskurve M/M_{Sat} als Funktion vom externen Feld H und die iPEPS-Ergebnisse für $J'/J = 0.63$. Wir zeigen zudem die mit verschiedenen numerischen Methoden bestimmten Breiten der Plateaus der Dichte $1/3$ und $1/2$. Die Breiten sind als Linien im Bild eingetragen und sind für $J'/J = 0.63$ bestimmt. Unsere Ergebnisse der Reihenentwicklung, die wir im folgenden noch diskutieren werden, sind in rot gezeigt. Zudem sind die experimentellen Signale H_{cN} eingezeichnet, die den Beginn oder das Ende eines Plateaus kennzeichnen.

Wir kommen nun zu einem zentralen Ergebnis unserer Arbeit, das in Abbildung 6.5 zu sehen ist. Neben der experimentellen Magnetisierungskurve zeigen wir weiter die Ergebnisse einer iPEPS Rechnung für $J'/J = 0.63$ als blaue Punkte. Die farbigen Striche zeigen die Prognosen der Plateau-Breiten für verschiedene numerische Methoden, darunter ED-Rechnungen, DMRG-Rechnungen und unsere Ergebnisse der Reihenentwicklung zu hoher Ordnung (in rot). Eine Schlussfolgerung der Analyse ist, dass iPEPS ein relativ vollständiges Bild der Magnetisierung liefert. Ein Vergleich der iPEPS-Magnetisierungskurve für verschiedene J'/J zeigt, dass sich die

beste Übereinstimmung zum Experiment in der gezeigten Magnetisierungskurve bei $J'/J = 0.63$ ergibt. Dabei ist besonders herauszustellen, dass die iPEPS für $J'/J = 0.63$ eine sehr gute Übereinstimmung der Breite für das $1/3$ -Plateau bestimmt, was man an den eingezeichneten Signalen H_{cN} in Bild 6.5 sieht. Ein weiteres Kriterium ist die gute Übereinstimmung der Breite des $1/2$ -Plateaus und die Abwesenheit eines Plateaus der Dichte $2/5$. Wir verschieben einen detaillierten Vergleich der Magnetisierung der anderen Methoden auf das Kapitel 6.5.

6.3 Grundzustandsenergien

Wir betrachten die Grundzustandsenergien E_0^n/N_C , die mittels unseres LCE-Ansatzes bestimmt wurden. In diesem Unterkapitel ist die Energie auf die Anzahl der Dimer-Plätze in einem System N_C normiert. Konkret haben wir die Grundzustandsenergie für die Dichten $1/2$, $1/3$ und $2/5$ mit dem Löwdin-Formalismus [156] bis Ordnung neun in x bestimmt und für die Dichte $1/4$ die PCUT in Ordnung sechs in x verwendet. In den LCE-Rechnungen kann man J'/J als zweiten Parameter noch beliebig in der Rechnung behandeln. Für die Diskussion der Ergebnisse müssen wir das Verhalten für $x \rightarrow 1$ bei festem J'/J betrachten. Dies liegt wie erwähnt daran, dass wir von einem Modell aus entwickeln, das zunächst nichts mit dem ursprünglichen Shastry-Sutherland-Modell gemein hat. Erst für $x = 1$ wird das Shastry-Sutherland-Modell reproduziert.

Ausgehend vom experimentellen Ergebnis, das für den Störparameter $J'/J \approx 0.63$ liefert (siehe Unterkapitel 6.2), betrachten wir in diesem Kapitel speziell die Entwicklungen für $J'/J = 0.5$ und $J'/J = 0.63$. Der Wert $J'/J = 0.5$ zeigt typischerweise ein konvergentes Verhalten und dieser Parameter liegt hinsichtlich des ursprünglichen Shastry-Sutherland-Modells außerhalb eines Bereichs der perturbativ einfach zu beschreiben ist. Unser Ziel ist die Beschreibung im Limes $x \rightarrow 1$. Gelingt die Bestimmung der Grundzustandsenergie E_0^n/N_C für die beiden genannten Parameter J'/J , so sollte die Entwicklung für alle weiteren J'/J analog möglich sein. Für kleine x liegen die Ergebnisse typischerweise in einem perturbativ kontrollierten Bereich und die nackten Reihen und Extrapolationen liegen aufeinander. Wir werden daher immer den Bereich von $x = 0.9$ bis $x = 1$ betrachten und hier speziell die nackten Reihen in verschiedenen Ordnungen und Extrapolationen betrachten, um die Grundzustandsenergie für $x = 1$ bei festem J'/J , also die Grundzustandsenergie im ursprünglichen Shastry-Sutherland-Modell, zu extrahieren.

Die Grundzustandsenergie $E_0^{n=1/2}/N_C$ ist auf einem Rechencluster mit den Vektoren $\vec{v}_1 = \binom{10}{4}$ und $\vec{v}_2 = \binom{0}{10}$ bestimmt worden und in Abbildung 6.6 dargestellt. Im Rechencluster sind $N_C = 100$ Plätze enthalten und das System ist in beide Raumrichtungen periodisch gekoppelt. Beginnen wir mit der Betrachtung bei $J'/J = 0.5$, so sind die nackten Reihen in Ordnung neun, acht und sieben im Bild oben links in Abbildung 6.6 abgebildet. Fokussieren wir uns auf die Grundzustandsenergie für $x = 1$, so liefert die Erhöhung der Ordnung der nackten Reihe eine niedrigere Grundzustandsenergie. Die nackte Reihe ist in Ordnung neun um den Bereich $x = 1$ noch nicht konvergiert. Aber die nackte Reihe in Ordnung neun liegt nahe der nackten Reihe in Ordnung acht. Die Korrekturen von höheren Ordnungen sind daher vermutlich klein und deuten

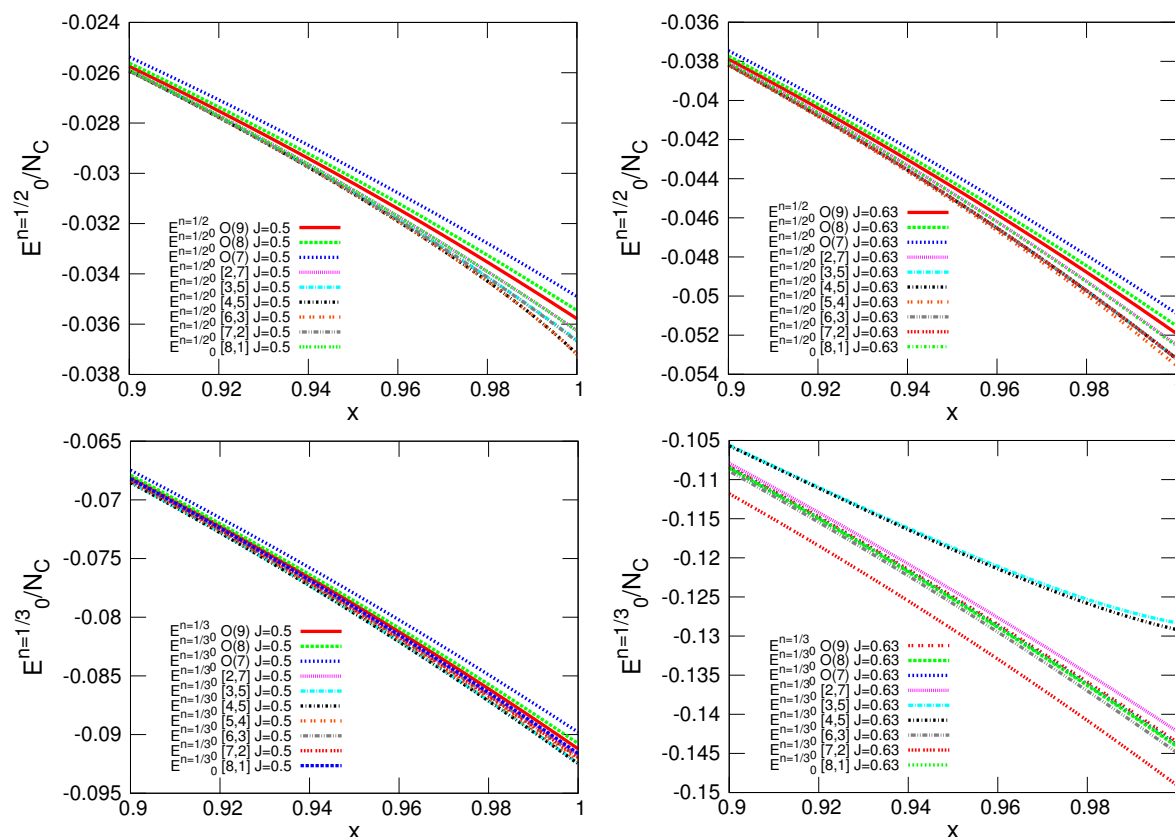


Abbildung 6.6: Die nackten Reihen (in Ordnung neun, acht, sieben) und verschiedene Padé-Extrapolationen (der Reihe in Ordnung neun) für die Grundzustandsenergien $E_0^{n=1/2}/N_C$ (obere Bilder) und $E_0^{n=1/3}/N_C$ (untere Bilder) sind dargestellt. In den Bildern auf der linken Seite ist die Konvergenz gegen $x = 1$ für $J'/J = 0.5$ zu sehen und in den Bildern auf der rechten Seite ist die Konvergenz gegen $x = 1$ für $J'/J = 0.63$ abgebildet.

für $x = 1$ auf leicht niedrigere Energien hin. Padé-Extrapolationen bestätigen den Trend der nackten Reihen in unterschiedlicher Ordnung. Die Padé-Extrapolationen weisen für $x = 1$ auf leicht niedrigere Energien hin, als die nackte Reihe in Ordnung neun. Dabei zeigen die Padé-Extrapolationen kein konsistentes Verhalten für $J'/J = 0.5$. Unter den sechs Extrapolationen liegen jeweils zwei Extrapolationen übereinander. Die drei Typen von Extrapolationen deuten auf leicht verschiedene Energien für $x = 1$ hin und der Energieunterschied der Extrapolationen liegt innerhalb einer Größenordnung von 0.01.

Für $J'/J = 0.63$ ist die Grundzustandsenergie $E_0^{n=1/2}/N_C$ als Funktion von x im rechten, oberen Bild in Abbildung 6.6 dargestellt. Die dargestellten, nackten Reihen zeigen mit steigender Ordnung dasselbe Verhalten wie für $J'/J = 0.5$. Die höheren Ordnungen berichtigen die Grundzustandsenergie zu niedrigeren Energien, so dass die nackte Reihe in Ordnung neun um $x = 1$ noch nicht vollständig konvergiert sein kann. Zudem weisen die Padé-Extrapolationen für $J'/J = 0.63$ auf eine Grundzustandsenergie für $x = 1$ hin, die leicht niedriger liegt, als die Energien der nackten Reihen. Dies ist konsistent mit dem Verhalten der nackten Reihen für höhere Ordnungen. Für den betrachteten Wert $J'/J = 0.63$ zeigt sich hingegen ein einheitliches Bild bei den Padé-Extrapolationen. Wir sehen zwei Typen von Extrapolationen. Dabei finden wir zwei Typen von

Kurvenverläufen, wobei einmal zwei Extrapolationen deutlich übereinander liegen und einmal fünf Extrapolationen einheitlich verlaufen. Das konsistente Verhalten von fünf Extrapolationen liefert einen realistischen Wert für den Grundzustand $E_0^{n=1/2}/N_C$ für $x = 1$.

Wir wenden uns nun der Grundzustandsenergie $E_0^{n=1/3}/N_C$ zu. Das Rechencluster für diese Dichte hat die Vektoren $\vec{v}_1 = \binom{0}{12}$ und $\vec{v}_2 = \binom{12}{0}$ und beinhaltet $N_C = 144$ Dimer-Plätze. Die Grundzustandsenergie $E_0^{n=1/3}/N_C$ um den Bereich $x = 1$ ist als Funktion von x für $J'/J = 0.5$ im unteren linken Bild von Abbildung 6.6 dargestellt. Betrachten wir die nackten Reihen in Ordnung neun, acht und sieben, so ist erneut zu sehen, dass die nackte Reihe in Ordnung neun noch nicht konvergiert ist und für $x = 1$ noch kleine, aber sichtbare Korrekturen in höheren Ordnungen eintreten. Dabei korrigiert sich die Grundzustandsenergie $E_0^{n=1/3}/N_C$ der nackten Reihen für höhere Ordnungen und $x = 1$ konsistent zu niedrigeren Energien hin. Diesbezüglich deuten die Padé-Extrapolationen auch konsistent auf einen niedrigeren Energiewert für $x = 1$ hin. Die Extrapolationen liegen hier nicht übereinander, grenzen aber einen schmalen Bereich für die Grundzustandsenergie bei $x = 1$ ein. Die Grundzustandsenergien der Extrapolationen für $x = 1$ liegen nur leicht niedriger als die nackte Reihe in Ordnung neun. Allgemein bietet es sich nach der vorliegenden Betrachtung von $E_0^{n=1/3}/N_C$ für $J'/J = 0.5$ an, die Grundzustandsenergie über eine Mittelung der Resultate der Extrapolationen zu bestimmen.

Betrachten wir nun die Grundzustandsenergie $E_0^{n=1/3}/N_C$ um $x = 1$ für $J'/J = 0.63$ (siehe das Bild unten rechts in Abbildung 6.6), so liegen die nackten Reihen in diesem Fall zunächst fast übereinander. Die nackte Reihe in Ordnung neun verläuft oberhalb der nackten Reihen in Ordnung acht. Zwischen diesen Reihen liegt der Kurvenverlauf der nackten Reihe in Ordnung sieben. Die nackten Reihen deuten für $J'/J = 0.63$ nicht konsistent auf eine Tendenz der Grundzustandsenergie für $x = 1$ in höheren Ordnungen hin, aber die Reihen liegen so dicht, dass die nackte Reihe nahezu konvergiert scheint. Das angesprochene inkonsistente Verhalten der nackten Reihen für höhere Ordnungen spiegelt sich auch in den Padé-Extrapolationen wieder, die entsprechend unterschiedlich ausfallen. Drei Extrapolationen zeigen einen Kurvenverlauf, der konsistent zu den nackten Reihen ist. Eine Padé-Extrapolation verläuft sichtbar unterhalb der nackten Reihen und zwei Extrapolationen verlaufen deutlich oberhalb der nackten Reihen. Typischerweise haben die nackten Reihen und Extrapolationen einen annähernd linearen Kurvenverlauf im Wertebereich um $x = 1$. Die beiden zuletzt genannten Extrapolationen für $E_0^{n=1/3}/N_C$ mit $J'/J = 0.63$ zeigen diesbezüglich eine ungewöhnliche Krümmung, die wie ein Artefakt wirkt. Vernachlässigen wir diese Extrapolationen, so liegen der Großteil der Padé-Extrapolationen für $J'/J = 0.63$ nahe der nackten Reihe in Ordnung neun. Wie beschrieben zeigen sich noch leichte Abweichungen der nackten Reihen für $J'/J = 0.5$ und 0.63 , die aber in einer sehr kleinen Energieskala liegen. Zusammenfassend scheint daher die nackte Reihe in Ordnung neun für $J'/J = 0.5$ und 0.63 hinreichend gut konvergiert zu sein, was durch die Padé-Extrapolationen untermauert wird.

Wir stellen die Grundzustandsenergie $E_0^{n=2/5}/N_C$ für $J'/J = 0.5$ als Funktion von $x = 0.9$ bis 1 im Bild oben links in Abbildung 6.7 dar. Das Rechencluster für Dichte $n = 2/5$ hat die Vektoren $\vec{v}_1 = \binom{0}{10}$ und $\vec{v}_2 = \binom{10}{0}$ und beinhaltet $N_C = 100$ Dimer-Plätze. Die Abbildung zeigt drei Typen von Kurven, in denen mehrere Reihen dicht verlaufen. Der Kurven-Typ, der die

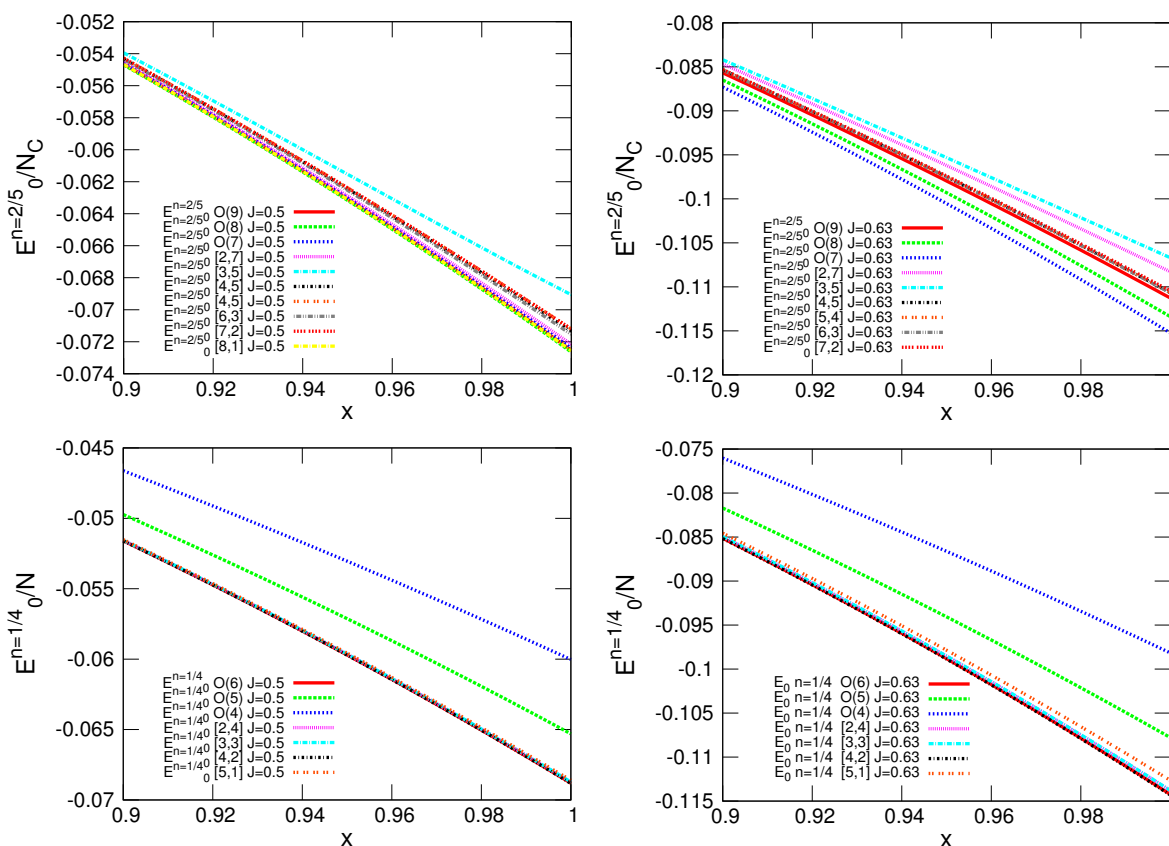


Abbildung 6.7: Die nackten Reihen (in Ordnung neun, acht, sieben bzw. sechs, fünf, vier) und verschiedene Padé-Extrapolationen (der Reihe in Ordnung neun bzw. sechs) für die Grundzustandsenergien $E_0^{n=2/5}/N_C$ (obere Bilder) und $E_0^{n=1/4}/N_C$ (untere Bilder) sind dargestellt. In den Bildern auf der linken Seite ist die Konvergenz gegen $x = 1$ für $J'/J = 0.5$ zu sehen und in den Bildern auf der rechten Seite ist die Konvergenz gegen $x = 1$ für $J'/J = 0.63$ abgebildet.

niedrigste Grundzustandsenergie $E_0^{n=2/5}/N_C$ zeigt, beinhaltet die nackten Reihen und drei Extrapolationen. Die nackten Reihen in Ordnung neun, acht und sieben liegen (fast) übereinander und die nackte Reihe in Ordnung neun wirkt selbst für $x = 1$ konvergiert. Wir sehen außerdem, dass drei Padé-Extrapolationen einen Kurven-Typ darstellen, der konsistent auf leicht höhere Grundzustandsenergien für $x = 1$ hinweist. Der dritte Kurven-Typ wird von einer einzigen Padé-Extrapolation gebildet, die aber eine Krümmung zeigt, die wir für ein Artefakt halten. Allgemein scheint die nackte Reihe für die Grundzustandsenergie $E_0^{n=2/5}/N_C$ bei $J'/J = 0.5$ konvergiert zu sein, obwohl einige Padé-Extrapolationen auf leicht höhere Energien für $x = 1$ hindeuten.

Die Grundzustandsenergie für Dichte $2/5$ und $J'/J = 0.63$ als Funktion von x ist im Bild oben rechts in Abbildung 6.7 dargestellt. Beginnen wir bei den nackten Reihen, so sehen wir mit steigender Ordnung eine eindeutigen Trend bei der Korrektur. Dabei berichtigt sich die Grundzustandsenergie für $x = 1$ für höhere Ordnungen zu höheren Energien. Im Allgemeinen deuten die Padé-Extrapolationen auf Grundzustandsenergien $E_0^{n=2/5}/N_C$ hin, die höher liegen als das Resultat der nackten Reihen in Ordnung neun, was konsistent ist mit dem Verhalten der nackten Reihen für höhere Ordnungen. Begutachten wir die Padé-Extrapolationen, so liegen vier von sechs Extrapolationen dicht übereinander. Der Kurvenverlauf der genannten Extrapolationen

liegt nur leicht oberhalb der nackten Reihe in Ordnung neun. Dies weist darauf hin, dass die Korrekturen zur nackten Reihe in Ordnung neun für höhere Ordnungen gering ausfallen. Zusammengefasst zeigen die beiden Beispiele der Konvergenz für J'/J , dass die nackten Reihen in Ordnung neun noch nicht vollständig konvergiert sind. Aber die Extrapolationen deuten darauf hin, dass die Korrekturen der höheren Ordnungen klein sind und die nackte Reihe in Ordnung neun kann verwendet werden, um die Grundzustandsenergie zu bestimmen.

Zuletzt diskutieren wir die Grundzustandsenergie $E_0^{n=1/4}/N_C$ für $J'/J = 0.5$ und 0.63 als Funktion von $x = 0.9$ bis $x = 1$. Die beiden Fälle sind in den beiden unteren Bildern in Abbildung 6.7 dargestellt. Die Vektoren des Rechenclusters sind $\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 8 \end{pmatrix}$ und $\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 8 \\ 0 \end{pmatrix}$, so dass im System $N_C = 64$ Dimere vorliegen. Betrachten wir die nackten Reihen, so sehen wir noch deutliche Unterschiede zwischen den nackten Reihen in Ordnung sechs, fünf und vier. Der Kurvenverlauf korrigiert sich konsistent nach unten, so dass die Grundzustandsenergie für $x = 1$ in höheren Ordnungen niedriger ist. Betrachten wir die Extrapolationen der nackten Reihe in Ordnung sechs, so liegen alle Extrapolationen in beiden Fällen ($J'/J = 0.5$ und 0.63) fast deckungsgleich auf der nackten Reihe in Ordnung sechs. Für $J'/J = 0.63$ sehen wir aber, dass einige Extrapolationen eine leicht andere Grundzustandsenergie für $x = 1$ liefern. Zusammengefasst sehen wir in beiden Fällen, dass die nackte Reihe in höheren Ordnungen den Kurvenverlauf konsistent zu niedrigeren Energien korrigiert, wobei die Extrapolationen in x konsistent auf der nackten Reihe in Ordnung sechs liegen. Die nackte Reihe in Ordnung sechs scheint daher bereits ein konvergiertes Verhalten zu zeigen.

6.4 Dispersion und Lücke

Wir beschäftigen uns nun mit dem intrinsischen Stabilitätsbereich der Plateaus der Dichte $1/3$ und $1/2$. Wie in Unterkapitel 6.1 beschrieben, haben wir diesen Bereich durch die Ein-Teilchen- bzw. Ein-Loch-Lücke (Δ_T^n und Δ_L^n) definiert. Für entsprechende Magnetfelder beschreiben Δ_T^n und Δ_L^n die kritischen Punkte an denen die Plateaus aus Streifen-Strukturen instabil werden. Ist das externe Feld h , das den Zusammenbruch der Plateau-Phase markiert, im Phasendiagramm noch vor Phasenübergängen erster Ordnung realisiert, stabilisieren sich suprakristalline Phasen im System. Da sich in unserem Schema die Bestimmung der Lücke auf ein effektives Ein-Anregungs-Problem reduziert, müssen im Wesentlichen die Ein-Teilchen- und Ein-Loch-Hüpf-Matrixelemente mit einem LCE-Verfahren bestimmt werden. Die folgenden Lösungen für die Matrixelemente haben wir für das Teilchen und das Loch des $1/2$ -Plateaus mit der Takahashi-Störungstheorie [154] [155] in Ordnung neun bestimmt. Zudem haben wir die Ein-Teilchen-Hüpf-Matrixelemente für die Streifen-Struktur des $1/3$ -Plateaus in Ordnung sieben mit der Takahashi-Störungstheorie bestimmt und die entsprechenden Ein-Loch-Hüpf-Matrixelemente sind von uns in Ordnung sechs mit der PCUT bestimmt worden. Die Rechencluster sind identisch zu den Clustern, die zur Berechnung des Grundzustandes genutzt wurden.

Wir werden in diesem Unterkapitel zuerst über das Plateau der Dichte $1/2$ sprechen und dann die Ergebnisse für die Dichte $n=1/3$ diskutieren. Konkret werden wir für beide Dichten zuerst die Hüpfsterme der Teilchen- und Loch-Anregungen präsentieren und geben den Impuls \vec{k} an, für den sich die resultierenden Dispersionen minimieren bzw. maximieren. Im Anschluss diskutieren wir die Konvergenz der nackten Reihen der Anregungs-Lücken für $x \rightarrow 1$, da in diesem Limes das ursprüngliche Shastry-Sutherland-Modell wiederhergestellt wird. Wie schon für die Grundzustandsenergie, betrachten wir die nackte Reihe in verschiedenen Ordnungen und präsentieren diverse Padé-Extrapolationen. Dabei haben wir zur Diskussion der Konvergenz erneut die Werte $J'/J = 0.5$ und $J'/J = 0.63$ herausgegriffen.

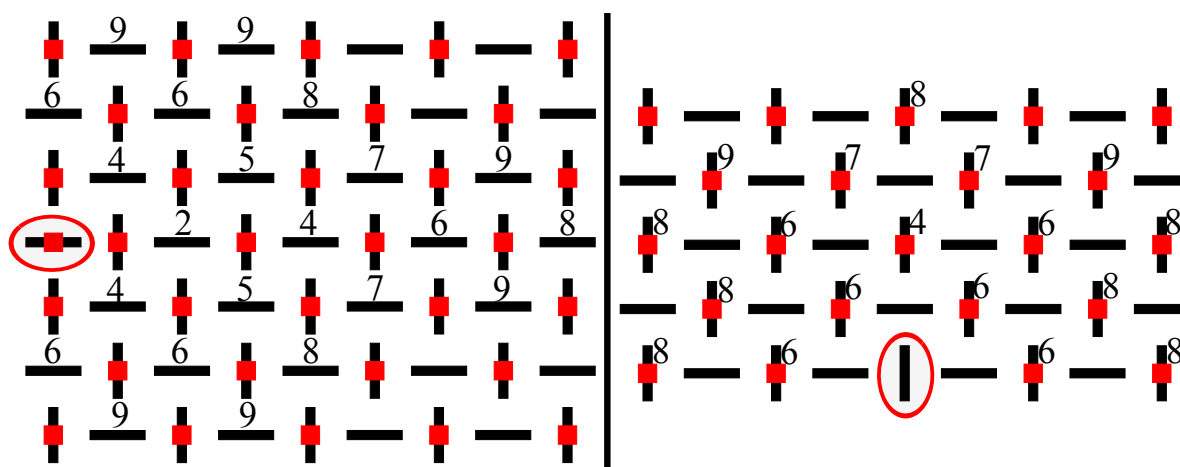


Abbildung 6.8: Wir zeigen die Hüpfprozesse der Anregungen in der Streifen-Struktur der Dichte $1/2$. Im linken (rechten) Bild werden die Hüpfprozesse der Teilchen-Anregung (Loch-Anregung) dargestellt. Wir kreisen einen Gitterplatz ein, auf dem wir ein Teilchen bzw. ein Loch ins System setzen. Die Zahlen an den anderen Gitterplätzen zeigen, dass die eingekreiste Anregung in der angegebenen Ordnung in x auf diesen Platz springen kann. Aufgrund der Symmetrie der Streifen-Struktur zeigen wir für ein Teilchen nur die Hüpfprozesse auf Plätze zur rechten Seite des Teilchens und für ein Loch nur die Hüpfprozesse auf Plätze oberhalb des Teilchens.

Betrachten wir Abbildung 6.1, so ist die Einheitszelle der Streifen-Struktur für Dichte $1/2$ im rechten Bild eingetragen. Die Einheitszelle ist aus zwei Plätzen aufgebaut, wobei wir o.B.d.A die Streifen-Struktur aufbauen, indem jeder vertikale Dimer-Platz einer Einheitszelle mit einem Teilchen belegt ist und jeder horizontale Dimer-Platz unbelegt ist. Hinsichtlich der Anregungen kann auf einen unbelegte Platz einer Einheitszelle eine Teilchen-Anregung induziert werden. Dann lokalisieren analog die Loch-Anregungen nur an den belegten Plätzen der Einheitszellen des Systems. Daher reduziert sich das Ein-Teilchen- bzw. Ein-Loch-Problem für Dichte $1/2$ auf die Analyse einer Anregung auf einem effektiven Quadrat-Gitter. Die Amplituden der Ein-Teilchen- und Ein-Loch-Hüpfprozesse haben wir mit unserem LCE-Schema nach Gleichung 6.9 bestimmt. Die endlichen Matrixelemente in Ordnung neun zeigen wir schematisch in Abbildung 6.8.

Unter den Ein-Teilchen-Hüpfprozessen für das $1/2$ -Plateau finden wir 13 symmetrisch verschiedene Hüpfprozesse. Der dominante Hüpfprozess beginnt in Ordnung zwei und das Teilchen hüpfte entlang $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$. Außerdem identifizieren wir zwei Prozesse in Ordnung vier, die das Teilchen in

Richtung $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix}$ bzw. $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ hüpfen lassen. Die anderen Prozesse beginnen in höheren Ordnungen. Interessanterweise entspricht der dominante Ein-Teilchen-Hüpfprozess dem korrelierten Hüpfen C_3 . Dieser Sprungprozess hat eine hohe Amplitude, so dass die Teilchen-Anregung entlang der x-Richtung sehr mobil ist. In y-Richtung treten für das Teilchen nur Sprungprozesse in höheren Ordnungen auf, so dass die Bewegung des Teilchens bei Dichte $1/2$ in diese Raumrichtung unterdrückt ist.

Für die Loch-Anregung finden wir 10 symmetrisch verschiedene Hüpfsterme in Ordnung neun. Der dominante Hüpfsterm beginnt in Ordnung vier und die Loch-Anregung springt entlang der Richtung $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}$. Weitere relevante Prozesse liegen erst in Ordnung sechs vor und diese Hüpfsterme entsprechen Ein-Loch-Prozessen entlang der Raumrichtungen $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\vec{\delta} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Betrachten wir die Ordnungen der Loch-Anregungen, so liegen in alle Raumrichtungen nur Hüpfsterme in recht hohen Ordnungen vor, was für sehr kleine Amplituden spricht. Die Bewegung der Loch-Anregung ist entlang der y-Richtung dispersiver, da in dieser Raumrichtung der dominante Hüpfsterm wirkt.

Im Vergleich zu der Teilchen-Anregung mit mehreren Hüpfprozessen niedriger Ordnung ist die Loch-Anregung relativ lokal. Physikalisch könnte dies ein Hinweis darauf sein, dass eine Kondensation der Teilchen-Anregung zu einer suprakristallinen Phase ein plausibles physikalisches Szenario darstellt. Wir erinnern daran, dass es von theoretischer Seite starke Indizien für dieses Szenario gibt (siehe [81] [57] oder Kapitel 1.6). Erinnern wir uns daran, dass die Plateau-Phase zusammenbricht, wenn man ein Magnetfeld anlegt, welches der Lücke entspricht $\Delta_L^{n=1/2} = h$, so korrespondiert die lokale Natur des Lochs zu einer großen Lücke. Physikalisch bedeutet dies, dass die linke Kante des intrinsischen Stabilitätsbereiches des $1/2$ -Plateaus bei recht niedrigen Magnetfeldern liegt. Dies macht es wahrscheinlich, dass dieser Punkt für das Phasendiagramm nicht relevant ist, da es eher zu einem Phasenübergang erster Ordnung kommt.

Die präsentierten Amplituden der Hüpfsterme und die chemischen Potenziale der Anregungen definieren den effektiven Ein-Teilchen- bzw. effektiven Ein-Loch-Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 im thermodynamischen Limes (siehe Gleichung 6.10). Eine Fourier-Transformation des effektiven Hamiltonoperators \mathcal{H}_1 nach Gleichung 6.11 diagonalisiert das Problem. Durch die Diagonalisierung ergibt sich die Dispersion der Anregung in Abhängigkeit von \vec{k} , x und J'/J . Wir haben die Dispersion nun für verschiedene Werte von x und J'/J betrachtet. Dabei fällt auf, dass unabhängig von x oder J'/J die Teilchen-Anregung mit Impuls $\vec{k} = \pi/2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ eine minimale Dispersion zeigt. Analog haben wir nach dem Maximum der Dispersion der Loch-Anregung gesucht. Das Maximum der Loch-Dispersion liegt erneut unabhängig von x und J'/J bei Impuls $\vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$. Mit diesen Informationen sind die Anregungs-Lücken $\Delta_T^{n=1/2}$ und $\Delta_L^{n=1/2}$ definiert.

In Abbildung 6.9 zeigen wir die Anregungs-Lücken für die Teilchen- und die Loch-Anregung des $1/2$ -Plateaus als Funktion von x , wobei wir uns speziell für die Konvergenz der Reihen im Limes $x \rightarrow 1$ interessieren. Wir beginnen unsere Betrachtung der Teilchen-Lücke für $J'/J = 0.5$. Die nackten Reihen in Ordnung neun und acht liegen fast aufeinander, was für die Konvergenz der nackten Reihe in Ordnung neun spricht. Betrachten wir nun Padé-Extrapolationen, so deutet

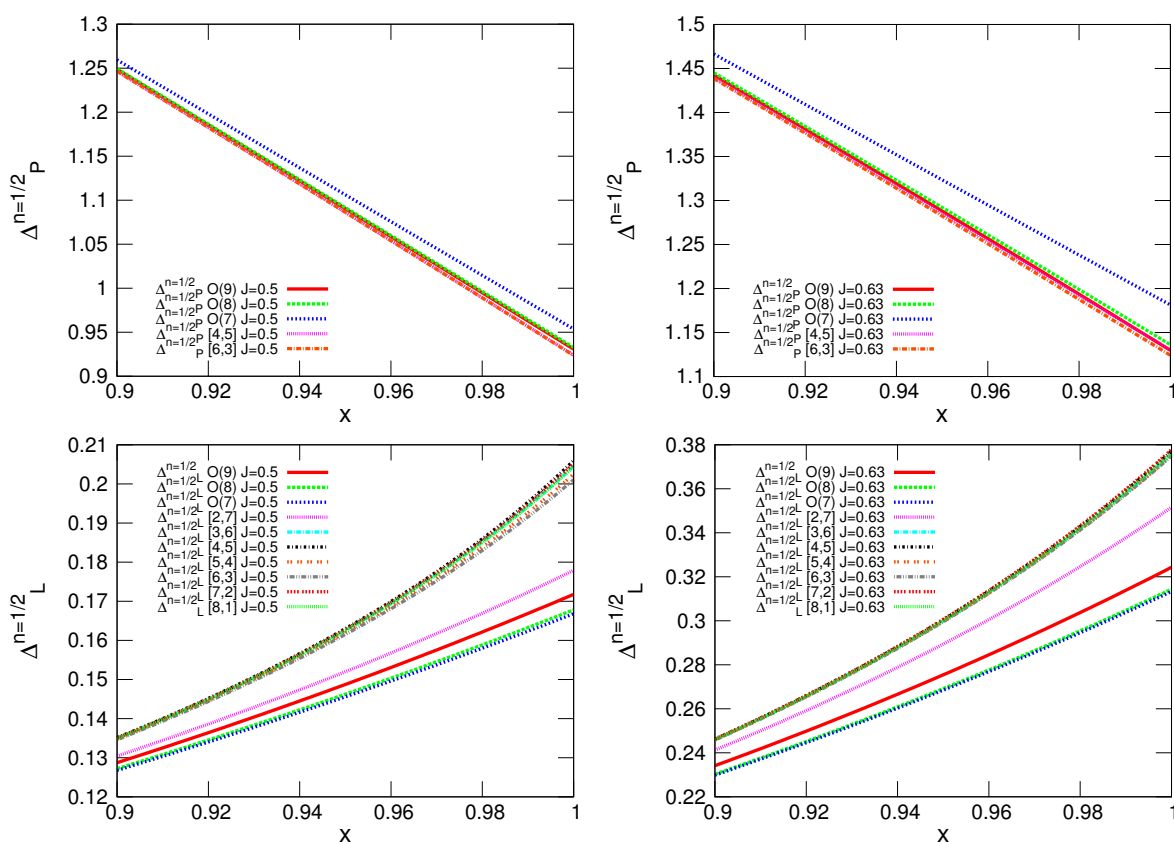


Abbildung 6.9: Die nackten Reihen und Extrapolationen der Anregungs-Lücken für das $1/2$ -Plateau als Funktion von $x = 0.9$ bis $x = 1$ sind dargestellt. Wir zeigen in den oberen (unteren) Bildern die Teilchen-Lücke (Loch-Lücke). Auf der linken (rechten) Seite des Bildes präsentieren wir die Anregungs-Lücken für $J'/J = 0.5$ ($J'/J = 0.63$).

das konsistente Verhalten der Padé-Extrapolationen auf eine konvergierte Reihenentwicklung der Teilchen-Lücke hin. Die Extrapolationen verlaufen sehr nahe der nackten Reihe in Ordnung neun und deuten nur auf ein leicht niedrigeren Wert für die Lücke $\Delta_T^{n=1/2}$ bei $J'/J = 0.5$ hin.

Die nackten Reihen für $J'/J = 0.63$ verhalten sich analog zum Fall $J'/J = 0.5$. In Ordnung sieben sehen wir noch sichtbare Unterschiede der Lücke für $x = 1$, aber die nackten Reihen in Ordnung acht und neun liegen (fast) aufeinander, was für die Konvergenz der nackten Reihe in Ordnung neun spricht. Betrachten wir die Extrapolationen, so finden wir zwei Extrapolationen, die dem Verlauf der nackten Reihe in Ordnung neun folgen. Allgemein sind die Extrapolationen für $J'/J = 0.63$ eher konsistent mit der nackten Reihe in Ordnung neun. Zusammenfassend scheint die nackte Reihe in Ordnung neun für beide Werte von J'/J bereits gut konvergiert.

Die nackten Reihen der Loch-Anregung für $J'/J = 0.5$ zeigen zunächst ein schwieriges Verhalten. In Ordnung sieben und acht liegen die nackten Reihen übereinander, aber in Ordnung neun sehen wir noch eine sichtbare Veränderung des Kurvenverlaufs, der die Loch-Lücke für $x = 1$ zu höheren Werten verschiebt. Die nackte Reihe in Ordnung neun ist noch nicht konvergiert. Die Padé-Extrapolationen liegen aber (abgesehen von einer Extrapolation) alle aufeinander und deuten sehr konsistent auf einen Kurvenverlauf oberhalb der nackten Reihe in Ordnung neun hin. Das angesprochene, inkonsistente Verhalten der nackten Reihen und das wiederum konsistente

Verhalten der Extrapolationen beobachten wir auch für $J'/J = 0.63$. Interessanterweise liegen die Extrapolationen in diesem Fall sogar noch dichter zusammen und zeigen einen einheitlichen Verlauf. Zusammenfassend ist die Loch-Lücke für verschiedene J'/J in Ordnung neun noch nicht konvergiert, aber die Extrapolationen zeigen ein überzeugend konsistentes Bild und sollten für die Bestimmung der Loch-Lücken für $x = 1$ genutzt werden.

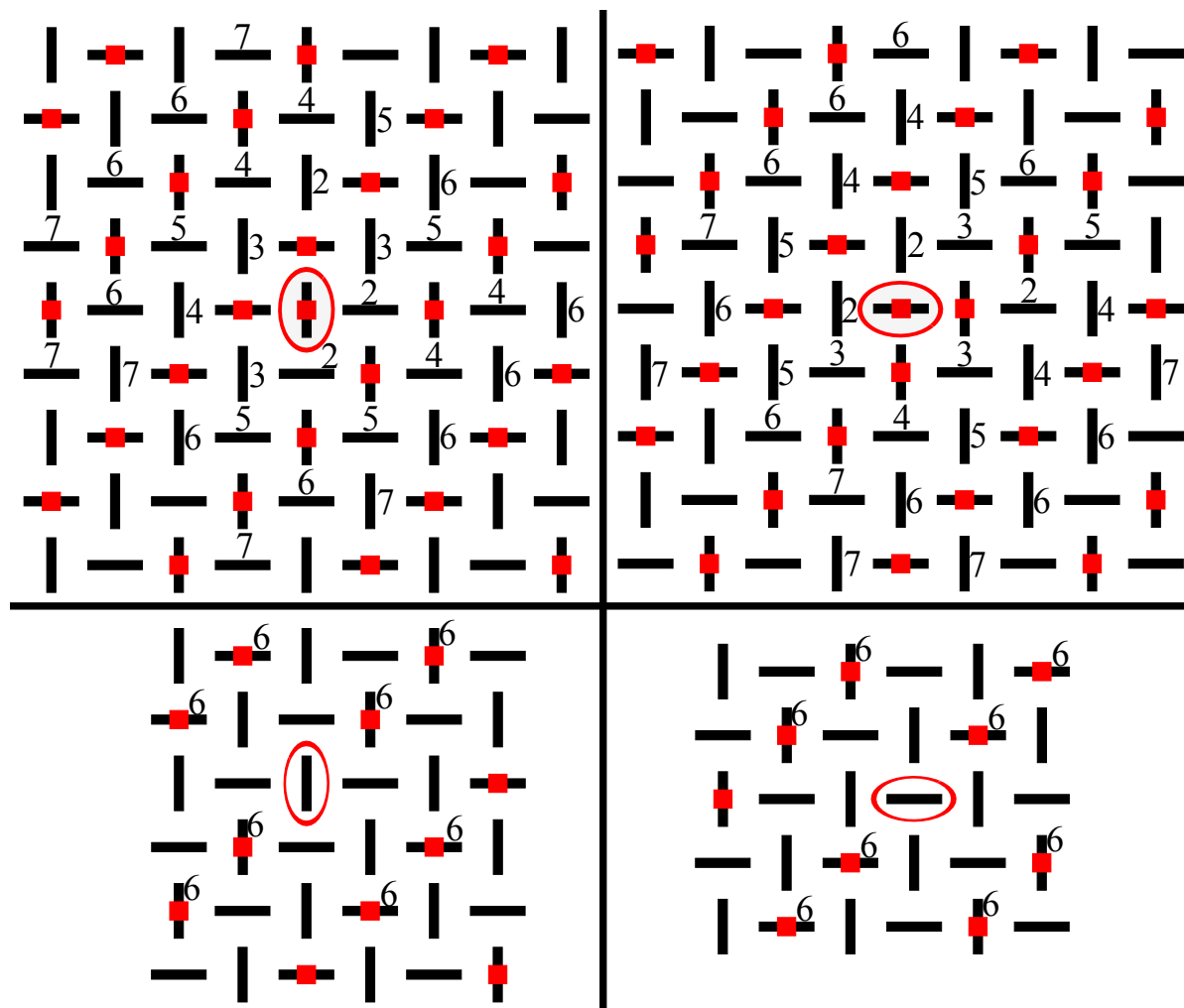


Abbildung 6.10: Wir zeigen die Hüpfp Prozesse der Anregungen in der Streifen-Struktur der Dichte $1/3$. Im oberen (unteren) Abschnitt zeigen wir die Teilchen-Anregung (Loch-Anregung). Die Darstellung der Hüpfp Prozesse ist analog zu Abbildung 6.8. Die Einheitszelle der Super-Struktur hat vier kristallographisch verschiedene Plätze für das Teilchen und zwei entsprechende Plätze für die Loch-Anregung. Aufgrund von Symmetrien der Streifen-Struktur, zeigen wir nur die Hüpfp Prozesse für zwei der vier Teilchen-Plätze im oberen Abschnitt und die Hüpfp Terme der nicht dargestellten Plätze ergeben sich durch eine Rotation um 180° um den Mittelpunkt der Einheitszelle, die das Teilchen enthält.

Wir diskutieren nun die Anregungen in der Streifen-Struktur der Dichte $1/3$. Zuerst betrachten wir die endlichen Hüpfp-Matrixelemente, die wir in Ordnung sieben für das Teilchen und in Ordnung sechs für die Loch-Anregung berechnet haben. Die Einheitszelle besteht aus sechs Dimer-Plätzen mit zwei belegten und vier unbelegten Dimer-Plätzen im Grundzustand. Das System zerfällt in unserem Schema erneut in ein Untergitter für Teilchen-Anregungen und eines für Loch-Anregungen. Eine Teilchen-Anregung liegt hier in einem effektiven Untergitter vor, das eine Einheitszelle aus vier Plätzen hat. Analog ist das effektive Gitter der Loch-Anregungen aus zwei

kristallographisch verschiedenen Plätzen aufgebaut. Für Dichte $1/3$ ist sowohl bei der Teilchen-Anregung als auch bei der Loch-Anregung explizit auf die Indizes der effektiven Einheitszelle r und r' der Hüpf-Matrixelemente nach Gleichung 6.9 zu achten. In Abbildung 6.10 zeigen wir die Hüpfprozesse der Teilchen- und Loch-Anregung für die Streifen-Struktur bei Dichte $1/3$.

Die Hüpfprozesse einer Teilchen-Anregung auf zwei der vier Gitterplätze der Einheitszelle sind in Abbildung 6.10 dargestellt. Durch Rotationen um 180° lassen sich die Hüpfprozesse für Teilchen auf den nicht dargestellten Plätzen bestimmen. Für jeden Gitter-Platz der Einheitszelle r finden wir in Ordnung sieben insgesamt 31 symmetrisch verschiedene Hüpfprozesse. Die dominanten Prozesse unter den Hüpfprozessen sind drei Hüpfsterme, die in Ordnung zwei beginnen, und weitere drei Hüpfsterme, die in Ordnung drei beitragen. Für die weiteren Prozesse verweisen wir auf Abbildung 6.10. Eine bemerkenswerte Eigenschaft der Teilchen-Anregung für Dichte $1/3$ ist, dass wir mehrere Hüpfsterme identifizieren, die in niedrigen Ordnungen beginnen. Liegen in Ordnung zwei und drei für ein Teilchen der Dichte $1/2$ bereits zwei solcher Hüpfprozesse vor, so hat man für das Teilchen der Dichte $1/3$ an jedem Gitterplatz sogar sechs. Das Teilchen für Dichte $1/3$ ist deswegen sehr mobil. Dies liefert auch einen möglichen Erklärungsansatz dafür, warum das Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells selbst für höhere Dichten oberhalb des $1/2$ -Plateaus von einer $1/3$ -suprakristallinen Phase dominiert wird [81] [57]. Wie angesprochen, profitieren Teilchen-Anregungen in der Super-Struktur des $1/3$ -Plateaus stärker von der exotischen Kinetik des Shastry-Sutherland-Modells, als Teilchen-Anregungen in der $1/2$ -Super-Struktur.

Für die Loch-Anregung bei $n = 1/3$ finden wir in Ordnung sechs insgesamt 4 symmetrisch verschiedene Hüpfsterme für jeden Gitter-Platz der Einheitszelle. Die $1/3$ -Loch-Anregung ist damit ähnlich statisch wie die Ein-Teilchen-Anregung im ursprünglichen Shastry-Sutherland-Modell. Hinsichtlich der linken Kante des intrinsischen Stabilitätsbereiches des $1/3$ -Plateaus kann man erneut davon ausgehen, dass eine Kondensation der Löcher erst für recht kleine externe Magnetfelder $\Delta_{\text{L}}^{n=1/3} = h$ erreicht wird. Daher erscheint eine Kondensation der Löcher im System unwahrscheinlich, so dass ein Übergang erster Ordnung plausibel ist.

Wir werden erneut nicht im Detail auf die volle Dispersion der Anregungen eingehen. Es sei lediglich darauf hingewiesen, dass die Fourier-Transformation das effektive Ein-Teilchen-Problem noch nicht vollständig diagonalisiert, da die effektiven Einheitszellen für Teilchen und Loch aus vier bzw. zwei Gitter-Plätzen bestehen. Für das Teilchen ist der Impuls $\vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ im energetisch niedrigsten Band unabhängig von x oder J'/J das globale Minimum und definiert damit die Teilchen-Lücke $\Delta_{\text{T}}^{n=1/3}$. Das Maximum der Loch-Dispersion finden wir auch bei $\vec{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ im energetisch höchsten Energieband, so dass $\Delta_{\text{L}}^{n=1/3}$ als Funktion von x und J'/J vorliegt.

Wir zeigen die Ergebnisse der Anregungslücken als Funktion von x in Abbildung 6.11, wobei wir uns in der Abbildung erneut auf den Bereich von $x = 0.9$ bis $x = 1$ beschränken. Die Konvergenz im Limes $x \rightarrow 1$ wird erneut speziell für die Werte $J'/J = 0.5$ und 0.63 betrachtet. Zuerst diskutieren wir die Teilchen-Anregung für $J'/J = 0.5$. Betrachten wir die nackten Reihen, so korrigieren die höheren Ordnungen den Kurvenverlauf dahingehend, dass für $x = 1$ mit steigender

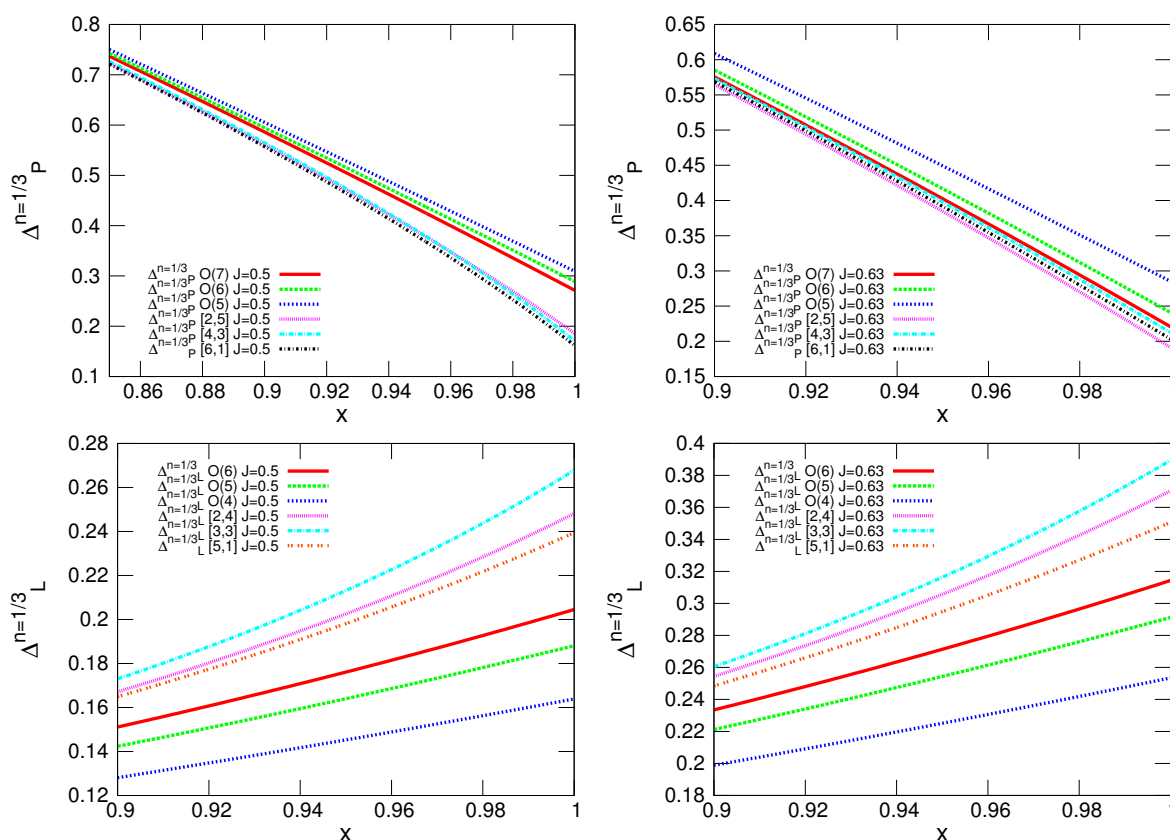


Abbildung 6.11: Die nackten Reihen und Extrapolationen der Anregungs-Lücken für das $1/3$ -Plateau als Funktion von $x = 0.9$ bis $x = 1$ sind dargestellt. Wir zeigen in den oberen (unteren) Bildern die Teilchen-Lücke (Loch-Lücke). Auf der linken (rechten) Seite der Abbildung präsentieren wir die Anregungs-Lücken für $J'/J = 0.5$ ($J'/J = 0.63$).

Ordnung niedrigere Werte für die Teilchen-Lücke vorliegen. Da die nackten Reihen in höheren Ordnungen nicht aufeinander liegen, scheint die Reihe noch nicht konvergiert zu sein. Dieser Eindruck wird von Padé-Extrapolationen bestätigt. Dabei zeigen die Padé-Extrapolationen ein konsistentes Bild und die extrapolierten Reihen liegen sichtbar dicht zusammen. Die Padé-Extrapolationen deuten für $x = 1$ auf eine deutlich niedrigere Teilchen-Lücke als die nackten Reihen, wobei das Ergebnis der Extrapolationen konsistent ist.

Für $J'/J = 0.63$ verhalten sich die nackten Reihen analog. Die höheren Ordnungen führen konsistent zu einer Korrektur des Kurvenverlaufs zu niedrigeren Energien, so dass für $x = 1$ mit zunehmender Ordnung eine niedrigere Teilchen-Lücke vorliegt. Die Unterschiede der nackten Reihen sind deutlich zu sehen und die nackte Reihe in Ordnung sieben ist somit noch nicht konvergiert. Die Extrapolationen liegen aber erneut sehr dicht beieinander. Die Extrapolationen führen für $x = 1$ auf eine Teilchen-Lücke, die nur leicht niedriger liegt, als das Ergebnis der nackten Reihe in Ordnung sieben. Zusammengefasst sind die Extrapolationen für die Teilchen-Anregung konsistent und die nackte Reihe ist für $J'/J = 0.5$ und 0.63 in der vorliegenden Ordnung nicht konvergiert, so dass eine Mittelung über die Extrapolationen eine nützliche Abschätzung der Teilchen-Lücke liefern sollte.

Zuletzt betrachten wir die Lücke der Loch-Anregung bei Dichte $1/3$ für $J'/J = 0.5$ und $J'/J = 0.63$, da in beiden Fällen ein analoges Verhalten vorliegt. Die nackten Reihen zeigen allgemein noch deutliche Unterschiede. Mit steigender Ordnung finden wir für $x = 1$ konsistent eine sukzessiv höher liegende Loch-Lücke. Die Extrapolationen deuten, dem Verhalten der nackten Reihen entsprechend, auf markant höhere Lücken für die Loch-Anregung bei $x = 1$ hin. Die Padé-Extrapolationen liefern allerdings in beiden Fällen kein konsistentes Ergebnis für die Lücke, so dass lediglich eine Mittelung der Padé-Extrapolationen eine Abschätzung der Loch-Lücke erlaubt. Wir nehmen an dieser Stelle vorweg, dass wie erwartet ein Phasenübergang erster Ordnung zwischen den Plateaus der Dichte $1/3$ und $1/4$ auftritt und die Anregungs-Lücke der $1/3$ -Loch-Anregung physikalisch nicht relevant ist, weshalb sich eine intensivere Diskussion dieser Größe nicht anbietet.

6.5 Phasendiagramm und Vergleich mit anderen Methoden

In diesem Unterkapitel fassen wir die relevanten Ergebnisse unserer LCE-Methode aus den Unterkapiteln 6.3 und 6.4 zu einem Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells zusammen. Die Grundzustandsenergien aus Unterkapitel 6.3 definieren die Energie einer Plateau-Phase im externen Feld h nach Gleichung 6.1. Mit den feldabhängigen Energien können wir die Phasenübergänge erster Ordnung zwischen zwei Plateaus angeben (siehe Gleichung 6.2). Unsere Ergebnisse legen die Übergänge zwischen $1/2$ und $2/5$, $2/5$ und $1/3$, sowie $1/3$ und $1/4$ fest (durchgezogene Linien in dem rechten Bild von Abbildung 6.12). Konkret nutzen wir für die Grundzustandsenergien nicht die nackten Reihen, sondern Padé-Extrapolationen. Die verwendeten Grundzustandsenergien sind explizit durch die Extrapolationen $[7, 2]$ für $n = 1/2$, $[6, 3]$ für $n = 2/5$, $[6, 3]$ für $n = 1/3$ und $[3, 3]$ für $n = 1/4$ gegeben.

Es zeigt sich zudem, dass die kritischen Punkte der Loch-Anregungen, wie vermutet, nicht relevant sind, da die genannten Phasenübergänge erster Ordnung noch innerhalb des intrinsischen Stabilitätsbereiches auftreten. Dagegen sind die kritischen Punkte der Teilchen-Anregungen für $n = 1/2$ und $1/3$ im System realisiert (gestrichelte Linien in dem rechten Bild von Abbildung 6.12). Genauer gesagt nutzen wir die Padé-Extrapolationen $[4, 5]$ für das Teilchen bei $n = 1/2$ und $[4, 3]$ für das Teilchen bei $n = 1/3$. Die verwendeten Extrapolationen für die Grundzustandsenergien und Teilchen-Lücken sind aus den Betrachtungen der entsprechenden Kapitel motiviert.

Wir haben die angesprochenen Ergebnisse im rechten Bild von Abbildung 6.12 zu einem Phasendiagramm vereint, wobei wir die fünf Grenzkurven unseres Phasendiagramms nun mit den analogen Phasengrenzen im iPEPS-Phasendiagramm der Arbeit [57] vergleichen (siehe linkes Bild von Abbildung 6.12). Wir beginnen beim Übergang erster Ordnung zwischen dem $1/4$ - und $1/3$ -Plateau, das auch von der iPEPS bestätigt wird. Die Grenzlinien sind annähernd identisch und im gesamten Parameterbereich bis $J'/J = 0.7$ konsistent. Wir finden außerdem eine kritische Linie, die den Übergang des $1/3$ -Plateaus zur $1/3$ -suprakristallinen Phase angibt. Die von uns bestimmte Linie ist für große Werte von J'/J nicht konsistent zum iPEPS-Ergebnis, obwohl

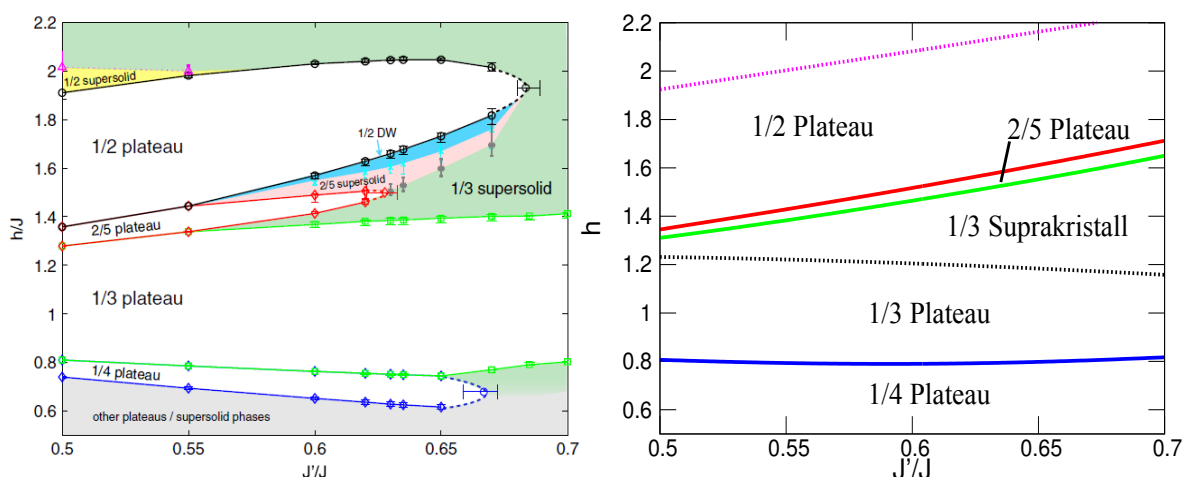


Abbildung 6.12: Wir zeigen das Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells im Parameter-Raum $0.5 \leq J'/J \leq 0.7$ für den Störparameter und $0.5 \leq h \leq 2.2$ für das externe Feld, wobei diese Einschränkung den Fokus auf den materialrelevanten Bereich bei mittlerer Dichte lenkt. Im linken Bild zeigen wir das iPEPS Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells [57]. Das rechte Bild zeigt das Phasendiagramm unseres LCE-Verfahrens. Hier sind Phasenübergänge erster (zweiter) Ordnung durch durchgezogene (gestrichelte) Linien dargestellt.

beide Methoden physikalisch einen Übergang von einem Plateau zu einer suprakristallinen Phase derselben Kommensurabilität aufweisen. Wir kommen auf dieses Problem noch genauer zu sprechen.

Darüberhinaus haben wir in unserem Phasendiagramm einen Übergang erster Ordnung zwischen dem $1/3$ -Plateau und dem $2/5$ -Plateau in gesamten Bereich von J'/J angenommen. Die iPEPS bestätigt diesen Übergang für $J'/J \leq 0.55$. Für größere J'/J wird ein Phasenübergang zwischen der $1/3$ -suprakristallinen Phase und dem $2/5$ -Plateau gefunden, so dass in diesem Bereich per Definition die Ergebnisse verschieden sind. Für $J'/J \approx 0.5$ sind die Ergebnisse der LCE-Methode konsistent mit den iPEPS-Ergebnissen. Analoges zeigt sich auch für den Übergang erster Ordnung zwischen dem $2/5$ - und $1/2$ -Plateau. Die Beschreibung des Übergangs zwischen zwei Plateaus wird von der iPEPS nur für $J'/J \approx 0.5$ bestätigt, für den unsere Ergebnisse konsistent mit der iPEPS sind. Die Natur des Übergangs verändert sich für größere J'/J , so dass sich unsere Phasenlinie aufgrund unseres Ansatzes von dem Ergebnis der iPEPS unterscheidet. Zuletzt sprechen wir über die kritische Linie, die den Übergang von einem $1/2$ -Plateau zu einer $1/2$ -suprakristallinen Phase markiert. Unser physikalisches Bild von der Kondensation der Teilchen-Anregung des $1/2$ -Plateaus als treibender Mechanismus des Übergangs wird von der iPEPS erneut nur für $J'/J \approx 0.5$ bestätigt. In diesem Bereich sind die Ergebnisse der beiden Methoden konsistent. Über $J'/J = 0.55$ hinaus unterscheiden sich die Ergebnisse, was erneut an der Tatsache liegt, dass wir keine Ergebnisse zwischen kristallinen und suprakristallinen Phasen verschiedener Kommensurabilität betrachtet haben.

Zusammengefasst ist es uns mit der LCE-Methode möglich, quantitativ korrekte Ergebnisse zu bekommen, solange die erwarteten Übergänge korrekt von uns vorhergesagt werden können. Ein Problem ist allerdings die kritische Kurve des $1/3$ -Plateaus, die trotz der konsistenten Natur des Übergangs nicht quantitativ mit der iPEPS übereinstimmt. Wir werden gleich noch zeigen,

dass die kritische Linie auch mit weiteren Methoden inkonsistent ist. Wir stellen hier noch den bemerkenswerten Punkt heraus, dass das Phasendiagramm des Shastry-Sutherland-Modells der iPEPS im Parameterbereich $0.55 \leq J'/J \leq 0.7$ und oberhalb der Dichte $1/3$, von suprakristallinen Phasen dominiert wird. Dies macht es uns unmöglich, diesen Bereich mit LCE-Verfahren angemessen zu beschreiben, da die Übergänge und Phase aktuell nicht mit unseren Verfahren zu behandeln sind.

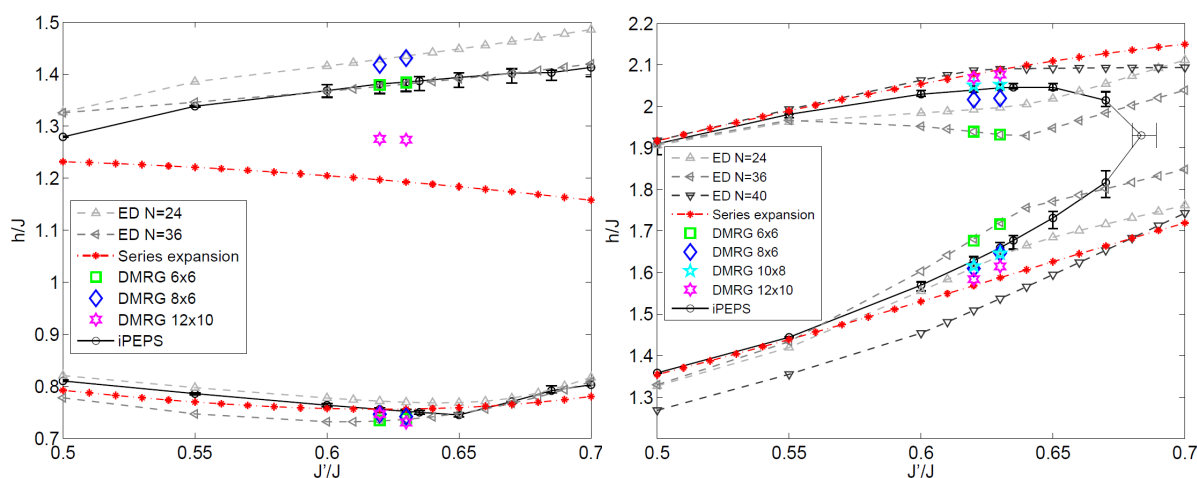


Abbildung 6.13: Wir zeigen die Phasengrenzen für das $1/3$ -Plateau ($1/2$ -Plateau) zwischen $0.5 \leq J'/J \leq 0.7$ im linken (rechten) Bild, die aus verschiedenen Verfahren bestimmt wurden [57] [58]. Die iPEPS- und Reihenentwicklungs-(series-expansion-)Kurven sind identisch zu den Kurven in den Phasendiagrammen aus Abbildung 6.12.

Wir betrachten unsere Ergebnisse für die Plateau-Breiten des Plateaus der Dichte $1/2$ und $1/3$ nun zusammen mit verschiedenen Verfahren in Abbildung 6.13. Die iPEPS-Ergebnisse der Abbildung sind identisch zu den Kurven aus Abbildung 6.12. Weitere abgebildete Ergebnisse stammen aus ED und DMRG-Rechnungen auf endlichen Systemen (siehe [58] für mehr Details). Für das $1/2$ -Plateau bestätigt sich im Wesentlichen unser Eindruck, den wir aus der Gegenüberstellung mit der iPEPS gewonnen haben. Für $0.5 \leq J'/J \leq 0.55$ finden die meisten Methoden eine konsistente obere und untere Phasengrenze für das $1/2$ -Plateau. Im Bereich größerer J'/J finden die verschiedenen Methoden verschiedene Ergebnisse. Die Probleme unserer Methode beruhen auf der Änderung der Natur des Phasenübergangs. Es treten hauptsächlich Übergänge zwischen suprakristallinen Phasen und Plateaus auf, wobei diese Übergänge auch mit Diagonalisierungsmethoden sehr schwer zu beschreiben sind.

Wie diskutieren nun die Methoden-Gegenüberstellung für die obere und untere Phasengrenze des $1/3$ -Plateaus. Wir konzentrieren uns hierbei auf die Gegenüberstellung der verschiedenen Methoden. Bei der unteren Grenze des $1/3$ -Plateaus liegt ein Phasenübergang erster Ordnung zwischen den Plateaus der Dichte $1/3$ und $1/4$ vor. Diesen Übergang können alle Methoden quantitativ erfassen. Darüberhinaus zeigen die Verfahren auch qualitativ konsistente Ergebnisse für die obere Kante des $1/3$ -Plateaus. Die iPEPS bestimmt für die obere Grenze des $1/3$ -Plateaus bis etwa $J'/J = 0.55$ einen Phasenübergang erster Ordnung und dann einen Übergang zu einer $1/3$ -suprakristallinen Phase. Wir erkennen in Abbildung 6.13, dass im gezeigten Parameterbereich noch Diskrepanzen auftreten. Abgesehen von der PCUT und der DMRG, sehen die weiteren

Methoden eine Phasengrenze mit leicht positiver Steigung. Die ED ist für beide berechneten Systeme überraschend konsistent zur iPEPS. Interessanterweise liegt das Ergebnis für das größte betrachtete System der DMRG-Rechnungen zwischen der PCUT und der iPEPS. Des Weiteren zeigt das angesprochene DMRG-Ergebnis eine negative Steigung wie die PCUT. Insgesamt zeigt sich die Bestimmung der oberen Grenze des $1/3$ -Plateaus als besonders schwierig, da alle verwendeten Methoden mit Problemen konfrontiert sind.

Wir kommentieren die Ursachen für die quantitativen Unterschiede. In der ED enthalten die betrachteten endlichen Systeme zunächst finite-size Effekte, so dass es schwierig ist einen Phasenübergang zweiter Ordnung aus einem endlichen System für den thermodynamischen Limes zu extrahieren. Die iPEPS kann das System durch kontinuierliche Variablen beschreiben, was es möglich macht eine Phase der Dichte $1/3$ von einer suprakristallinen Phase mit leicht höherer Dichte als $1/3$ zu unterscheiden. Die Methode nutzt dazu Optimierungsroutinen, um die Phasen zu detektieren. Daher ist es plausibel einen Fehler auf die oberen Grenzkurven der Plateaus der Dichte $1/2$ und $1/3$ zu erwarten, da die beiden Phasen in der Nähe der Grenzkurve energetisch sehr nahe beieinander liegen. Zuletzt sei betont, dass auch unsere Methode einen Fehlerbalken enthält, aufgrund der Extrapolation nach $x = 1$. Dies ist insbesondere der Fall, wenn der Referenz-Zustand nicht optimal gewählt wird. Erinnern wir uns an die Rücktransformation eines Triplets ins magnetische Bild (siehe Kapitel 3.2), so haben wir ein charakteristisches Magnetisierungsprofil gesehen. Für größere Werte von J'/J liegen an den benachbarten Plätze einer Anregung im Wesentlichen eine Magnetisierungen vor, die für große J'/J Nahe der antiferromagnetischen Konfiguration $|s\rangle + |t^0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$ ist. Unser Startpunkt könnte dies ausnutzen und mit Singulets, t^+ -Triplets und antiferromagnetischen Konfigurationen an einem Dimer arbeiten, um für größere J'/J das System von einem besseren Referenz-Zustand heraus zu entwickeln, was den Fehlerbalken der Methode reduzieren sollte.

6.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel haben wir das zweidimensionale Shastry-Sutherland-Modells für Dichten $1/4 \leq n \leq 1/2$ betrachtet. Wir sind speziell an einer Beschreibung der Plateaus interessiert, um die Phasengrenzen für die Plateaus der Dichte $1/3$ und $1/2$ mit experimentellen Ergebnissen von $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ zu vergleichen. Dazu haben wir ein Verfahren auf Basis von LCE-Methoden präsentiert, das als Ansatz die Realisierung von Streifen-Strukturen im System nutzt. Die Literatur und unsere Ergebnisse des $1/4$ -Plateaus der 4-Bein-Röhre deuten darauf hin, dass es plausibel ist, das System um die Streifen-Strukturen als Referenz-Zustand zu entwickeln. Zusammengefasst werden Wechselwirkungen zum ungestörten Teil des Hamiltonoperators addiert, die in der Störung wieder subtrahiert werden, so dass für den Störparameter $x = 1$ wieder das ursprüngliche Shastry-Sutherland-Modell im externen Magnetfeld bei endlicher Magnetisierung rekonstruiert wird. Methodisch haben wir zeigen können, dass wir den Limes $x \rightarrow 1$ typischerweise mit einem akzeptablen Fehlerbalken sowohl für die Grundzustandsenergien E_0^n als auch die Anregungslücken Δ_T^n und Δ_L^n beschreiben können.

Unsere Methode erlaubt es per Konstruktion, Phasenübergänge erster Ordnung zwischen zwei Plateau-Phasen sowie Übergänge zwischen Plateaus und suprakristallinen Phasen gleicher Komensurabilität zu bestimmen. Wir konnten durch einen Methodenvergleich zeigen, dass wir überzeugende Ergebnisse durch unser Verfahren gewinnen, solange die Natur des Phasenübergangs von uns korrekt beschrieben wird. Insbesondere kann man über die Breite der Plateaus bei Dichte $1/3$ und $1/2$ im Experiment und Theorie das Kopplungsverhältnis auf $J'/J = 0.63$ bestimmen. Problematisch können die oberen Phasengrenzen der Plateaus der Dichte $1/2$ und $1/3$ sein. Mit den verschiedenen Methoden ergeben sich noch erkennbare Unterschiede für große, aber für das Experiment realistische Werte von J'/J . Die Phasengrenzen können zwar qualitativ korrekt abgeschätzt werden, so dass sich konsistente Übereinstimmungen mit dem Experiment zeigen. Trotzdem sind weitere Untersuchungen nötig. Die angesprochenen Probleme werden zum Teil induziert, weil die Natur des Phasenübergangs komplex ist. Die angesprochenen Übergänge können von Diagonalisierungen und variationellen Rechnungen nur schwer beschrieben werden. Gleichzeitig können wir einige Übergänge im Rahmen unserer Methoden nicht behandeln. Im Speziellen haben wir noch keine Beschreibung für suprakristalline Phase. Neben Plateau-Phasen dominieren suprakristalline Phase den materialrelevanten Bereich des Phasendiagramms.

Kapitel 7

Zusammenfassung

7.1 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit haben wir uns mit einer effektiven Quasi-Teilchen-Beschreibung der Dimer-Phase [85] [87] des Shastry-Sutherland-Modells [1] im externen Magnetfeld bei Temperatur $T = 0$ beschäftigt. Das Shastry-Sutherland-Modell ist aufgrund des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ in den Fokus des theoretischen Interesses geraten. Wir haben die Literatur zum Material und zum Shastry-Sutherland-Modell beleuchtet und konnten so zeigen, dass das $SU(2)$ -invariante Shastry-Sutherland-Modell ein geeignetes mikroskopisches Modell darstellt, um die Eigenschaften des magnetischen Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ im externen Magnetfeld zu beschreiben.

Das Shastry-Sutherland-Modell zeichnet sich insbesondere dadurch aus, dass es sich um ein stark frustriertes Quanten-Spin-Modell handelt. Zu Beginn haben wir die Betrachtung frustrierter Modelle und Materialien als interessantes Forschungsfeld dadurch motiviert, dass emergente Phänomene auftreten können [2]. Ein interessantes Beispiel für Materialien oder Modelle, in denen emergente Phänomene häufig auftreten sind frustrierte Quantenmagneten im externen Feld. Nennenswerte Beispiele für emergente Phänomene sind in diesem Kontext die Stabilisierung exotischer bosonischer Quantenphasen, wie Mott-Isolatoren, supraflüssige Phasen, supra-kristalline Phasen oder Paar-Kondensations-Phasen. Ein solches Verhalten zeigt sich speziell bei $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ sowie dem Shastry-Sutherland-Modells im externen Magnetfeld. Die Magnetisierung zeigt unter anderem markante Magnetisierungsplateaus [37], die emergente bosonische Mott-Isolatoren mit spontaner Brechung der Translationssymmetrie darstellen.

Historisch hat sich mit exakten Diagonalisierungen und klassischen Näherungen [85] [86] von perturbativ bestimmten, effektiven Modellen in niedrigen Ordnungen, rasch das Bild des Magnetisierungsplateaus als Quasi-kristalline Phasen etabliert. In diesem Bild stellen Ein-Triplon-Anregungen des Systems die physikalisch relevante bosonischen Anregungen des Systems dar. Die Frustration des Systems unterdrückt die Kinetik dieser Anregung stark, so dass sich in einer effektiven Beschreibung das Shastry-Sutherland-Modell auf ein hardcore-bosonisches Modell von Teilchen-Anregungen mit starken repulsiven Teilchen-Teilchen-Wechselwirkungen abbildet.

In diesem System stabilisieren sich kristalline Phasen aus ortsfest lokalisierten Teilchen, die sich über die klassische Minimierung von Wechselwirkungen erklären. In dieser Beschreibung erschließen sich die prominenten Plateaus der Magnetisierung $1/3M_{\text{sat}}$ und $1/2M_{\text{sat}}$. Die ebenfalls gemessenen Plateaus der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$ und $1/4M_{\text{sat}}$ benötigen aufgrund der geringeren Magnetisierung die Kenntnis der repulsiven Teilchen-Teilchen-Wechselwirkungen zu größeren Abständen. Diese Wechselwirkungen können durch effektive Modelle auf Basis von Reihenentwicklung in hohen Ordnungen [87] oder nicht-perturbativen Ansätzen [90] bestimmt werden. Die Lösungen der angesprochenen effektiven Modelle können weitere Plateaus vorhergesagen, die im Nachhinein auch gemessen wurden [60] [61] [62]. Es treten aber auch inkonsistente Punkte auf, da insbesondere die prominenten Plateaus der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$ und $1/4M_{\text{sat}}$ durch die klassische Lösung des perturbativ bestimmten effektiven Modells nicht realisiert werden [87].

Ein Teil dieser Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment kann durch die zusätzliche Betrachtung von DM-Wechselwirkungen aufgehoben werden [97]. Genauer gesagt kann das Bild der Plateaus aus klassischen Belegungen der lokalisierten Teilchen um zusätzliche Kinetik ergänzt werden, die aus der DM-Wechselwirkung folgt. Das so erhaltene Bild semi-klassischer Plateaus aus lokalisierten Teilchen-Anregungen begünstigt die Plateaus der Magnetisierung $1/8 M_{\text{Sat}}$ und $1/4 M_{\text{Sat}}$, so dass annähernd der experimentelle Verlauf der Magnetisierungskurve reproduziert wird [97]. Das mikroskopische Magnetisierungsprofil der Plateaus des Experimentes kann aber weiterhin nicht konsistent mit diesem erweiterten Bild erklärt werden [97].

Neben zusätzlichen Wechselwirkungen kann auch eine Betrachtung des Modells auf geometrisch reduzierten Systemen neue Impulse für die Aufhebung der Diskrepanzen liefern. Hier ist insbesondere der Vergleich der DMRG-Ergebnisse und der klassischen Lösung des effektiven Modells zu hoher Ordnung für die Shastry-Sutherland-2-Bein-Röhre aus Arbeit [98] zu nennen. Der Vergleich bestätigt für einen großen Teil des Phasendiagramms das etablierte Bild der Plateaus aus lokalisierten Teilchen-Anregungen. Bemerkenswert ist, dass ein Plateau der Magnetisierung $1/5 M_{\text{Sat}}$ in einem Parameterbereich, der geeignet ist für $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$, stabilisiert wird. Dieses Plateau erweist sich als Lokalisierung eines gebundenen Drei-Teilchen-Zustandes mit der Quantenzahl $S = 2$. Hier erkennen wir einen ersten Hinweis darauf, dass die Beschreibung der Magnetisierungsplateaus durch kommensurable Phasen aus Anregungen mit $S = 1$ nicht unbedingt das richtige Bild der Physik sein muss.

Das etablierte Bild der effektiven Beschreibung erklärt die Magnetisierungsplateaus des Shastry-Sutherland-Modells durch die statische Natur der elementaren Anregungen. Die statische Natur ist insbesondere durch starke Wechselwirkungen der Anregungen begleitet, die im System zur Lokalisierung der Anregungen zu kommensurablen Phasen führt. Die kommensurablen Phasen sind durch eine Anregungs-Lücke geschützt, die das System in dieser Phase gegen äußere Einflüsse des Magnetfeldes stabil macht, so dass es zu der Plateau-artigen Magnetisierung kommt. Dieses jahrelang vorherrschende Bild haben wir im Verlauf dieser Arbeit begründet in Frage gestellt. Unsere Ergebnisse werden zudem durch aktuelle iPEPS-Ergebnisse untermauert [92], denn die angesprochenen Resultate sprechen zwar ebenfalls für die Lokalisierung von Anregungen zu

kommensurablen Strukturen, doch ist die Anregung hier ein Zwei-Teilchen-Zustand. Diese alternative Erklärung scheint hinsichtlich der Inkonsistenzen zwischen Experiment und Theorie ein vielversprechender Ansatz zur Erklärung der Magnetisierungsplateaus zu sein.

Der erste Fokus dieser Arbeit liegt auf der effektiven Beschreibung des Shastry-Sutherland-Modells auf einer reduzierten Geometrie, deren Dimension zwischen einer und zwei Dimensionen liegt. Durch diese Wahl der Geometrie ist ein direkter Vergleich unserer effektiven Beschreibung mit DMRG-Resultaten möglich. Konkret haben wir uns für die 4-Bein-Röhre entschieden, einem System, das topologisch äquivalent zu einem Zylinder ist, wobei der Umfang des Systems vier effektiven Dimer-Plätzen entspricht. Dies stellt eine Erweiterung der Arbeit [98] dar, die maßgeblich das Bild der kommensurablen kristallinen Phasen aus Ein-Teilchen-Anregungen untermauert. Das effektive Modell wurde zunächst mit Hilfe der klassischen Lösung behandelt, da dieses Verfahren besonders geeignet ist, die Plateaus aus lokalisierten Ein-Teilchen-Anregungen zu beschreiben. Auffallend ist, dass die prominenten Plateaus des zweidimensionalen Modells mit der Magnetisierung $1/8M_{\text{sat}}$ und $1/4M_{\text{sat}}$ im thermodynamischen Limes der 4-Bein-Röhre stabilisiert sind, was konsistent aus der klassischen Betrachtung des effektiven Modells und der DMRG-Analyse hervorgeht.

Betrachten wir die Magnetisierungsprofile der klassischen Lösung des effektiven Modells der PCUT und der DMRG-Lösung, so finden wir jedoch deutliche Diskrepanzen. In der Tat halten die kommensurablen, kristallinen Phasen aus lokalisierten Anregungen mit $S = 1$ der Magnetisierung $1/8 M_{\text{Sat}}$ und $1/4 M_{\text{Sat}}$ aus der klassischen Betrachtung des effektiven Modells dem Vergleich mit den entsprechenden DMRG-Lösungen nicht stand. Die Quantenkorrekturen durch Fluktuationen innerhalb der klassischen Lösungen liefern keine Erklärung für die energetischen Unterschiede. Darüberhinaus finden wir sehr deutliche Unterschiede im Magnetisierungsprofil der angesprochenen Phasen. Die Betrachtung des effektiven Modells lenkt den Fokus deutlich auf die exotische Kinetik, die ihren Ursprung in der frustrierten Geometrie des Shastry-Sutherland-Modells hat. Es handelt sich um korrelierte Hüpfterme, die nur durch eine quantenmechanische Betrachtung des Problems korrekt einbezogen werden können. Wir haben durch perturbativ kontrollierte Rechnungen demonstriert, dass die korrelierten Hüpfterme eine effektive Bindung zwischen zwei Teilchen verursachen. Die Zwei-Teilchen-Zustände interpretieren die DMRG-Ergebnisse bei Magnetisierung $1/8M_{\text{Sat}}$ ganz natürlich und können die Diskrepanzen zum klassischen Ergebnis durch eine quantenmechanischen Lösungs-Vorschlag beheben. Eine analoge Auflösung der Diskrepanzen finden wir für Magnetisierung $1/4 M_{\text{Sat}}$, bei der die perturbative Betrachtung semi-klassische Streifen-Strukturen stabilisiert.

Um die angesprochenen Erklärungs-Ansätze als korrekt zu manifestieren, haben wir das effektive Modell mit exakten Diagonalisierungen behandelt. Unsere intensiven Studien zeigen, dass die Unterschiede der klassischen und der DMRG-Lösung nicht auf dem effektiven Modell beruhen, sondern tatsächlich durch die klassische Betrachtung induziert werden. Die Behandlung des effektiven Modells durch die exakte Diagonalisierung bestätigt dies. Eine künftige Betrachtung des effektive Modell auf der 4-Bein-Röhre oder dem zweidimensionalen Modell mit weiteren numerischen Verfahren könnte diesen Aspekt weiter beleuchten. Hier bietet sich z. B. eine

DMRG-Analyse des effektiven Modells an oder die Lösung des effektiven Modells mit Hilfe von variationellen Verfahren wie Tensor-Netzwerk-Algorithmen.

Betrachten man die Interpretation des Magnetisierungsplateaus bei $1/8 M_{\text{Sat}}$, so stabilisiert die 4-Bein-Röhre im thermodynamischen Limes eine kommensurable Phase aus gebundenen Zwei-Teilchen-Zuständen mit $S = 2$. Die Zwei-Teilchen-Zustände sind im System voneinander so getrennt, dass verschiedene Zwei-Teilchen-Zustände untereinander nahezu wechselwirkungsfrei sind. Auf der 4-Bein-Röhre erweisen sich die zwei Teilchen eines gebundenen Zustandes als senkrecht zur radialen Achse des Zylinders verschränkt. Dieses Ergebnis zeichnet eine starke Analogie zum alternativen Erklärungs-Ansatz [92] für das zweidimensionale Modell ab. Wie angesprochen scheinen im zweidimensionalen Modell auch kommensurable Phasen aus Zwei-Teilchen-Anregungen mit gleichen Quantenzahlen vorzuliegen. Der gebundene Zustand im zweidimensionalen Modell formt eine lokale Anregung, die eine typische Längenskala von vier effektiven Teilchen-Plätzen zeigt [92]. Diese Längenskala liegt auch in dem in dieser Arbeit betrachteten System vor, wobei dem zweidimensionalen Analogon des gebundenen Zustandes die periodische Verschränkung fehlt, die auf der 4-Bein-Röhre auftritt. Die Korrespondenz der zwei Lösungen ist augenscheinlich, erfordert aber weitere Untersuchungen, die zukünftige Projekte motivieren.

Unsere mikroskopische Interpretation der Ergebnisse für Magnetisierung $1/8 M_{\text{Sat}}$ auf der 4-Bein-Röhre werden wesentlich dazu beitragen, die kommensurablen Zwei-Teilchen-Phasen des zweidimensionalen Modells mikroskopisch zu deuten. Dabei scheint hinsichtlich der konsistenten Stabilisierung von exotischen Plateau-Phasen in der 4-Bein-Röhre die neuartige Interpretation der Magnetisierungsplateaus als kommensurable Phasen aus Zwei-Teilchen-Zuständen plausibel. Unsere Ergebnisse geben klare Hinweise darauf, dass der Vorschlag kommensurabler Phasen aus Zwei-Teilchen-Zuständen der entscheidende Durchbruch zur Erklärung der Magnetisierung des frustrierten Quantenmagneten $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ist.

Für Magnetisierung $1/4 M_{\text{Sat}}$ begünstigt die exotische Kinetik des effektiven Modells ganz natürlich eine Streifen-Struktur in der 4-Bein-Röhre. Die Streifen-Struktur der 4-Bein-Röhre stellt ein quasi-eindimensionales Analogon zu der Streifen-Struktur des zweidimensionalen Modells dar. Die dominanten korrelierten Hüpfterme des effektiven Modells stabilisieren die Streifen-Struktur für Magnetisierung $1/4 M_{\text{Sat}}$, ebenso wie für Magnetisierung $1/8 M_{\text{Sat}}$. Unsere Erklärung für die Existenz von Streifen bei Magnetisierung $1/4 M_{\text{Sat}}$ ist nicht von der konkreten Geometrie des Systems abhängig. Daher können wir unsere Interpretationen direkt auf das zweidimensionale Modell übertragen. Auf diese Weise erhält man zudem einen natürlichen Erklärungsansatz für alle anderen Streifen-Strukturen, die im Material für mittlere Magnetisierungen gefunden werden.

Zwischen dem Plateau der Magnetisierung $1/8 M_{\text{Sat}}$ und $1/4 M_{\text{Sat}}$ existiert in der 4-Bein-Röhre für einen breiten Bereich des Störparameters J'/J zudem ein Plateau der Magnetisierung $3/16 M_{\text{Sat}}$. Wir sehen deutliche Hinweise darauf, dass dieses Plateau wesentlich von der eingeschränkten Geometrie profitiert. Eine zweidimensionale Analogie ist zunächst unklar. Dieses Plateau

zeigt aber, dass nicht nur kommensurable, kristalline Phasen aus ausschließlich Ein- oder Zwei-Teilchen-Zuständen realisiert werden können. Das Plateau der Magnetisierung $3/16M_{\text{Sat}}$ stellt sich als komplexer Hybrid zwischen den Magnetisierungen $1/8 M_{\text{Sat}}$ und $1/4 M_{\text{Sat}}$ heraus. Wir haben eine mikroskopische Interpretation entwickelt, die dieses Plateau als klassisches Plateau versteht, in dem zusätzliche Teilchen induziert werden, die stark delokalisieren. Die Delokalisierung ist durch Zwei-Teilchen-Prozesse initiiert, wobei die klassische Belegung der Teilchen nahezu lokalisiert bleibt.

Unsere Ergebnisse auf der 4-Bein-Röhre geben deutliche Hinweise darauf, dass in dem Regime mittlerer Magnetisierung Streifen-Strukturen aus elementaren Anregungen stabilisiert sind. Zudem haben neue experimentelle Ergebnisse in sehr hohen Magnetfeldern die Breiten des $1/3 M_{\text{Sat}}$ - und $1/2 M_{\text{Sat}}$ -Plateaus des Materials $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ bestimmt [57]. Beide Punkte motivieren eine Analyse des zweidimensionalen Shastry-Sutherland-Modells auf Grundlage der Streifen-Strukturen, was den zweiten Fokus dieser Arbeit darstellt. Wir haben ein perturbatives Verfahren zur Beschreibung von Streifen-Strukturen konstruiert und sind in der Lage mit dem Verfahren das Phasendiagramm des Experiments für mittlere Magnetisierungen zum großen Teil zu rekonstruieren. Dies erlaubt uns den Materialwert sehr präzise auf $J'/J = 0.63$ zu bestimmen [57]. Für große J'/J bestehen jedoch noch Herausforderungen, da das Phasendiagramm im angesprochenen Parameterraum zwischen den Plateau-Phasen von suprakristallinen Phasen dominiert wird für die unseren Methoden aktuell keine Beschreibung liefern können. Zusammengefasst zeigen unsere Ergebnisse für das zweidimensionale Modell, dass die effektive Beschreibung des Systems auf Grundlage von Streifen-Strukturen korrekt ist und dass das Bild der Streifen-Strukturen aus Teilchen-Anregungen ein valides Bild der Physik der Plateau-Phasen im mittleren Magnetisierungs-Regime darstellt. Eine methodische Verfeinerung unseres Verfahrens, die die Beschreibung dieser Phasen ermöglicht, liefert Raum für künftige Projekte.

Weitere zukünftige theoretische Projekte am Shastry-Sutherland-Modell im externen Magnetfeld werden sich aufgrund der konkreten Hinweise auf die Plateaus konzentrieren, die mikroskopisch über die Lokalisierung von gebundenen Zuständen zu kommensurablen Phasen gegeben sind. Die Auswirkung der DM-Wechselwirkung auf die gebundenen Zwei-Teilchen-Zustände ist zudem größtenteils ungeklärt, wobei die DM-Wechselwirkungen die Stabilität der Zwei-Teilchen-Zustände nur unwesentlich beeinflusst [92]. Um die Brücke zum Experiment zu schlagen wäre die Betrachtung des Modells für endliche Temperaturen $T > 0$ vielversprechend. Auch die Stabilität des gebundenen Zustandes bezüglich thermischer Fluktuationen ist ein noch ungeklärter Punkt. Diesbezüglich sei das Paar-Kondensat aus gebundenen Zuständen erwähnt, das für sehr kleine Magnetfelder in Theorie und Experiment erwartet wird [85].

Die faszinierenden Beobachtungen der exotischen Plateaus dieser Arbeit beruhen auf emergenten Phänomenen. Analoge Phänomene könnten auch in anderen frustrierten Systemen auftreten. Somit können unsere Ergebnisse neue Impulse für weitere Untersuchungen geben. Zudem können unsere Ergebnisse allgemein in bosonischen Systemen von Interesse sein, da die emergenten Phänomene von frustrierten Quantenmagneten im externen Magnetfeld zur Physik von bosonischen Systemen korrespondieren.

Anhang A

Methode : DMRG

A.1 Dichte-Matrix-Renormierung-Gruppe (DMRG)

Die Dichte-Matrix-Renormierungs-Gruppe, kurz DMRG, wurde 1992 von White vorgestellt [134] und im folgenden Jahr vom ihm weiter entwickelt [135]. Wir stellen die Methode kurz vor und führen in die wesentlichen Ideen ein. Detaillierte Quellen zur Methode sind in diversen Review-Artikeln und Büchern ([136] [137] [138] [139] [140]) zu finden. Diese Methode wird weiter in den Doktorarbeiten [141] [142] [143] verwendet und in ihrer Allgemeinheit und Anwendung präsentiert.

Allgemein handelt es sich bei der DMRG um einen Algorithmus, der eindimensionale Quantensysteme näherungsweise diagonalisiert. Das System wird iterativ vergrößert. Ein Renormierungsschritt reduziert das System dann auf die relevanten Freiheitsgrade. Diese beiden Schritte werden abschließend iterativ wiederholt. Auf die Idee des Renormierungsschrittes gehen wir in Kapitel A.1.1 grob ein. Der Renormierungsschritt bedient sich der (reduzierten) Dichte-Matrix eines Quanten-Systems. In Kapitel A.1.2 fassen wir dann von White formulierten Algorithmus [134] [135] zusammen.

A.1.1 Einführung in die Grundideen

Ein wichtiger Bestandteil der DMRG besteht darin, ein eindimensionales System in zwei Teilsysteme zu zerlegen. Konkret betrachten wir hier eine Kette, die an beiden Seiten offen ist. Die Wechselwirkungen in der Kette beschränken sich auf die nächsten Nachbarn. Wir zerlegen die Kette zunächst gedanklich an einer Kopplung in zwei Teile, System \underline{S} und Umgebung \underline{E} (Environment) genannt. Das System sei durch den Hamilton-Operator $\mathcal{H}_{\underline{S}}$ beschrieben und die Umgebung wird durch den Hamilton-Operator $\mathcal{H}_{\underline{E}}$ bestimmt. Eine Kopplung beider System beschreiben wir mit dem Hamilton-Operator $\mathcal{H}_{\underline{SE}}$. Wir stellen diese Zerlegung schematisch in Abbildung A.1 dar. Die Zerlegung der Kette in System (linker Teil) und Umgebung (rechter

Teil) ist so angelegt, dass der letzte Platz des Systems \underline{S} mit dem ersten Platz der Umgebung \underline{E} gekoppelt ist. Beide Teile enthalten soweit eine beliebige Anzahl an Gitterplätzen.

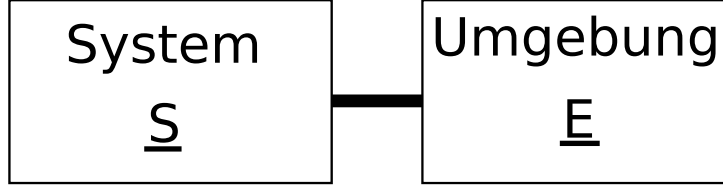


Abbildung A.1: Wir zeigen die Zerlegung einer (beidseitig offenen) Kette mit homogenen Nächste-Nachbar-Kopplungen in System \underline{S} und Umgebung \underline{E} .

Der Hilbertraum \mathbb{H} des eindimensionalen Systems ist das (Tensor-)Produkt der Hilberträume für das System $\mathbb{H}_{\underline{S}}$ und die Umgebung $\mathbb{H}_{\underline{E}}$, so dass $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\underline{S}} \otimes \mathcal{H}_{\underline{E}}$ gilt. Wir definieren zunächst keine konkrete Basis, jedoch bedingt die eindimensionale Zerlegung eine Produkt-Struktur der Basis für den Hilbertraum \mathbb{H}

$$|i, j\rangle := |i\rangle_{\underline{S}} \otimes |j\rangle_{\underline{E}}. \quad (\text{A.1})$$

Die Dimension des Systems ist dabei gegeben als $\dim(\mathbb{H}_{\underline{S}}) = d_{\underline{S}}$, so dass $i \in 1, 2, 3, \dots, d_{\underline{S}}$. Weiter ist die Dimension der Umgebung gegeben als $\dim(\mathbb{H}_{\underline{E}}) = d_{\underline{E}}$ mit $j \in 1, 2, 3, \dots, d_{\underline{E}}$. Das Gesamt-System hat die Dimension $\dim(\mathbb{H}) = d_{\underline{S}} \cdot d_{\underline{E}}$ und wir nehmen zunächst $d_{\underline{E}} \geq d_{\underline{S}}$ an.

Nun müssen wir einen Zielzustand bestimmen. Dabei handelt es sich typischerweise um den Grundzustand des Hamilton-Operators $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\underline{S}} + \mathcal{H}_{\underline{E}} + \mathcal{H}_{\underline{SE}}$ oder den ersten angeregten Zustand. Wir beschränken uns o.B.d.A. auf den Grundzustand $|\psi\rangle$ und nehmen das Gesamtsystem zunächst klein genug an, um es exakt zu diagonalisieren. Der Grundzustand der Gesamt-Kette sei über eine ED in der Produkt-Basis A.1 als

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |i, j\rangle \quad (\text{A.2})$$

mit den Koeffizienten $\psi_{i,j}$ bestimmt. Wir zielen nun auf eine Trunkierung dieser Lösung ab. Unter Trunkierung verstehen wir eine Renormierung der Lösung A.2 auf einen (reduzierten) Hilbertraum der Dimension m , mit $m < d_{\underline{S}} \cdot d_{\underline{E}}$. Wir stellen nun ein entsprechendes Kriterium vor, mit dem die relevanten Freiheitsgrade des Systems gefunden werden können. Dieses Kriterium entspricht dem Renormierungs-Schema der DMRG.

Wir beginnen damit, einen Operator \hat{A} zu betrachten, der nur im System \underline{S} wirkt

$$\hat{A} = \hat{A}_{\underline{S}} \otimes \mathbb{1}_{\underline{E}} \quad (\text{A.3})$$

Ein Trunkierungs-Schema sollte wenig Informationen von \hat{A} während der Trunkierung verlieren. Wir definieren den Grundzustands-Erwartungswert des Operators \hat{A} , bezüglich des (noch

exakten) Grundzustandes $|\psi\rangle$ aus A.2

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \sum_{i,i',j,j'} \langle i'j'|\hat{A}_{\underline{S}} \otimes \mathbb{1}_{\underline{E}}|i,j\rangle \psi_{i',j'}^\dagger \psi_{i,j} \\
&= \sum_{i,i',j,j'} \underbrace{\langle i'|\hat{A}_{\underline{S}}|i\rangle}_{\hat{A}_{i',i}} \delta_{j,j'} \psi_{i',j'}^\dagger \psi_{i,j} \\
&= \sum_{i,i'} \hat{A}_{i',i} \underbrace{\sum_j \psi_{i,j} \psi_{i',j}^\dagger}_{\rho_{i,i'}^{\underline{S}}} \\
&= \text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{A}_{\underline{S}} \rho_{\underline{S}}) \quad .
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Die Matrixeinträge der System-Dichte-Matrix $\rho_{i,i'}^{\underline{S}} = \sum_j \psi_{i',j}^\dagger \psi_{i,j}$ entsprechen dem Ausintegrieren der Umgebung. Die Dichte-Matrix $\rho_{\underline{S}}$ beschreibt dabei das System und hat die Dimension $d_{\underline{S}} \cdot d_{\underline{S}}$.

Wir definieren die Basis in einem trunkierten System. Dabei nummerieren wir die Zustände wiederum und kennzeichnen diese Zustände mit einem geschlängelten Symbol. Dieses Symbol soll andeuten, dass die m Zustände der Basis des trunkierten Systems zunächst beliebig und verschieden von den Zuständen der Basis von $|i\rangle_{\underline{S}}$ sind. So ist beispielsweise der m -te Basis-Zustand $|\tilde{m}\rangle$ aus der Basis des Systems \underline{S} verschieden von m -ten Zustand $|\tilde{m}\rangle$ der trunkierten Basis. Die Basis des trunkierten Systems sei orthonormiert und umfasse m Zustände

$$|\tilde{1}\rangle, |\tilde{2}\rangle, |\tilde{3}\rangle, |\tilde{4}\rangle, \dots, |\tilde{m-1}\rangle, |\tilde{m}\rangle \quad \text{mit } m < d_{\underline{S}} \quad . \tag{A.5}$$

Diese Basis spannt den reduzierten System-Hilbertraum $\tilde{\mathcal{H}}_{\underline{S}}$ auf. In der Regel sind die Zustände des reduzierten Systems A.5 verschieden von den System-Zuständen $|i\rangle$ der Produkt-Basis A.2 ($|\tilde{i}\rangle_{\underline{S}} \neq |i\rangle_{\underline{S}}$). Ein Überlagerungs-Zustand aus den m Basis-Zuständen (der trunkierten Basis) aus A.5, sei $|\tilde{\psi}\rangle$. Der Zustand $|\tilde{\psi}\rangle$ ist auf den Hilbertraum $\tilde{\mathcal{H}}_{\underline{S}} \otimes \mathcal{H}_{\underline{E}}$ mit Dimension $m \cdot d_{\underline{E}}$ definiert. Wir definieren analog zu A.4 den Dichte-Operator $\tilde{\rho}_{\underline{S}}$ für die reduzierte Basis mit $\langle\tilde{\psi}|\hat{A}|\tilde{\psi}\rangle = \text{Sp}_m(\hat{A}_{\underline{S}} \tilde{\rho}_{\underline{S}})$. Wir betonen, dass die Dichte-Matrix des vollen Systems $\rho_{\underline{S}}$ die Dimension $d_{\underline{S}} \cdot d_{\underline{S}}$ hat, während die reduzierte Dichte-Matrix $\tilde{\rho}_{\underline{S}}$ die Dimension $m \cdot m$ besitzt.

Betrachten wir nun den Erwartungswert des Operators \hat{A} bezüglich des reduzierten Grundzustandes $|\tilde{\psi}\rangle$, aber im vollen Hilbertraum $\mathbb{H}_{\underline{S}} \otimes \mathbb{H}_{\underline{E}}$, ergibt die partielle Spurbildung über $\mathbb{H}_{\underline{E}}$ die Dichte-Matrix $\tilde{\rho}_{\underline{S}}$ als $d_{\underline{S}} \cdot d_{\underline{S}}$ Matrix in $\mathbb{H}_{\underline{S}}$. Der Grundzustand des reduzierten System-Raumes ist aber gerade von der reduzierten Basis A.5 aufgespannt. Die reduzierte Basis hat jedoch die geringere Dimension m . Daher kann die Dichte-Matrix $\tilde{\rho}_{\underline{S}}$ nur den Rang m haben, also nur m nicht verschwindende Eigenwerte ($\neq 0$) haben und die anderen $(d_{\underline{S}} - m)$ Eigenwerte sind 0. Diese einfachen Dimensionsüberlegungen führen nun auf ein intuitives Trunkierungsschema. Wir suchen eine Dichte-Matrix $\tilde{\rho}_{\underline{S}}$, so dass

$$\text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{A}\tilde{\rho}_{\underline{S}}) \quad \text{möglichst dicht an } \text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{A}\rho_{\underline{S}}) \quad \text{liegt.} \tag{A.6}$$

Wir definieren die Transformation \hat{U} , welche die Dichte-Matrix des Systemes $\rho_{\underline{S}}$ diagonalisiert

$$\rho_{\underline{S}} = \hat{U} D \hat{U}^\dagger \quad \text{mit} \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_{d_{\underline{S}}} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \lambda_i \geq \lambda_{i+1} \forall i. \quad (\text{A.7})$$

Wir hatten \hat{A} als beliebigen Operator auf $\mathbb{H}_{\underline{S}}$ definiert. Wir nutzen nun den Operator \hat{B} , der aus der Transformation von \hat{A} in die Eigenbasis der System-Dichtematrix $\rho_{\underline{S}}$ ($\hat{B} = \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}$) folgt. Mit dem Operator \hat{B} lassen sich die folgenden Argumente leicht verdeutlichen. Da der Erwartungswert über eine Spur gegeben ist, gilt

$$\text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{B} \rho_{\underline{S}}) = \text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} \rho_{\underline{S}}) = \text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{A} \hat{U} \rho_{\underline{S}} \hat{U}^\dagger) = \text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{A} D) \quad (\text{A.8})$$

Wir können für die (noch undefinierte) reduzierte Dichte-Matrix denselben Ansatz wählen und erhalten $\text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{B} \tilde{\rho}) = \text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{A} \tilde{D})$ mit $\tilde{D} = \hat{U} \tilde{\rho} \hat{U}^\dagger$. Es sei daran erinnert, dass es sich bei \tilde{D} um die transformierte Dichte-Matrix (im reduzierten System-Raum) handelt, die nicht diagonal sein muss, aber eine Dichte-Matrix vom Rang m . Um nun $\text{Sp}_{\underline{S}}(\hat{A}(D - \tilde{D}))$ zu minimieren, ist es offensichtlich die beste Wahl, \tilde{D} diagonal zu wählen und die ersten m Einträge entsprechend den größten Eigenwerten von $\rho_{\underline{S}}$ fest zu legen, d. h.

$$\tilde{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & 0 \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \lambda_m & \\ & & & & 0 \\ & & & & & \ddots \\ 0 & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

zu wählen ($\tilde{\rho} = \tilde{D}$). Dies ist eine Folgerung daraus, dass die reduzierte Dichte-Matrix $\tilde{\rho}_{\underline{S}}$ im reduzierten Raum eine Matrix vom Rang m sein muss, also müssen $d_{\underline{S}} - m$ Eigenwerte von $\tilde{\rho}_{\underline{S}}$ Null sein. Diese Überlegung liefert demnach ein Trunkierungs-Schema. Die Vorschrift besteht darin, die m Zustände der Dichte-Matrix mitzunehmen, die das größte Gewicht haben.

Das präsentierte Trunkierungs-Schema führt auch zu einer intuitiven Fehlerabschätzung. Betrachten wir das Quadrat der nicht einbezogenen Eigenwerte der Dichte-Matrix des vollen Raumes, so kann der Fehler der Trunkierung S auf

$$S = 1 - \sum_{i=m+1}^{d_{\underline{S}}} \lambda_i \quad (\text{A.10})$$

abgeschätzt werden.

Wir beenden die Einleitung zur DMRG damit, die Transformation anzugeben, die einen Operator \hat{A} im System \underline{S} (Dimension $d_{\underline{S}}$) auf einen reduzierten Operator \tilde{A} in der reduzierten Basis (der Dimension m) transformiert. Die trunkierte Basis

$$|i, \tilde{j}\rangle := |\tilde{i}\rangle_{\underline{S}} \otimes |j\rangle_{\underline{E}} \quad (\text{A.11})$$

hat die Dimension $m \cdot d_{\underline{E}}$. Betrachten wir einen Operator $\mathcal{H}_{\underline{E}}$, der nur auf die Umgebung wirkt, d.h.

$$\mathcal{H}_{\underline{E}} = \mathbb{1}_{d_{\underline{S}}} \otimes B_{\underline{E}}, \quad (\text{A.12})$$

ist das Transformationsverhalten trivial. Es gilt

$$\tilde{H}_{\underline{E}} = \tilde{\mathbb{1}}_m \otimes B_{\underline{E}} \quad . \quad (\text{A.13})$$

Für einen Operator, der im System wirkt $\mathcal{H}_{\underline{S}} = \hat{A} \otimes \mathbb{1}_{\underline{E}}$, müssen die Matrixelemente des Operators bezüglich der neuen Basis bestimmt werden:

$${}_{\underline{E}}\langle j' | \otimes {}_{\underline{S}}\langle \tilde{i}' | \mathcal{H}_{\underline{S}} | \tilde{i} \rangle_{\underline{S}} \otimes | j \rangle_{\underline{E}} = \langle \tilde{i}' | \hat{A} | \tilde{i} \rangle_{\underline{S}} \delta_{j, j'} \quad (\text{A.14})$$

Das letzte Gleichheitszeichen definiert eine $m \otimes m$ -Matrix.

Diese Matrix kann aus der Transformation P aufgebaut werden, die durch die m -Eigenvektoren der m größten Eigenwerte von $\rho_{\underline{S}}$ definiert wird und die Matrix P hat somit die Dimension $d_{\underline{S}} \cdot m$ mit

$$P = \left(\underbrace{|\tilde{1}\rangle|\tilde{2}\rangle|\tilde{3}\rangle, \dots, |\tilde{m}\rangle}_{m \text{ Spalten}} \right) \left. \vphantom{\left(\right)} \right\} d_{\underline{S}} \text{ Zeilen.} \quad (\text{A.15})$$

Die Transformationsmatrix P stellt die gesuchte Überführung des Operators \hat{A} in den Operator \tilde{A}

$$\tilde{A} = P^\dagger \hat{A} P \quad (\text{A.16})$$

dar. Eine Wechselwirkung $\mathcal{H}_{\underline{SE}} = A \otimes B$ kann ganz analog transformiert werden. Die Transformationsvorschrift hierfür lautet

$$\tilde{H}_{\underline{SE}} = P^\dagger A P \otimes B \quad . \quad (\text{A.17})$$

A.1.2 Algorithmus

Wir fassen die Ideen, diskutiert in Unterkapitel A.1.1, hier zu einen (zweistufigen) Algorithmus zusammen [134] [135]. Die erste Stufe vergrößert das System sukzessiv und renormiert das System dann nach dem Verfahren aus Unterkapitel A.1.1 (Stufe 1: unendliches System). In der zweiten

Stufe beendet man den Algorithmus bei einer endlichen Kettenlänge l und variiert in der Größe des Systems \underline{S} und der Umgebung \underline{E} . Dieser Schritt fungiert als Fehlerkorrektur (Stufe 2: endliche Systeme). Wir erklären den Algorithmus Anhand von Bild A.2. Dieses Bild zeigt eine Skizze der beiden Stufen der DMRG. Im linken Bild der Abbildung ist Stufe 1 des Algorithmus dargestellt und im rechten Bild ist Stufe 2 skizziert.

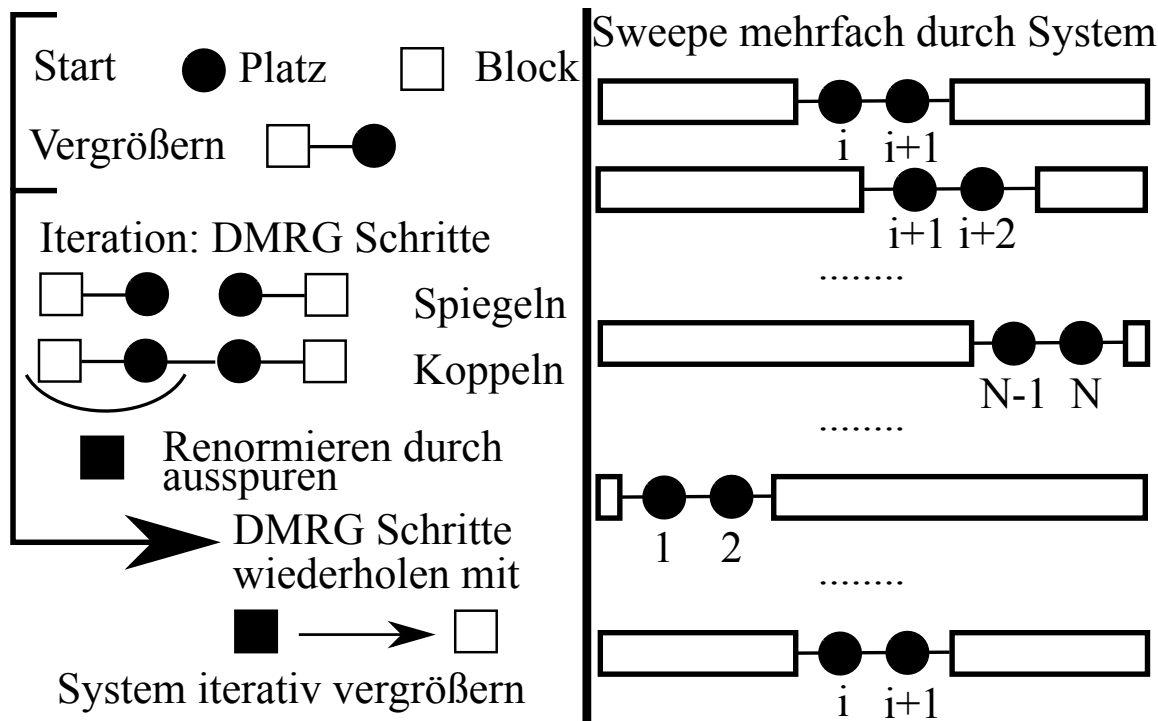


Abbildung A.2: Skizze der beiden Stufen des DMRG-Algorithmus. Im linken Bild ist ein Schema der ersten Stufe zu sehen. Hier ist im Wesentlichen eine Iteration bestehend aus den Teilschritten: System vergrößern, System spiegeln (Umgebung erzeugen), Dichte-Matrix aufstellen, diagonalisieren und renormieren, zu sehen. Die erste Stufe endet, wenn eine Länge l erreicht ist. Dann beginnt die zweite Stufe, die im rechten Bild skizziert wird. In dieser Stufe wird abermals iterativ renormiert. Dabei variiert man die Länge des Systems und der Umgebung und ändert die Position des Platzes, der exakt beschrieben wird. Diese Stufe wird wiederholt, bis jeder Platz einige Male exakt betrachtet wurde.

Stufe 1: Unendliches System

In dieser Stufe werden die Ideen aus A.1.1 direkt verwendet. Wir beginnen bei einem System (bzw. einer Kette) der Länge n . Die Kette wird dann um einen Gitterplatz auf die Länge $n + 1$ erweitert. Sind alle Kopplungen im System homogen oder haben eine periodische Anordnung, so kann das System gespiegelt werden, um eine Umgebung zu generieren, so dass das Gesamtsystem nun die Länge $2n + 2$ hat (siehe Abbildung A.3). Nun liegt der Fall von System und Umgebung aus Kapitel A.1.1 vor und das präsentierte Schema aus Diagonalisieren der (reduzierten) System-Dichte-Matrix und Trunkierung nach Eigenzuständen mit höchsten Eigenwerten wird durchgeführt. Dieses Schema wird nun mit dem (reduzierten) System der Länge $n + 1$ wiederholt und weiter iteriert. Die erste Stufe des DMRG-Algorithmus kann damit wie folgt zusammengefasst werden:

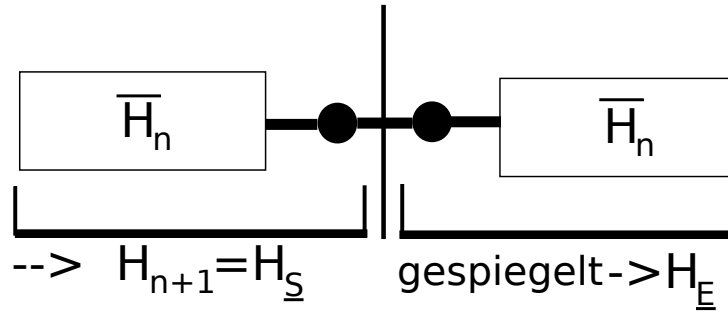


Abbildung A.3: Das trunkierte System wird um einen Platz erweitert. Sind die Kopplungen im System homogen, kann durch das Spiegeln des Systems (mit dem neuen Platz) eine Umgebung für die Rechnung generiert werden.

- 1) Bilde Superblock $\mathcal{H}_{\text{Super}} = \mathcal{H}_{\underline{S}} \otimes \mathcal{H}_{\underline{E}}$ mit L Plätzen, so dass er noch exakt diagonalisiert werden kann.
- 2) Bestimme für $\mathcal{H}_{\text{Super}}$ den Grundzustand $|\psi\rangle$ und die Grundzustands-Energie E_0 .
- 3) Berechne Dichte-Matrix $\rho_{\underline{S}}$ für $\mathcal{H}_{\underline{S}}$. Die Matrixelemente ergeben sich über $\rho_{i,i'} = \sum_j \psi_{i',j}^\dagger \psi_{i,j}$, wobei die $\psi_{i,j}$ die Koeffizienten des Grundzustandes $|\psi\rangle$ in der Produktbasis sind.
- 4) Diagonalisiere $\rho_{\underline{S}}$ vollständig, d. h. bestimme die Eigenvektoren \vec{v}_i zu den m größten Eigenwerten λ_i von $\rho_{\underline{S}}$ mit $i \in (1, 2, 3, \dots, m)$.
- 5) Bilde $P = (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_m)$ und bestimme $\tilde{H}_{n+1} = P^\dagger \mathcal{H}_{n+1} P$ und $\tilde{A} = P^\dagger \hat{A} P$, wobei \hat{A} ein Operator ist, der auf dem zugefügten Platz wirkt.
- 6) Bilde Superblock der Größe $2L + 2$ mit \mathcal{H}_{n+1} , zwei einzelnen Plätzen und der Reflexion von \mathcal{H}_{n+1} .
- 7) Gehe zu Schritt 2).

In dieser Stufe ist die Wahl der Umgebung und die Zuordnung der Plätze zu System und Umgebung einfach. Wir weisen aber darauf hin, dass es keinen physikalischen Grund oder Hinweis für eine Fixpunktstruktur in diesem Verfahren gibt und diese Methode heuristisch statt physikalisch motiviert ist.

Stufe 2: Algorithmus für endliche Systeme

Wir fassen die zweite Stufe des Algorithmus zusammen. Dabei wird die Länge des Systems beibehalten und innerhalb der Kette werden zwei benachbarte Plätze exakt betrachtet. Dies definiert die Länge des Systems und der Umgebung. Die zweite Stufe verläuft wie folgt

- 0) Wende den Algorithmus für unendliche Systeme an, bis die Systemgröße L erreicht ist.
- 1) Führe Schritte 3), 4) und 5) des Algorithmus für unendliche Systeme aus. Beachte, dass im Allgemeinen der Block des Systems (linker Block in Bild A.2) die Größe n hat und der Block der Umgebung (rechter Block in Bild A.2) die Größe $n' \neq n$ hat. Speichere \tilde{H}_{n+1} .

- 2) Bilde Superblock der Größe L mit \mathcal{H}_{n+1} , 2 exakten Gitterplätzen und $\tilde{H}_{n'-1}^{(R)}$.
- 3) Wiederhole 1) und 2) bis der rechte Block (die Umgebung) exakt erfasst wird, d.h. $d_E < m$ gilt.
- 4) Ändere die Richtung und erweitere den rechten Umgebungs-Block, der jetzt für das System steht und vermindere den linken Block, der jetzt für die Umgebung steht. Speichere $\tilde{H}_{n'+1}^{(R)}$.
- 5) Bilde Superblock mit \tilde{H}_{n-1} , 2 exakten Einzelplätzen und $\tilde{H}_{n'+1}^{(R)}$.
- 6) Iteriere Schritte 4) und 5) bis die Umgebung erneut exakt erfasst wird.
- 7) Starte wieder bei 1).

Führt man im zweiten Teil des Algorithmus die Schritte 1) bis 7) einmal durch, spricht man von einem Sweep. Typischerweise erhöht jeder Sweep durch das System, die Genauigkeit und der Algorithmus wird gestoppt, wenn die gewünschte Genauigkeit erreicht ist. Wir verstehen o.B.d.A den Platz in der Mitte als Startplatz für den Sweep. Ein Sweep ist dabei so definiert, dass wir vom Startplatz aus, zuerst zum rechten Rand und dann zum linken Rand und zurück zur Mitte, jeden Platz im Gitter einmal exakt in den iterativen Renormierungen betrachtet haben (siehe rechten Teil von A.2). Das iterative Durchführen von mehreren Sweeps kann für die Grundzustandsenergie oft eine Größenordnungen von 10^{-8} für den Fehler der Rechnung erreichen. Für kritische Systeme liegt die Größenordnung des Fehlers hingegen deutlich höher.

Das Konzept der DMRG ist für (offene) eindimensionale Systeme universell einsetzbar. Es können fermionische Systeme, bosonische Systeme oder Spin-Systeme beschrieben werden [136] [137] [138] [139] [140]. Erweiterungen der DMRG zur Beschreibung komplexerer, eindimensionaler Systeme (z. B. mit Übernächste-Nachbar-Kopplungen) sind in der Literatur bekannt [136] [137] [138] [139] [140]. Weiterhin wurde die DMRG erweitert, um die Zeitentwicklung in einem System zu beschreiben [143]. Wir sehen, dass die DMRG ein sehr breites Anwendungsspektrum zeigt und die DMRG hat sich dadurch zum Standard-Verfahren etabliert, um eindimensionale Systeme zu beschreiben. Die DMRG kann über die Fehlerabschätzung A.10 kontrolliert werden. Daher kann die Konvergenz typischerweise gut kontrolliert werden und da die vernachlässigten Eigenwerte der System-Dichtematrix typischerweise exponentiell klein sind, erreicht die DMRG oft hohe Energieauflösungen. Wir sprechen nun aber auch Probleme der Methode an.

Da in der DMRG typischerweise offene Ketten betrachtet werden zeigt das System zwei offene Enden im System, die als Rand des Systems bezeichnet werden. Die Physik am Rand ist typischerweise verschieden von der Physik des Restsystems, wobei wir das Restsystem als Mittelteil bezeichnen. Die Ränder im Systems führen zu sog. finite-size-Effekten. Da man üblicherweise am thermodynamischen Limes interessiert ist, sind die finite-size-Effekte störend, aber soweit per Konstruktion immer vorhanden. Dieses Problem könnte man umgehen, indem man ein periodisches System betrachtet. Die Verallgemeinerung der DMRG auf periodische Systeme ist aber ein methodisch schwieriger Punkt, da die Konstruktion der Methode an sich keine periodischen Systeme vorsieht. Periodische Systeme liegen also zunächst außerhalb der Möglichkeiten

der DMRG. Wir weisen nur darauf hin, dass die Literatur Vorschläge zur Verallgemeinerung auf periodische Systeme bietet, diese führen aber auf eine wesentlich schlechtere Energieauflösung. In größeren Systemen vergrößert sich auch der Mittelteil, so dass der Einfluss des Randes immer kleiner wird. Um die finite-size Effekte zu beseitigen werden daher typischerweise Rechnungen für verschiedene Systemgrößen durchgeführt und in einer $1/N$ -Skalierung dann das Ergebnis für $N \rightarrow \infty$ (bzw. $1/N \rightarrow 0$) extrapoliert.

Während die DMRG für eindimensionale Systeme das Standardverfahren ist, ist eine Verallgemeinerung auf zwei Raumdimensionen in der Methode nicht verankert. Dabei können aber quasi-eindimensionale Systeme, als Annäherung an ein zweidimensionales System erfolgreich beschrieben werden [21]. Ein Problem der DMRG ist auch, dass die DMRG in dem präsentierten Schema, nicht allgemein auf mehrdimensionale Systeme erweitert werden kann. Neben dem präsentierten Schema, die DMRG über die Eigenwerte der Dichte-Matrix zu formulieren, hat sich eine interessante, alternative Sichtweise etabliert. Es gibt eine Klasse von Quantenzuständen, die sogenannten Matrix-Produkt-Zustände (MPS). Die DMRG kann auch als variationelles Verfahren verstanden werden, wenn man für ein gegebenes System diese Zustände als Ansatz für den Zustand des Systems nutzt [139]. Dabei sind die präsentierte Dichte-Matrix-Formulierung und die MPS-Formulierung vollständig äquivalent [139]. Dieser Punkt ist hinsichtlich einer Erweiterung der DMRG zur Beschreibung von zweidimensionalen Systemen interessant. Die Matrix-Produkt-Zustände selbst können nicht auf zweidimensionalen Systemen problemlos definiert werden, aber es gibt kanonische Erweiterungen der MPS-Zustände. Diese variationellen Tensor-Netzwerk-Zustände führen auf die heute erfolgreichen Methoden PEPS ([144] und Quellen darin), der thermodynamischen Erweiterung iPEPS [145] und MERA [146] [147], mit denen zweidimensionale Systeme im Prinzip unvoreingenommen beschrieben werden können.

Anhang B

Methode : Lanczos-Diagonalisierung

B.1 Lanczos-Verfahren

B.1.1 Lanczos-Tridiagonalisierung und Lanczos-Verfahren

Wir präsentieren das Lanczos-Verfahren zur (approximativen) Bestimmung des Grundzustandes einer Matrix \mathcal{M} oder eines Hamilton-Operators \mathcal{H} [150]. Im Wesentlichen muss über zwei Punkte diskutiert werden. Zuerst ist hier die Lanczos-Tridiagonalisierung zu nennen. Es handelt sich um ein Verfahren, mit dem die Matrix iterativ in eine Tridiagonalmatrix überführt wird. Startpunkt des Verfahrens ist ein beliebiger Vektor $|u_0\rangle$ des Hilbertraums, von dem wir nur annehmen, dass er normiert ist $\langle u_0|u_0\rangle = 1$. Das Lanczos-Verfahren selbst besteht dann darin, mit der Lanczos-Tridiagonalisierung den extremalsten Eigenwert (den Grundzustand des Hamilton-Operators) effektiv zu bestimmen, ohne die ursprüngliche Matrix vollständig auf Tridiagonal-Gestalt zu transformieren.

Eine Tridiagonalmatrix ist dadurch gekennzeichnet, dass ein Zustand $|u_i\rangle$ nur einen diagonalen Beitrag und zwei nebendiagonale Beiträge haben kann. Die Wirkung der Matrix oder des Hamilton-Operators \mathcal{H} ergibt sich dann gemäß

$$\mathcal{H}|u_i\rangle = \beta_{i+1}|u_{i+1}\rangle + \alpha_i|u_i\rangle + \beta_i|u_{i-1}\rangle = |w_{i+1}\rangle + \alpha_i|u_i\rangle + \beta_i|u_{i-1}\rangle. \quad (\text{B.1})$$

Stellen wir diese Gleichung nach $|w_{i+1}\rangle$ um, so erhält man eine Iterationsgleichung, um von einem Startvektor $|u_0\rangle$ aus, einen Satz von Basis-Vektoren $|u_i\rangle$ zu konstruieren. Der interessante Punkt an dem Tridiagonal-Ansatz ist, dass es sich um eine Orthogonalisierung der Vektoren $\mathcal{H}^i|u_i\rangle$ handelt, die die Vektoren der Krylov-Basis (der Dimension n) sind

$$K_n = \text{span}\{|u_0\rangle, \mathcal{H}|u_0\rangle, \mathcal{H}^2|u_0\rangle, \dots, \mathcal{H}^n|u_0\rangle\}. \quad (\text{B.2})$$

Die Krylov-Basis ist ein mögliches Schema, eine Basis zu generieren, wobei diese Basis im Allgemeinen keine Eigenbasis von \mathcal{H} ist. Der Tridiagonal-Ansatz orthogonalisiert die Krylov-Vektoren,

sorgt aber nur dafür, dass die orthogonalen Vektoren bzw. die orthogonale Basis eine Transformation der ursprünglichen Matrix zu einer Tridiagonal-Matrix bewirken. Diese kann üblicherweise aber viel einfacher behandelt werden als die ursprüngliche Matrix.

Bevor wir auf die Lösung genauer eingehen, diskutieren wir die Bestimmung der Matrixelemente der Tridiagonal-Matrix. Wie besprochen stellen wir Gleichung B.1 um und können die Diagonal- und Nebendiagonal-Elemente berechnen

$$\begin{aligned} |v_{i+1}\rangle &= \mathcal{H}|u_i\rangle - \alpha_i|u_i\rangle - \beta_i|u_{i-1}\rangle \quad \text{mit} \\ \langle u_i|v_{i+1}\rangle &= 0 \rightarrow \alpha_i = \langle u_i|\mathcal{H}|u_i\rangle \\ \beta_i^2 &= \langle v_{i+1}|v_{i+1}\rangle \rightarrow \frac{1}{\beta_{i+1}}|v_{i+1}\rangle = |u_{i+1}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Zuletzt ist der Vektor $|v_{i+1}\rangle$ zu normieren, um den neuen Transformationsvektor $|u_{i+1}\rangle$ zu bestimmen.

Setzt man nun die Transformationsvektoren zu einer Transformationsmatrix U_{Tri} zusammen, so generiert man die Transformation, die \mathcal{H} auf tridiagonale Gestalt \mathcal{T} bringt

$$U_{\text{Tri}} = \left(|u_0\rangle \quad |u_1\rangle \quad \cdots \quad |u_n\rangle \right) \rightarrow \mathcal{T} = U_{\text{Tri}}^T \mathcal{M} U_{\text{Tri}} = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \cdots & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ 0 & \cdots & 0 & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}.$$

Ist man nur an den Eigenwerten interessiert, muss die Transformation U_{Tri} nicht explizit nachvollzogen werden, da die diagonalen Einträge α_i und nebendiagonalen Einträge β_i als Zwischenschritte der Rechnung auftreten (siehe Iterationsgleichung B.3). Die Vektoren $|u_i\rangle$ (bzw. die Transformation U_{Tri}) sind hingegen zu speichern, falls die Bestimmung der Eigenvektoren durchzuführen ist, z. B. um die Eigenvektoren von \mathcal{H} zu bestimmen.

Nun gehen wir dazu über, den Grundzustand der Matrix bzw. des Hamilton-Operators zu bestimmen. Trivial ist es natürlich möglich, die Lanczos-Tridiagonalisierung B.3 so oft zu iterieren, bis die ursprüngliche Matrix \mathcal{H} vollständig transformiert ist. Eine wesentliche Eigenschaft des Lanczos-Verfahrens ist aber, dass bereits eine unvollständige Abbildung der Matrix \mathcal{H} auf eine tridiagonale Matrix kleinerer Dimension, den Grundzustand und den dazugehörigen Eigenwert nahezu perfekt approximiert, da der Grundzustand des Unterraums schnell zum Grundzustand des Hamilton-Operators \mathcal{H} konvergiert. Liegt die Dimension des Krylov-Unterraums K_n in einer Größenordnung von $n \approx 100$, liegt oft bereits gute Konvergenz vor. Die rasche Konvergenz des Unterraum-Grundzustandes zum Grundzustand des Hamilton-Operators \mathcal{H} lässt sich mathematisch belegen [151] [152]. Die vereinfachte mathematische Begründung liegt in der mehrfachen Anwendung von \mathcal{H} auf den Startzustand $\mathcal{H}^n|\vec{u}_0\rangle$, was auch in der Power-Methode genutzt wird, um den Eigenvektor zum extremalen Eigenwert zu bestimmen (siehe dazu auch Buch [153]). Entsprechend der Power-Methode, können wir das Wirken mit dem Hamilton-Operator \mathcal{H} als

Drehung interpretieren, wobei die Drehung in Richtung des Grundzustandes am stärksten ist, da der Grundzustand einen extremalen Eigenwert hat. Durch das mehrfache Wirken von \mathcal{H} prägt sich der Grundzustand besonders stark aus und kann im Unterraum rasch gefunden werden.

Wir gehen nun auf die Berechnung des Grundzustandes ein. Betrachten wir B.3, so müssen immer nur drei Vektoren im Speicher zur Verfügung stehen. Die Formulierung eines Programms, das diesen Umstand nutzt, ist sehr speicher-effektiv. Wir haben angesprochen, dass für die Bestimmung des Grundzustandes hingegen alle Vektoren $|u_i\rangle$ nötig sind. Erst wenn die Tridiagonal-Matrix vorliegt, kann die Transformation zur vollständigen Diagonalität U_{Dia} bestimmt werden. Sei \mathcal{D} die Diagonalmatrix im Unterraum, so erfüllen die Tridiagonalmatrix \mathcal{T} und die Matrix U_{Dia} die Gleichung $\mathcal{D} = U_{\text{Dia}}^T \mathcal{T} U_{\text{Dia}}$. Aus U_{Tri} und U_{Dia} können die genäherten Eigenvektoren von \mathcal{H} bestimmt werden. Wir definieren

$$\mathcal{D} = U_{\text{Dia}}^T U_{\text{Tri}}^T \mathcal{M} U_{\text{Tri}} U_{\text{Dia}} \quad \rightarrow \quad U_{\text{voll}} = U_{\text{Tri}} \cdot U_{\text{Dia}}. \quad (\text{B.4})$$

Bezeichnen wir die Dimension der ursprünglichen Matrix \mathcal{M} mit N und führen n -Lanczos-Schritte durch, so haben die Matrizen U_{Tri} und U_{Dia} die Dimensionen $N \cdot n$ und $n \cdot n$. Wir haben in Formel B.4 die Transformation, die sich als Produkt der Tridiagonal-Transformation U_{Tri} und der Diagonal-Transformation im Unterraum U_{Dia} ergibt, zu der Gesamttransformation U_{voll} zusammengefasst. In den Zeilen von U_{voll} (einer Matrix der Dimension $N \cdot n$) können die approximierten Eigenvektoren in den n Spalten gefunden werden.

Um die Speicher-Effizienz mit der Bestimmung des Grundzustandes zu vereinen, besteht das für diese Arbeit geschriebene Lanczos-Programm aus einer erneuten Berechnung des Problems, wobei die zweite Rechnung die erste reproduziert, nur mit bekannter Matrix U_{Dia} ¹. Während der Rechnung kann der Grundzustand dann iterativ bestimmt werden, indem nach jedem Iterationsschritt die vollständige Transformation $U_{\text{voll}} = U_{\text{Tri}} U_{\text{Dia}}$ sukzessiv bestimmt wird, wobei man nur an einem Eigenvektor (dem Grundzustand) und nicht der ganzen Matrix U_{voll} interessiert ist. Das bedeutet, dass nur ein vierter Vektor für den Grundzustand im Speicher gehalten werden muss.

B.1.2 Anmerkungen zur Zuordnung der Zustände

In einem Lanczos-Algorithmus ist der rechenaufwendigste Teil die Berechnung des Produktes der Matrix \mathcal{H} mit einem Zustandsvektor $|u\rangle$ (siehe B.3). Wir präsentieren hier unser Vorgehen bei der Berechnung des Produktes und erinnern an die Aufgabenstellung der Diagonalisierung der Matrix \mathcal{M} .

¹Da typischerweise ein Krylov-Unterraum der Dimension $n \approx 100$ genutzt wird, ist eine zusätzliche Matrix U_{Dia} der Dimension 100×100 zu speichern.

Wir gehen von einem Teilchenzahl-erhaltenden Hamilton-Operator aus, der die Dynamik von Hardcore-Teilchen beschreibt. Das bedeutet, dass die Basis-Zustände als Verteilung von N Teilchen auf N_C Plätzen eines Clusters zu verstehen sind, denn die Teilchenzahl-Erhaltung verhindert, dass sich die Dichte $n = N/N_C$ bei einer Anwendung des Hamilton-Operators \mathcal{H} ändert. Wir können die Teilchenzahl-Kanäle mit Teilchenzahl N unabhängig voneinander diagonalisieren, da \mathcal{H} blockdiagonal in der Teilchenzahl N ist. Die reduzierten Hilberträume, für ein Cluster mit N_C Plätzen, haben die Dimension

$$\binom{N_C}{N} = \frac{N_C!}{N! (N - N_C)!} = d_n. \quad (\text{B.5})$$

Die d_n Basis-Zustände $|i\rangle$ in diesem Hilbertraum sollen durchnummeriert sein und eine Zahl i entspricht genau einem der Basis-Zustände $|i\rangle$ mit $i \in 1, 2, \dots, d_n$. Diese Vereinbarung hat den Vorteil, dass ein beliebiger Zustands-Vektor $|u\rangle$ immer als Überlagerungszustand

$$|u\rangle = A_1|1\rangle + A_2|2\rangle + \dots + A_d|d\rangle \quad (\text{B.6})$$

dieser (Belegungs-) Basis geschrieben werden kann.

In numerischen Anwendungen kann das System als ein Vektor aus d_n Amplituden A_i gespeichert werden, wobei wir den Index mit N_i bezeichnen. Das liegt darin begründet, dass ein Vektor der passenden Basis-Zustände $|i\rangle$ nicht gespeichert werden muss. Wir konstruieren den Amplituden-Vektor so, dass wir den Index des Vektors N_i mit der Nummer des Zustandes $|i\rangle$ identifizieren. Es soll eine eindeutige Zuordnung zwischen dem Index des Vektors N_i und einem Basis-Zustand $|i\rangle$ vorliegen. Diese Konstruktion hat zwei große Vorteile. Erstens muss nur ein Vektor gespeichert werden, was den Speicherbedarf einer Rechnung sehr entlastet. Weiter kann bei einer direkten Zuordnung Rechenzeit gespart werden, da keine Suchalgorithmen auf die Basis-Zustände angewendet werden müssen. Wir präsentieren im Folgenden den Algorithmus einer direkten Zuordnung von Basis-Zustand $|i\rangle$ zu Index N_i und Index N_i zu Basis-Zustand $|i\rangle$.

Wir gehen kurz auf die numerische Beschreibung von Zuständen ein. Ein Hardcore-Teilchen kann mit einem Bit repräsentiert werden, so dass wir von einer Datenstruktur ausgehen, die N_C Bits enthält. Dabei soll die Nummerierung dieser Bitstruktur nach der Formel

$$\begin{array}{cccccc} \text{0.Bit} & \text{1.Bit} & \text{2.Bit} & \text{3.Bit} & \text{4.Bit} & \text{5.Bit} \\ | s(0) & s(1) & s(2) & s(3) & s(4) & s(5) \rangle \end{array} \quad (\text{B.7})$$

festgelegt sein und es existiert eine Zuordnung der verschiedenen Bits zu den Plätzen des Clusters \mathcal{C} . Wichtig ist hierbei, dass wir die Bits von 0 beginnend zählen und die N_C Bits $s(i)$ über $i \in 0, \dots, N_C - 1$ angesprochen werden. Weiter soll auch die Nummerierung der d_n Zustände bei 0 beginnen.

Bevor wir die Formel für die Zuweisung zeigen, präsentieren wir die wesentliche Idee der Zuordnung, die in der Formel

$$d_n = \binom{N_C}{N} = \binom{N_C - 1}{N} + \binom{N_C - 1}{N - 1} = d'_n + d''_n \quad \text{mit} \quad \binom{N}{N + 1} = 0 \quad (\text{B.8})$$

liegt. Die Anzahl N Teilchen auf N_C Plätze zu verteilen kann in zwei Summanden d'_n und d''_n zerlegt werden. Die Anzahl der Plätze in den beiden Summanden ist um eins reduziert und in den Summanden finden wir N oder $N - 1$ Teilchen. Dies ist auch sehr trivial einzusehen: Halten wir in einem Cluster o.B.d.A den letzten $(N_C - 1)$ -ten Bit fest, ist dieser belegt oder leer. Ist der Platz belegt, so müssen sich die restlichen $(N - 1)$ Teilchen auf die verbleibenden $N_C - 1$ Plätze verteilen, wofür es d''_n Möglichkeiten gibt. Ist der letzte Platz hingegen leer, so sind N Teilchen auf die restlichen $(N_C - 1)$ Plätze zu verteilen, wofür es d'_n Möglichkeiten gibt. Abhängig davon, ob das letzte Bit nun belegt ist oder nicht, findet sich der Index in den Grenzen 0 bis $d'_n - 1$ oder d'_n bis $d''_n - 1$. Iteriert man diese Idee nun mit den verbleibenden Belegungen von $N - 1$ bzw. N Teilchen auf Ketten mit $N_C - 1$ Plätzen, so ergibt sich ein Schema, dass jeder Belegung einen Index eindeutig zuordnet.

Die explizite, iterative Zuordnungs-Formel für die Abbildung der Belegung $|i\rangle$ (nach Formel B.7) auf Index N_i lautet

$$N_i = \sum_{j=(N_C-1)}^0 s(j) \binom{j}{p(j)}. \quad (\text{B.9})$$

Zur Bestimmung des Index werden die j Bits des Zustandes $|i\rangle$ (nach Formel B.7) durchlaufen und für jeden belegten Bit ($s(j) = 1$) wird der passende Binomialkoeffizient j über $p(j)$ bestimmt ($p(j)$ Teilchen auf j Plätze verteilen). Dabei beschreibt $p(j)$ die Anzahl der verbleibenden, zu verteilenden Teilchen.

Für ein besseres Verständnis der Formel B.9 soll ein Beispiel betrachtet werden. Wir indizieren ein halbgefülltes System und führen die Berechnung der Indizes aus den Belegungen explizit für

drei Teilchen auf sechs Plätze mit Nummerierung B.7 durch:

$$|000111\rangle = \binom{5}{3} + \binom{4}{2} + \binom{3}{1} = 10 + 6 + 3 = 19$$

$$|001011\rangle = \binom{5}{3} + \binom{4}{2} + \binom{2}{1} = 10 + 6 + 2 = 18$$

$$|001101\rangle = \binom{5}{3} + \binom{3}{2} + \binom{2}{1} = 10 + 3 + 2 = 15$$

$$|001110\rangle = \binom{4}{3} + \binom{3}{2} + \binom{2}{1} = 4 + 3 + 2 = 9$$

$$|010011\rangle = \binom{5}{3} + \binom{4}{2} + \binom{1}{1} = 10 + 6 + 1 = 17$$

$$|010101\rangle = \binom{5}{3} + \binom{3}{2} + \binom{1}{1} = 10 + 3 + 1 = 14$$

$$|010110\rangle = \binom{4}{3} + \binom{3}{2} + \binom{1}{1} = 4 + 3 + 1 = 8$$

$$|011010\rangle = \binom{4}{3} + \binom{2}{2} + \binom{1}{1} = 4 + 1 + 1 = 6$$

$$|011100\rangle = \binom{3}{3} + \binom{2}{2} + \binom{1}{1} = 1 + 1 + 1 = 3$$

$$|011001\rangle = \binom{5}{3} + \binom{2}{2} + \binom{1}{1} = 10 + 1 + 1 = 12$$

$$|100011\rangle = \binom{5}{3} + \binom{4}{2} + \binom{0}{1} = 10 + 6 + 0 = 16$$

$$|100101\rangle = \binom{5}{3} + \binom{3}{2} + \binom{0}{1} = 10 + 3 + 0 = 13$$

$$|100110\rangle = \binom{4}{3} + \binom{3}{2} + \binom{0}{1} = 4 + 3 + 0 = 7$$

$$|101001\rangle = \binom{5}{3} + \binom{2}{2} + \binom{0}{1} = 10 + 1 + 0 = 11$$

$$|101010\rangle = \binom{4}{3} + \binom{2}{2} + \binom{0}{1} = 4 + 1 + 0 = 5$$

$$|101100\rangle = \binom{3}{3} + \binom{2}{2} + \binom{0}{1} = 1 + 1 + 0 = 2$$

$$\begin{aligned}
|110001\rangle &= \binom{5}{3} + \binom{1}{2} + \binom{0}{1} = 10 + 1 + 0 = 10 \\
|110010\rangle &= \binom{4}{3} + \binom{1}{2} + \binom{0}{1} = 4 + 0 + 0 = 4 \\
|110100\rangle &= \binom{3}{3} + \binom{1}{2} + \binom{0}{1} = 1 + 0 + 0 = 1 \\
|111000\rangle &= \binom{2}{3} + \binom{1}{2} + \binom{0}{1} = 0 + 0 + 0 = 0.
\end{aligned}$$

Zuletzt geben wir noch die zweite Zuordnungs-Formel an, die jedem Index i eine Belegung $|i\rangle$ zuordnet. Im Wesentlichen zerlegt man den Index i in die Binomialsummanden aus B.8 mit der folgenden Iteration

$$\text{if } \left(\binom{j}{p(j)} < N_{\text{calc}} \right) \text{ then } \left(p(j) = p(j) - 1; s(j) = 1; N_{\text{calc}} = N_{\text{calc}} - \binom{j}{p(j)}; \right); j = j - 1; \tag{B.10}$$

und konstruiert daraus den Zustand. Der Index j durchläuft wie bereits zuvor die Werte $j \in N_C - 1, \dots, 1, 0$. Der Startwert für N_{calc} ist der gewünschte Index N_i .

Wir demonstrieren die Anwendung der Formel B.10 nochmal am Beispiel des halbgefüllten Systems mit drei Teilchen auf sechs Plätzen und zeigen die Bestimmung des Zustandes für die Indizes $\{17, 5, 0\}$ (in dieser Reihenfolge):

$$\begin{aligned}
N_5^{\text{Binomial}} &= \binom{5}{3} \leq 17 = 10 \leq 17 : \binom{5}{3} \text{ gefunden } N = 17 - 10 = 7 \quad p(i) = 2 \\
N_4^{\text{Binomial}} &= \binom{4}{2} \leq 7 = 6 \leq 7 : \binom{4}{2} \text{ gefunden } N = 7 - 6 = 1 \quad p(i) = 1 \\
N_3^{\text{Binomial}} &= \binom{3}{1} \leq 1 = 3 \leq 1 \\
N_2^{\text{Binomial}} &= \binom{2}{1} \leq 1 = 2 \leq 1 \\
N_1^{\text{Binomial}} &= \binom{1}{1} \leq 1 = 1 \leq 1 : \binom{1}{1} \text{ gefunden } N = 1 - 1 = 0 \quad p(i) = 0 \\
N_0^{\text{Binomial}} &= \binom{0}{1} \leq 1 = 0 \leq 0 : 3 \text{ Teilchen bereits belegt} \\
\rightarrow 17 &= \binom{5}{3} + \binom{4}{2} + \binom{1}{1} \rightarrow |010011\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_5^{\text{Binomial}} &= \binom{5}{3} \leq 5 = 10 \leq 5 \\
N_4^{\text{Binomial}} &= \binom{4}{3} \leq 5 = 4 \leq 5 : \binom{4}{3} \text{ gefunden } N = 5 - 4 = 1 \ p(i) = 2 \\
N_3^{\text{Binomial}} &= \binom{3}{2} \leq 1 = 3 \leq 1 \\
N_2^{\text{Binomial}} &= \binom{2}{2} \leq 1 = 1 \leq 1 : \binom{2}{2} \text{ gefunden } N = 1 - 1 = 0 \ p(i) = 1 \\
N_1^{\text{Binomial}} &= \binom{1}{1} \leq 0 = 1 \leq 0 \\
N_0^{\text{Binomial}} &= \binom{0}{1} \leq 0 = 0 \leq 0 : \binom{0}{1} \text{ gefunden } N = 0 - 0 = 0 \ p(i) = 0 \\
\rightarrow 5 &= \binom{4}{3} + \binom{2}{2} + \binom{0}{1} \rightarrow |101010\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
N_5^{\text{Binomial}} &= \binom{5}{3} \leq 0 = 10 \leq 0 \\
N_4^{\text{Binomial}} &= \binom{4}{3} \leq 0 = 4 \leq 0 \\
N_3^{\text{Binomial}} &= \binom{3}{3} \leq 0 = 1 \leq 0 \\
N_2^{\text{Binomial}} &= \binom{2}{3} \leq 0 = 0 \leq 0 : \binom{2}{3} \text{ gefunden } N = 0 - 0 = 0 \ p(i) = 2 \\
N_1^{\text{Binomial}} &= \binom{1}{2} \leq 0 = 0 \leq 0 : \binom{1}{2} \text{ gefunden } N = 0 - 0 = 0 \ p(i) = 1 \\
N_0^{\text{Binomial}} &= \binom{0}{1} \leq 0 = 0 \leq 0 : \binom{0}{1} \text{ gefunden } N = 0 - 0 = 0 \ p(i) = 0 \\
\rightarrow 0 &= \binom{2}{3} + \binom{1}{2} + \binom{0}{1} \rightarrow |111000\rangle
\end{aligned}$$

Die präsentierte Zuordnung vermeidet es, die Zustände während der Rechnung zu suchen. Auf diese Weise kann ein (Basis)-Zustand direkt mit der entsprechenden Amplitude in Verbindung gebracht werden.

Anhang C

Methode : Lanczos-Diagonalisierung

C.1 Padé- und Dlog-Padé-Extrapolation

Durch die PCUT erhält man eine Reihenentwicklung der betrachteten physikalischen Größe. Die irreduziblen Amplituden ergeben sich als Störungsreihen in einem Störparameter λ . Wir merken nur als Nebenbemerkung an, dass auch eine Entwicklung in mehreren Störparametern $\lambda_1, \dots, \lambda_i$ durchgeführt werden kann. Wir gehen in diesem Kapitel von einem Störparameter aus und verweisen auf die PCUT-Literatur für mehr Details [100] [101] [102] [103] [104].

In dieser Arbeit werden die Koeffizienten der Reihe aus der PCUT-Rechnung ausschließlich reell sein. Die Störungsreihe einer Amplitude kann typischerweise bis zu einer hohen Ordnung bestimmt werden. Für kleine Störparameter stellt die Reihe eine sehr gute Näherung dar. Erhöht man hingegen den Wert des Störparameters, so erhöhen sich auch die Fehler der Störungsrechnung. Oft kommt es sogar zu divergierenden Ergebnissen für größere Werte von λ .

Die Informationen der Störungsreihen können aber auch für Extrapolationen genutzt werden. Die Motivation dafür ist, dass Extrapolationen typischerweise stabilere Ergebnisse liefern um die Störungsreihe an ansonsten unerreichten λ -Werten zu extrapolieren. Eine Zusammenfassung von Extrapolations-Methoden für störungstheoretische Rechnungen ist in der Arbeit [133] zu finden. Die Extrapolationen führen meist zu (konsistenten) Ergebnissen für Werte von λ , bei denen die ursprüngliche Reihe bereits nicht mehr konvergiert ist. Die ursprüngliche Reihe wird auch als nackte Reihe bezeichnet. Konkret stellen wir die Padé und Dlog-Padé-Extrapolation vor, die in dieser Arbeit genutzt werden, um die nackten Reihen der PCUT zu extrapolieren.

Wir definieren die rationale Funktion $R(x)$ zweier Polynome $P(x)$ und $Q(x)$ der Ordnungen M und N als

$$R(\lambda) = \frac{P^{(M)}(\lambda)}{Q^{(N)}(\lambda)} = \frac{\sum_{m=0}^M p_m \lambda^m}{\sum_{n=0}^N q_n \lambda^n} = \frac{p_0 + p_1 \lambda + p_2 \lambda^2 + \dots + p_M \lambda^M}{q_0 + q_1 \lambda + q_2 \lambda^2 + \dots + q_N \lambda^N} \quad (\text{C.1})$$

und definieren die absolute Ordnung als $P = N + M$. Die Koeffizienten p_m und q_n sind reell. Interpretieren wir nun die Störungsreihe der Ordnung P

$$F(\lambda) = \sum_{i=0}^P f_i \lambda^i = f_0 + f_1 \lambda + f_2 \lambda^2 + \cdots + f_P \lambda^P \quad (\text{C.2})$$

als Taylorreihe, so kann eine rationale Funktion extrapoliert werden. Dazu wird der Ansatz C.1 für feste Ordnungen M und N durch eine Taylorreihe der Ordnung P genähert. Über einen Koeffizientenvergleich bestimmt sich ein Gleichungssystem, in dem die p_m und q_n aus den f_i der ursprünglichen Funktion eindeutig bestimmt werden können. Es ist darauf zu achten, dass die nackte Reihe dabei einem Taylor-Polynom entspricht, dass um $\lambda_0 = 0$ entwickelt wurde. Entsprechend muss auch die rationale Funktion C.1 um diesen Punkt entwickelt werden. Dieses Vorgehen fasst die Padé-Extrapolation bereits zusammen. Dabei führen wir die Schreibweise

$$\mathcal{P}[M/N]_{F^{(P)}(\lambda)}^{\lambda_0=0} \quad (\text{C.3})$$

ein. Geben Padé-Extrapolationen verschiedener Zählerordnungen und Nennerordnungen $[M/N]$ innerhalb eines endlichen Intervalls konsistente Ergebnisse, kann man von einer Konvergenz der Padé-Extrapolationen ausgehen. Die Konvergenz der Extrapolation kann selbst dann angenommen werden, wenn die nackte Reihe in diesem Bereich deutlich abweicht. Dabei ist auf mögliche Nullstellen des Nenner-Polynoms innerhalb von $\lambda = 0$ bis zu einem gefragten $\lambda = \lambda'$ zu achten. Auch Nullstellen in der Nähe des Punktes λ' führen zu einem verfälschten Verhalten. Solche Padé-Extrapolation sind typischerweise unbrauchbar und werden als *defekt* bezeichnet.

Die Dlog-Padé Extrapolation ist definiert als die Padé-Extrapolation der logarithmischen Ableitung einer Reihe. Dabei soll die zu beschreibende Funktion C.2 zuvor normiert werden, so dass für den ersten Koeffizient $f_0 = 1$ gilt. Aufgrund der Ableitung geht eine Ordnung verloren und die Extrapolation erfolgt für ein Polynom der Ordnung $P - 1$. Die Summe aus Zähler- und Nenner-Ordnung der Padé-Extrapolation der logarithmischen Ableitung kann daher höchstens $P - 1 = N + M$ erfüllen. Wie angesprochen ist die Dlog-Padé gegeben als

$$\frac{d}{d\lambda} \ln(F(\lambda)) = \frac{F'(\lambda)}{F(\lambda)} = \mathcal{P}[M/N]_{\left(\frac{F'(\lambda)}{F(\lambda)}\right)^{(P-1)}}^{\lambda_0=0} = \frac{P^{(M)}(\lambda)}{Q^{(N)}(\lambda)} \quad (\text{C.4})$$

Über die Identität der linken und rechten Seite der Gleichung C.4 kann dann eine gültige Extrapolation durch umstellen

$$\frac{d}{d\lambda} \ln(F(\lambda)) = \frac{P^{(M)}(\lambda)}{Q^{(N)}(\lambda)} \Leftrightarrow F(\lambda) \approx \exp \left(\int_0^\lambda \frac{P^{(M)}(\lambda')}{Q^{(N)}(\lambda')} d\lambda' \right) \quad (\text{C.5})$$

gewonnen werden. Treten Nullstellen im Nennerpolynom $Q^M(\lambda)$ auf, so muss unterschieden werden, ob es sich um physikalische Polstellen handelt oder nicht. Unphysikalische Polstellen sind Nullstellen, die auftreten obwohl kein kritisches Verhalten erwartet wird oder kein Zerfallsprozess beschrieben wird. Solche Extrapolationen sind wie in der Padé-Extrapolation unbrauchbar und

defekt. Liegt hingegen ein physikalischer Pol vor, erwarten man, dass nahe dem kritischen Punkt ein Potenzgesetz, nach $|\lambda - \lambda_0|^\alpha$, die Physik beschreibt. Ein solches Potenzverhalten kann mit der Dlog-Padé-Extrapolation gut beschrieben werden. Die Polstelle kann aus der Nullstelle des Nennerpolynoms $Q^M(\lambda)$ bestimmt werden. Der Exponent α ist definiert als das Residuum der entsprechenden Padé-Extrapolation der rechten Seite der Gleichung C.4 (siehe auch [101]) als

$$\alpha = \left. \frac{P^{(M)}(\lambda')}{\frac{d}{d\lambda} Q^{(N)}(\lambda')} \right|_{\lambda=\lambda_0} . \quad (\text{C.6})$$

Wir fassen zusammen, dass wir mit der Padé- und Dlog-Padé-Extrapolation effektive Werkzeuge besitzen, um die Störungsreihen einer Reihenentwicklung zu extrapolieren. Die Ergebnisse der nackten PCUT-Reihe können auf ihre Konvergenz überprüft werden. Dabei sind die Extrapolationen häufig sogar physikalisch aussagekräftig, selbst wenn die nackte Reihe in diesem Bereich bereits versagt.

Anhang D

Thermodynamische Amplituden des Hamiltonian der 4-Bahn-Leiter

Wir haben in Unterkapitel 3.1.5 das thermodynamische effektive Modell in zweiter Ordnung definiert und nutzen diese Notation hier. Wir schließen nun an Kapitel 3.2 an und geben die irreduziblen Amplituden der Ein-Teilchen-Terme ${}^{(O)}\hat{A}_{\vec{\delta}}$ und Zwei-Teilchen-Terme ${}^{(O)}\hat{A}_{\vec{\delta}_a, \vec{\delta}_z}$ des effektiven Modells der 4-Bahn-Leiter an. Dabei geben wir alle Ein-Teilchen-Amplituden und diagonale Zwei-Teilchen-Amplituden an, die spätestens in Ordnung acht beginnen und alle nicht-diagonalen Zwei-Teilchen-Amplituden, die spätestens in Ordnung vier beginnen. Wir geben die unterschiedlichen Amplituden explizit an und gehen dann auf symmetrische Amplituden ein.

$$\begin{aligned}
 \text{(v)} \hat{A}^{(0,0)} &= 1 - x^2 - \frac{1}{2}x^3 - \frac{1}{8}x^4 + \frac{5}{32}x^5 + \frac{3}{128}x^6 - \frac{1699}{4608}x^7 - \frac{35107}{55296}x^8 - \frac{259061}{663552}x^9 \\
 &\quad + \frac{974687}{6635520}x^{10} + \frac{1151870527}{4777574400}x^{11} - \frac{23323367629}{38220595200}x^{12} \\
 &\quad - \frac{40392669400271}{22932357120000}x^{13} - \frac{102289876433461163}{57789539942400000}x^{14} - \frac{8204339820020446111}{48543213551616000000}x^{15} \\
 \text{(h)} \hat{A}^{(0,0)} &= 1 - x^2 - \frac{1}{2}x^3 - \frac{1}{8}x^4 + \frac{5}{32}x^5 + \frac{3}{128}x^6 - \frac{1699}{4608}x^7 - \frac{35107}{55296}x^8 - \frac{259061}{663552}x^9 \\
 &\quad + \frac{194755}{1327104}x^{10} + \frac{1153266463}{4777574400}x^{11} - \frac{116030601329}{191102976000}x^{12} \\
 &\quad - \frac{40140647360519}{22932357120000}x^{13} - \frac{20172410628174247}{11557907988480000}x^{14} - \frac{1227745985509498283}{9708642710323200000}x^{15} \\
 \text{(v)} \hat{A}^{(1,1)} &= -\frac{1}{96}x^6 - \frac{11}{576}x^7 - \frac{83}{4608}x^8 - \frac{2447}{663552}x^9 - \frac{1433}{13271040}x^{10} - \frac{303150173}{9555148800}x^{11} \\
 &\quad - \frac{6754465217}{76441190400}x^{12} - \frac{14930736446759}{137594142720000}x^{13} \\
 &\quad - \frac{212436546502069}{4280706662400000}x^{14} + \frac{1767219308670276631}{97086427103232000000}x^{15}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
{}^{(h)}\hat{A}^{(1,1)} = & -\frac{1}{96}x^6 - \frac{11}{576}x^7 - \frac{83}{4608}x^8 - \frac{2447}{663552}x^9 - \frac{1433}{13271040}x^{10} - \frac{303150173}{9555148800}x^{11} \\
& - \frac{6759171137}{76441190400}x^{12} - \frac{14963150210279}{137594142720000}x^{13} \\
& - \frac{1133557569961}{22649241600000}x^{14} + \frac{1750239587860726951}{97086427103232000000}x^{15}
\end{aligned}$$

$${}^{(v)}\hat{A}^{(1,1)} = {}^{(v)}\hat{A}^{(-1,1)} = {}^{(v)}\hat{A}^{(1,-1)} = {}^{(v)}\hat{A}^{(-1,-1)}$$

$${}^{(h)}\hat{A}^{(1,1)} = {}^{(h)}\hat{A}^{(-1,1)} = {}^{(h)}\hat{A}^{(1,-1)} = {}^{(h)}\hat{A}^{(-1,-1)}$$

$$\begin{aligned}
{}^{(v)}\hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(0,0)} = & \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{8}x^3 - \frac{9}{16}x^4 - \frac{3}{64}x^5 + \frac{809}{768}x^6 + \frac{2173}{3072}x^7 - \frac{70543}{24576}x^8 \\
& - \frac{37816411}{5308416}x^9 - \frac{2055058321}{637009920}x^{10} + \frac{67092309227}{5096079360}x^{11} + \frac{20573761518659}{1019215872000}x^{12} \\
& + \frac{8053331676079}{2293235712000}x^{13} + \frac{101575964787166199}{28894769971200000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
{}^{(v)}\hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(0,0)} = & \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{8}x^3 - \frac{9}{16}x^4 - \frac{3}{64}x^5 + \frac{809}{768}x^6 + \frac{2173}{3072}x^7 - \frac{211309}{73728}x^8 \\
& - \frac{37640899}{5308416}x^9 - \frac{396983309}{127401984}x^{10} + \frac{341825781751}{25480396800}x^{11} + \frac{62793791370601}{3057647616000}x^{12} \\
& + \frac{544988441572090729}{1100753141760000}x^{13} + \frac{30729593506190988097}{924632639078400000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
{}^{(v)}\hat{A}_{(2,0)}^{(2,0),(0,0)} = & \frac{1}{2}x^2 + \frac{3}{4}x^3 - \frac{1}{8}x^4 - \frac{49}{64}x^5 - \frac{289}{768}x^6 + \frac{4019}{9216}x^7 + \frac{77609}{110592}x^8 + \frac{243991}{1327104}x^9 \\
& - \frac{73855279}{79626240}x^{10} - \frac{1584489421}{1061683200}x^{11} - \frac{1756843}{119439360}x^{12} \\
& + \frac{100261859756351}{45864714240000}x^{13} + \frac{183832105244723489}{115579079884800000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
{}^{(h)}\hat{A}_{(0,2)}^{(0,2),(0,0)} = & \frac{1}{2}x^2 + \frac{3}{4}x^3 - \frac{5}{16}x^4 - \frac{11}{64}x^5 + \frac{73}{768}x^6 - \frac{1729}{3072}x^7 + \frac{47567}{36864}x^8 - \frac{386201}{1327104}x^9 \\
& - \frac{157817}{81920}x^{10} + \frac{25294352587}{9555148800}x^{11} - \frac{5584694533789}{1146617856000}x^{12} \\
& + \frac{46040943841567}{27518828544000}x^{13} + \frac{155882295114023201}{19263179980800000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
{}^{(v)}\hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(0,0)} = & \frac{1}{4}x^3 + \frac{3}{8}x^4 + \frac{23}{64}x^5 - \frac{41}{128}x^6 - \frac{337}{192}x^7 - \frac{283327}{221184}x^8 + \frac{23684687}{5308416}x^9 \\
& + \frac{1362906325}{127401984}x^{10} - \frac{12212246377}{76441190400}x^{11} - \frac{329845478498011}{9172942848000}x^{12} \\
& - \frac{52342527662776237}{1100753141760000}x^{13} + \frac{19409208366246467731}{924632639078400000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
{}^{(h)}\hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(0,0)} = & \frac{1}{4}x^3 + \frac{3}{8}x^4 + \frac{23}{64}x^5 - \frac{39}{128}x^6 - \frac{971}{576}x^7 - \frac{262199}{221184}x^8 + \frac{23806187}{5308416}x^9 \\
& + \frac{6742797373}{637009920}x^{10} - \frac{15167380493}{76441190400}x^{11} - \frac{326101716505943}{9172942848000}x^{12} \\
& - \frac{51636671081928193}{1100753141760000}x^{13} + \frac{9661058826847003663}{924632639078400000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
{}^{(v)}\hat{A}_{(2,1)}^{(2,1),(0,0)} = & \frac{1}{8}x^4 + \frac{17}{64}x^5 + \frac{77}{768}x^6 - \frac{3571}{9216}x^7 - \frac{59017}{110592}x^8 + \frac{1339739}{2654208}x^9 + \frac{323608631}{159252480}x^{10} \\
& + \frac{51274985519}{38220595200}x^{11} - \frac{3458863679681}{1146617856000}x^{12} - \frac{3387691098242909}{550376570880000}x^{13} \\
& + \frac{180169037145982051}{231158159769600000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(v) \hat{A}_{(1,2)}^{(1,2),(0,0)} &= \frac{1}{8}x^4 + \frac{17}{64}x^5 - \frac{17}{384}x^6 - \frac{6349}{9216}x^7 - \frac{17633}{36864}x^8 + \frac{4476433}{2654208}x^9 + \frac{567596647}{159252480}x^{10} \\
&\quad - \frac{11178106469}{38220595200}x^{11} - \frac{18177464069}{1887436800}x^{12} - \frac{4776276471478103}{550376570880000}x^{13} \\
&\quad + \frac{8711588250104481127}{462316319539200000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(0,2)}^{(0,2),(0,0)} &= \frac{1}{16}x^6 + \frac{95}{576}x^7 + \frac{99}{512}x^8 + \frac{29105}{663552}x^9 - \frac{10487557}{79626240}x^{10} + \frac{751558957}{9555148800}x^{11} \\
&\quad + \frac{37959181643}{45864714240}x^{12} + \frac{195417984858713}{137594142720000}x^{13} + \frac{3082992706071149}{4280706662400000}x^{14} \\
(h) \hat{A}_{(2,0)}^{(2,0),(0,0)} &= \frac{1}{16}x^6 + \frac{95}{576}x^7 + \frac{9}{64}x^8 - \frac{78787}{663552}x^9 - \frac{28710757}{79626240}x^{10} - \frac{94273499}{9555148800}x^{11} \\
&\quad + \frac{1163931504287}{1146617856000}x^{12} + \frac{216635511959441}{137594142720000}x^{13} + \frac{1404213010673399}{12842119987200000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(2,2)}^{(2,2),(0,0)} &= \frac{1}{32}x^6 + \frac{95}{1152}x^7 + \frac{487}{6912}x^8 - \frac{365}{6144}x^9 - \frac{14415407}{79626240}x^{10} - \frac{7850161}{1194393600}x^{11} \\
&\quad + \frac{115587987947}{229323571200}x^{12} + \frac{11907904313293}{15288238080000}x^{13} + \frac{1498914863523499}{28894769971200000}x^{14} \\
(h) \hat{A}_{(2,2)}^{(2,2),(0,0)} &= \frac{1}{32}x^6 + \frac{95}{1152}x^7 + \frac{2677}{27648}x^8 + \frac{269}{12288}x^9 - \frac{5314067}{79626240}x^{10} + \frac{87853507}{2388787200}x^{11} \\
&\quad + \frac{468045919237}{1146617856000}x^{12} + \frac{3563261155991}{5096079360000}x^{13} + \frac{9874602700274947}{28894769971200000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(3,1)}^{(3,1),(0,0)} &= \frac{1}{64}x^6 + \frac{5}{72}x^7 + \frac{3805}{27648}x^8 + \frac{59561}{442368}x^9 + \frac{618677}{159252480}x^{10} - \frac{2318549257}{19110297600}x^{11} \\
&\quad + \frac{4240804247}{91729428480}x^{12} + \frac{52333998113183}{91729428480000}x^{13} + \frac{209849167279360727}{231158159769600000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(3,0)}^{(3,0),(0,0)} &= \frac{5}{1152}x^8 + \frac{5005}{221184}x^9 + \frac{386029}{6635520}x^{10} + \frac{7416311}{79626240}x^{11} \\
&\quad + \frac{19427114531}{191102976000}x^{12} + \frac{1135526615401}{11466178560000}x^{13} + \frac{188753088501323}{1100753141760000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(3,2)}^{(3,2),(0,0)} &= \frac{5}{2304}x^8 + \frac{1679}{147456}x^9 + \frac{1545691}{53084160}x^{10} + \frac{295607977}{6370099200}x^{11} \\
&\quad + \frac{12781745497}{254803968000}x^{12} + \frac{1478821039307}{30576476160000}x^{13} + \frac{930905579541397}{11007531417600000}x^{14} \\
(h) \hat{A}_{(3,1)}^{(3,1),(0,0)} &= \frac{1}{2304}x^{10} + \frac{18689}{5529600}x^{11} + \frac{7860631}{663552000}x^{12} + \frac{106591463}{3932160000}x^{13} + \frac{360936024043}{7644119040000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$(v) \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(0,0)}$$

$$(v) \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(0,0)}$$

$$(v) \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(0,0)} = (v) \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(0,0)}$$

$$(h) \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(0,0)}$$

$$(v) \hat{A}_{(2,1)}^{(2,1),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(2,1)}^{(2,1),(0,0)} = (v) \hat{A}_{(-2,1)}^{(-2,1),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(-2,1)}^{(-2,1),(0,0)}$$

$$(v) \hat{A}_{(1,2)}^{(1,2),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(1,2)}^{(1,2),(0,0)} = (v) \hat{A}_{(-1,2)}^{(-1,2),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(-1,2)}^{(-1,2),(0,0)}$$

$$(v) \hat{A}_{(2,2)}^{(2,2),(0,0)} = (v) \hat{A}_{(-2,2)}^{(-2,2),(0,0)}$$

$$(h) \hat{A}_{(2,2)}^{(2,2),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(-2,2)}^{(-2,2),(0,0)}$$

$$(v) \hat{A}_{(3,1)}^{(3,1),(0,0)} = (v) \hat{A}_{(-3,1)}^{(-3,1),(0,0)}$$

$$(v) \hat{A}_{(3,0)}^{(3,0),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(3,0)}^{(3,0),(0,0)}$$

$$(v) \hat{A}_{(3,2)}^{(3,2),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(3,2)}^{(3,2),(0,0)} = (v) \hat{A}_{(-3,2)}^{(-3,2),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(-3,2)}^{(-3,2),(0,0)}$$

$$(h) \hat{A}_{(3,1)}^{(3,1),(0,0)} = (h) \hat{A}_{(-3,1)}^{(-3,1),(0,0)}$$

$$(h) \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(0,1)} = -\frac{1}{4}x^2 - \frac{5}{16}x^3 + \frac{9}{64}x^4 + \frac{89}{128}x^5 + \frac{3731}{6144}x^6 - \frac{42367}{49152}x^7 - \frac{9616315}{3538944}x^8 \\ - \frac{24411431}{28311552}x^9 + \frac{77453067637}{10192158720}x^{10} + \frac{1109080209497}{81537269760}x^{11} \\ - \frac{832683372515471}{146767085568000}x^{12} - \frac{102609109563591289}{1956894474240000}x^{13} - \frac{23343475477851433}{46965467381760000}x^{14}$$

$$(v) \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(1,0)} = -\frac{1}{4}x^2 - \frac{5}{16}x^3 + \frac{9}{64}x^4 + \frac{89}{128}x^5 + \frac{3731}{6144}x^6 - \frac{42367}{49152}x^7 - \frac{9647035}{3538944}x^8 \\ - \frac{8536973}{9437184}x^9 + \frac{76437263413}{10192158720}x^{10} + \frac{611075103877}{45298483200}x^{11} \\ - \frac{830592692720663}{146767085568000}x^{12} + \frac{8302601110042189391}{17612050268160000}x^{13} - \frac{668866209122606693}{986274815016960000}x^{14}$$

$$(h) \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(2,0)} = \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{8}x^3 + \frac{1}{8}x^4 - \frac{13}{32}x^5 - \frac{61}{64}x^6 - \frac{591}{1024}x^7 + \frac{107867}{73728}x^8 + \frac{6013199}{1769472}x^9 \\ - \frac{6901591}{14155776}x^{10} - \frac{24515591279}{1698693120}x^{11} - \frac{16279526208581}{611529523200}x^{12} \\ - \frac{96063688771843}{24461180928000}x^{13} + \frac{3942846918014280953}{61642175938560000}x^{14}$$

$$(v) \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(0,2)} = \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{8}x^3 + \frac{1}{8}x^4 - \frac{13}{32}x^5 - \frac{61}{64}x^6 - \frac{591}{1024}x^7 + \frac{107227}{73728}x^8 + \frac{5931755}{1769472}x^9 \\ - \frac{14923729}{23592960}x^{10} - \frac{374548151797}{25480396800}x^{11} - \frac{16400221354633}{611529523200}x^{12} \\ - \frac{1291801992179591}{366917713920000}x^{13} - \frac{6066194272818874343}{154105439846400000}x^{14}$$

$$(v) \hat{A}_{(1,2)}^{(1,2),(1,1)} = \frac{1}{32}x^4 + \frac{5}{256}x^5 - \frac{61}{6144}x^6 - \frac{851}{147456}x^7 + \frac{232015}{3538944}x^8 + \frac{14416369}{84934656}x^9 \\ + \frac{132374767}{1132462080}x^{10} - \frac{136345164883}{1223059046400}x^{11} + \frac{732841737311}{5760830118545831}x^{12} \\ + \frac{5760830118545831}{5870683422720000}x^{13} - \frac{17479194807749397329}{2465687037542400000}x^{14}$$

$$(h) \hat{A}_{(2,1)}^{(2,1),(1,1)} = \frac{1}{32}x^4 + \frac{5}{256}x^5 - \frac{113}{6144}x^6 - \frac{3883}{147456}x^7 + \frac{21211}{393216}x^8 + \frac{17143537}{84934656}x^9 \\ + \frac{136218325}{679477248}x^{10} - \frac{133747708591}{1223059046400}x^{11} - \frac{48131873041231}{146767085568000}x^{12} \\ + \frac{18020157567523}{48922361856000}x^{13} - \frac{32253229896973443929}{9862748150169600000}x^{14}$$

$$(h) \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(1,-1)} = \frac{1}{32}x^4 + \frac{1}{128}x^5 + \frac{119}{1536}x^6 + \frac{37}{576}x^7 - \frac{10591}{73728}x^8 - \frac{1540999}{5308416}x^9 \\ + \frac{253605289}{637009920}x^{10} + \frac{141442855979}{76441190400}x^{11} + \frac{3543480047383}{3057647616000}x^{12} \\ - \frac{27498044801993}{5096079360000}x^{13} + \frac{255819856166036767}{205473919795200000}x^{14}$$

$$\begin{aligned}
(v) \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(1,-1)} &= -\frac{1}{32}x^4 + \frac{1}{128}x^5 + \frac{119}{1536}x^6 + \frac{37}{576}x^7 - \frac{10591}{73728}x^8 - \frac{1540999}{5308416}x^9 \\
&\quad + \frac{254040241}{637009920}x^{10} + \frac{141801283211}{76441190400}x^{11} + \frac{3584521699927}{3057647616000}x^{12} \\
&\quad - \frac{10270650914597}{1911029760000}x^{13} - \frac{819541729516661479}{264180754022400000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(0,-1)} &= -\frac{1}{16}x^4 - \frac{17}{128}x^5 - \frac{211}{3072}x^6 + \frac{9085}{24576}x^7 + \frac{1207237}{1769472}x^8 - \frac{23866321}{42467328}x^9 \\
&\quad - \frac{17716826867}{5096079360}x^{10} - \frac{2007167382427}{611529523200}x^{11} + \frac{276553192609763}{36691771392000}x^{12} \\
&\quad + \frac{389093290148552413}{17612050268160000}x^{13} - \frac{47313400231086697}{73057393704960000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(1,0)} &= -\frac{1}{16}x^4 - \frac{17}{128}x^5 - \frac{211}{3072}x^6 + \frac{9085}{24576}x^7 + \frac{1207237}{1769472}x^8 - \frac{23866321}{42467328}x^9 \\
&\quad - \frac{3541919959}{1019215872}x^{10} - \frac{1995833638939}{611529523200}x^{11} + \frac{279300793786379}{36691771392000}x^{12} \\
&\quad + \frac{391757152959071293}{17612050268160000}x^{13} + \frac{7008798044435889887}{657516543344640000}x^{14} \\
(h) \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(2,-1)} &= -\frac{1}{16}x^4 - \frac{39}{256}x^5 - \frac{217}{2048}x^6 + \frac{49165}{147456}x^7 + \frac{130355}{131072}x^8 + \frac{5559517}{9437184}x^9 \\
&\quad - \frac{24784286707}{10192158720}x^{10} - \frac{85727536571}{15099494400}x^{11} + \frac{8018311279919}{9784472371200}x^{12} \\
&\quad + \frac{426954539463007537}{17612050268160000}x^{13} + \frac{1690841701817242229}{205473919795200000}x^{14} \\
(h) \hat{A}_{(1,-1)}^{(1,-1),(1,-2)} &= -\frac{1}{16}x^4 - \frac{39}{256}x^5 - \frac{217}{2048}x^6 + \frac{49165}{147456}x^7 + \frac{1172203}{1179648}x^8 + \frac{16489063}{28311552}x^9 \\
&\quad - \frac{25014130699}{10192158720}x^{10} - \frac{776361723671}{135895449600}x^{11} + \frac{39715950889681}{48922361856000}x^{12} \\
&\quad + \frac{106967174066026363}{4403012567040000}x^{13} + \frac{573127223018148173}{219172181114880000}x^{14} \\
(h) \hat{A}_{(2,1)}^{(2,1),(1,0)} &= \frac{1}{16}x^4 + \frac{5}{64}x^5 + \frac{1}{512}x^6 - \frac{1447}{12288}x^7 - \frac{96919}{884736}x^8 + \frac{4299919}{21233664}x^9 \\
&\quad + \frac{1372456873}{2548039680}x^{10} + \frac{1539549011}{33973862400}x^{11} - \frac{17548243416437}{12230590464000}x^{12} \\
&\quad - \frac{236368338155041}{163074539520000}x^{13} + \frac{6064394285971787813}{1849265278156800000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(1,2)}^{(1,2),(0,1)} &= \frac{1}{16}x^4 + \frac{5}{64}x^5 + \frac{1}{512}x^6 - \frac{1447}{12288}x^7 - \frac{66571}{884736}x^8 + \frac{6585079}{21233664}x^9 \\
&\quad + \frac{1497358501}{2548039680}x^{10} - \frac{30399698071}{101921587200}x^{11} - \frac{2845695902117}{1358954496000}x^{12} \\
&\quad - \frac{1457626209239143}{1467670855680000}x^{13} + \frac{1805413430637869117}{1232843518771200000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \text{(h)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(0,1)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(0,1)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(0,-1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(0,-1)} \\
& = \text{(v)} \hat{A}_{(1,-1)}^{(1,-1),(0,-1)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(0,-1)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(0,1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(0,1)} \\
& \text{(v)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(1,0)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(-1,0)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(1,0)} = \text{(v)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(-1,0)} \\
& = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(-1,0)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(1,0)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(-1,0)} = \text{(h)} \hat{A}_{(1,-1)}^{(1,-1),(1,0)} \\
& \text{(h)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(2,0)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(-2,0)} \\
& \text{(v)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(0,2)} = \text{(v)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(0,-2)} \\
& \text{(v)} \hat{A}_{(1,2)}^{(1,2),(1,1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,2)}^{(-1,2),(-1,1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(1,-2)}^{(1,-2),(1,-1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,-2)}^{(-1,-2),(-1,-1)} \\
& = \text{(v)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(-1,-1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(1,-1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(-1,1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(1,1)} \\
& \text{(h)} \hat{A}_{(2,1)}^{(2,1),(1,1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-2,1)}^{(-2,1),(-1,1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(2,-1)}^{(2,-1),(1,-1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-2,-1)}^{(-2,-1),(-1,-1)} \\
& = \text{(h)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(-1,-1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(1,-1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(-1,1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(1,1)} \\
& \text{(h)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(1,-1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(-1,-1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(1,1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(-1,1)} \\
& = \text{(h)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(-1,1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(1,1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(-1,-1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(1,-1)} \\
& \text{(v)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(1,-1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(-1,-1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(1,1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(-1,1)} \\
& = \text{(v)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(-1,1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(1,1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(-1,-1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(1,-1)} \\
& \text{(v)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(0,-1)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(0,-1)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(0,1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(0,1)} \\
& = \text{(h)} \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(0,1)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(0,1)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(1,-1)}^{(1,-1),(0,-1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(0,-1)} \\
& \text{(v)} \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(1,0)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(-1,0)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(1,-1)}^{(1,-1),(1,0)} = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(-1,0)} \\
& = \text{(h)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(-1,0)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(1,0)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(-1,0)} = \text{(h)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(1,0)} \\
& \text{(h)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(2,-1)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(-2,-1)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(1,0)}^{(1,0),(2,1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,0)}^{(-1,0),(-2,1)} \\
& = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(-2,1)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(2,1)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(-2,-1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(1,-1)}^{(1,-1),(2,-1)} \\
& \text{(h)} \hat{A}_{(1,-1)}^{(1,-1),(1,-2)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(-1,-2)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(1,2)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(-1,2)} \\
& = \text{(v)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(-1,2)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(0,1)}^{(0,1),(1,2)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(-1,-2)} = \text{(v)} \hat{A}_{(0,-1)}^{(0,-1),(1,-2)} \\
& \text{(h)} \hat{A}_{(2,1)}^{(2,1),(1,0)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(-2,1)}^{(-2,1),(-1,0)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(2,-1)}^{(2,-1),(1,0)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-2,-1)}^{(-2,-1),(-1,0)} \\
& = \text{(v)} \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(-1,0)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(1,0)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(1,-1)}^{(1,-1),(-1,0)} = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(1,0)} \\
& \text{(v)} \hat{A}_{(1,2)}^{(1,2),(0,1)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(-1,2)}^{(-1,2),(0,1)} = -\text{(v)} \hat{A}_{(1,-2)}^{(1,-2),(0,-1)} = \text{(v)} \hat{A}_{(-1,-2)}^{(-1,-2),(0,-1)} \\
& = \text{(h)} \hat{A}_{(1,1)}^{(1,1),(0,-1)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,1),(0,-1)} = -\text{(h)} \hat{A}_{(1,-1)}^{(1,-1),(0,1)} = \text{(h)} \hat{A}_{(-1,-1)}^{(-1,-1),(0,1)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(v) \hat{A}_{(1,1)}^{(1,0),(0,1)} &= -\frac{1}{8}x^4 - \frac{3}{16}x^5 + \frac{25}{128}x^6 + \frac{727}{1024}x^7 + \frac{18115}{73728}x^8 - \frac{3154523}{1769472}x^9 \\
&\quad - \frac{126492529}{42467328}x^{10} + \frac{11055260869}{5096079360}x^{11} + \frac{2654261054291}{203843174400}x^{12} \\
&\quad + \frac{84350137547671}{9172942848000}x^{13} - \frac{8862924937679052707}{123284351877120000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(1,0)}^{(0,1),(1,1)} &= \frac{1}{64}x^4 + \frac{5}{64}x^5 + \frac{235}{3072}x^6 - \frac{2021}{12288}x^7 - \frac{509819}{884736}x^8 - \frac{8309107}{21233664}x^9 \\
&\quad + \frac{3952402859}{2548039680}x^{10} + \frac{17284333747}{4076863488}x^{11} + \frac{50279672968399}{36691771392000}x^{12} \\
&\quad - \frac{1214085015351138319}{4403012567040000}x^{13} - \frac{929722275560294551}{136982613196800000}x^{14} \\
(v) \hat{A}_{(0,1)}^{(1,0),(1,1)} &= \frac{1}{64}x^4 + \frac{5}{64}x^5 + \frac{235}{3072}x^6 - \frac{2021}{12288}x^7 - \frac{509819}{884736}x^8 - \frac{8309107}{21233664}x^9 \\
&\quad + \frac{3958600907}{2548039680}x^{10} + \frac{433756176091}{101921587200}x^{11} + \frac{52232959989919}{36691771392000}x^{12} \\
&\quad - \frac{161924818892929}{11741366845440}x^{13} - \frac{4253817611586716263}{1232843518771200000}x^{14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(v) \hat{A}_{(1,1)}^{(1,0),(0,1)} &= (v) \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,0),(0,1)} = (h) \hat{A}_{(1,1)}^{(1,0),(0,1)} = (h) \hat{A}_{(-1,1)}^{(-1,0),(0,1)} \\
(v) \hat{A}_{(1,0)}^{(0,1),(1,1)} &= (v) \hat{A}_{(1,0)}^{(0,-1),(1,-1)} = (h) \hat{A}_{(1,0)}^{(0,1),(1,1)} = (h) \hat{A}_{(1,0)}^{(0,-1),(1,-1)} \\
(v) \hat{A}_{(0,1)}^{(1,0),(1,1)} &= (v) \hat{A}_{(0,1)}^{(-1,0),(-1,1)} = (h) \hat{A}_{(0,1)}^{(1,0),(1,1)} = (h) \hat{A}_{(0,1)}^{(-1,0),(-1,1)}
\end{aligned}$$

Anhang E

Thermodynamische Amplituden der Observablen S^z der 4-Bahn-Leiter

Wir diskutieren die Störungsreihen der Observablen S^z auf der 4-Bahn-Leiter, die in Unterkapitel 3.2.6 diskutiert und gezeigt werden (siehe Bilder). Dabei sind die Amplituden definiert als $(v/h)S_{\vec{\gamma}}^{z,((\text{Spin } 1/2))}$. Wir geben alle Reihen, die in Ordnung 8 auftreten bis zu dieser Ordnung an (Erinnerung: Dies entspricht Ordnung 7 in J'/J , da bei der Anwendung der Observablen kein Störparameter J'/J zu multiplizieren ist) an.

$$\begin{aligned} {}^{(v)}S_{(0,0)}^{z,(1)} &= \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \left(\frac{J'}{J}\right)^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 - \frac{1}{64} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 + \frac{31}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 + \frac{209}{3072} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 - \frac{8153}{13824} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\ {}^{(v)}S_{(1,0)}^{z,(1)} &= -\frac{1}{2} \left(\frac{J'}{J}\right) - \frac{1}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^2 + \frac{3}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 + \frac{71}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 + \frac{37}{768} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 - \frac{1531}{2048} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 - \frac{9299}{13824} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\ {}^{(v)}S_{(1,0)}^{z,(2)} &= \frac{1}{2} \left(\frac{J'}{J}\right) + \frac{3}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 - \frac{73}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 - \frac{307}{768} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 + \frac{9149}{18432} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{625}{576} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\ {}^{(v)}S_{(1,1)}^{z,(1)} &= -\frac{1}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 - \frac{19}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 - \frac{19}{256} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 + \frac{377}{4608} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{3599}{55296} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\ {}^{(v)}S_{(1,1)}^{z,(2)} &= \frac{1}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 + \frac{21}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 + \frac{33}{256} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 + \frac{41}{4608} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{1001}{55296} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\ {}^{(v)}S_{(2,1)}^{z,(1)} &= -\frac{1}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 - \frac{131}{4608} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 - \frac{83}{1536} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\ {}^{(v)}S_{(2,1)}^{z,(2)} &= \frac{1}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 + \frac{133}{4608} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{131}{2304} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\ {}^{(v)}S_{(1,0)}^{z,(1)} &= \frac{1}{2304} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{37}{13824} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& {}^{(v)}S_{(0,0)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(0,0)}^{z,(2)} \quad ||| \quad {}^{(v)}S_{(1,0)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(-1,0)}^{z,(2)} \quad | \quad {}^{(v)}S_{(1,0)}^{z,(2)} = {}^{(v)}S_{(-1,0)}^{z,(1)} \\
& {}^{(v)}S_{(1,1)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(-1,1)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(1,-1)}^{z,(2)} = {}^{(v)}S_{(-1,-1)}^{z,(2)} \quad | \quad {}^{(v)}S_{(1,1)}^{z,(2)} = {}^{(v)}S_{(-1,1)}^{z,(2)} = {}^{(v)}S_{(1,-1)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(-1,-1)}^{z,(1)} \\
& {}^{(v)}S_{(2,1)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(-2,1)}^{z,(2)} = {}^{(v)}S_{(2,-1)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(-2,-1)}^{z,(2)} \quad | \quad {}^{(v)}S_{(2,1)}^{z,(2)} = {}^{(v)}S_{(-2,1)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(2,-1)}^{z,(2)} = {}^{(v)}S_{(-2,-1)}^{z,(1)} \\
& {}^{(v)}S_{(0,1)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(0,1)}^{z,(2)} = {}^{(v)}S_{(0,-1)}^{z,(1)} = {}^{(v)}S_{(0,-1)}^{z,(2)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& {}^{(h)}S_{(0,0)}^{z,(1)} = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \left(\frac{J'}{J}\right)^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 - \frac{1}{64} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 + \frac{31}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 + \frac{209}{3072} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 - \frac{8153}{13824} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(0,1)}^{z,(1)} = -\frac{1}{2} \left(\frac{J'}{J}\right) - \frac{1}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^2 + \frac{3}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 + \frac{71}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 + \frac{37}{768} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 - \frac{1531}{2048} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 - \frac{9299}{13824} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(0,1)}^{z,(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{J'}{J}\right) + \frac{3}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^2 - \frac{1}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 - \frac{73}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 - \frac{307}{768} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 + \frac{9149}{18432} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{625}{576} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(1,1)}^{z,(1)} = -\frac{1}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 - \frac{19}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 - \frac{19}{256} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 + \frac{377}{4608} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{3599}{55296} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(1,1)}^{z,(2)} = \frac{1}{8} \left(\frac{J'}{J}\right)^3 + \frac{21}{128} \left(\frac{J'}{J}\right)^4 + \frac{33}{256} \left(\frac{J'}{J}\right)^5 + \frac{41}{4608} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{1001}{55296} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(1,0)}^{z,(1)} = \frac{1}{2304} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{37}{13824} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(1,2)}^{z,(1)} = \frac{1}{2304} \left(\frac{J'}{J}\right)^6 + \frac{13}{4608} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(2,0)}^{z,(1)} = -\frac{1}{2304} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(2,0)}^{z,(2)} = \frac{1}{2304} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(2,2)}^{z,(1)} = -\frac{1}{18432} \left(\frac{J'}{J}\right)^7 \\
& {}^{(h)}S_{(2,2)}^{z,(2)} = \frac{1}{2304} \left(\frac{J'}{J}\right)^7
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& {}^{(h)}S_{(0,0)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(0,0)}^{z,(2)} \quad ||| \quad {}^{(h)}S_{(0,1)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(0,-1)}^{z,(2)} \quad | \quad {}^{(h)}S_{(0,1)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(0,-1)}^{z,(1)} \\
& {}^{(h)}S_{(1,1)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(-1,1)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(1,-1)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(-1,-1)}^{z,(2)} \quad | \quad {}^{(h)}S_{(1,1)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(-1,1)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(1,-1)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(-1,-1)}^{z,(1)} \\
& {}^{(h)}S_{(1,0)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(1,0)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(-1,0)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(-1,0)}^{z,(2)} \\
& {}^{(h)}S_{(1,2)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(-1,2)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(1,-2)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(-1,-2)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(1,2)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(-1,2)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(1,-2)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(-1,-2)}^{z,(2)} \\
& {}^{(h)}S_{(2,0)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(-2,0)}^{z,(2)} \quad | \quad {}^{(h)}S_{(2,0)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(-2,0)}^{z,(1)} \\
& {}^{(h)}S_{(2,2)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(-2,2)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(2,-2)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(-2,-2)}^{z,(2)} \quad | \quad {}^{(h)}S_{(2,2)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(-2,2)}^{z,(1)} = {}^{(h)}S_{(2,-2)}^{z,(2)} = {}^{(h)}S_{(-2,-2)}^{z,(1)}
\end{aligned}$$

Literaturverzeichnis

- [1] B. S. Shastry and B. Sutherland. Exact Ground State of a Quantum Mechanical Antiferromagnet. *Physica B*, 108 B:1069–1070, August 1981.
- [2] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila. Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory. Januar 2011.
- [3] K. H. J. Buschow. Handbook of Magnetic Materials. (Bd. 13), 2001.
- [4] U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop. Quantum Magnetism (Lecture Notes in Physics). Februar 2010.
- [5] H. T. Diep. Frustrated Spin Systems. Januar 2005.
- [6] P.W. Anderson. Resonating valence bonds: A new kind of insulator? *Materials Research Bulletin*, 8:153 – 160, Dezember 1972.
- [7] B. Bernu, C. Lhuillier, and L. Pierre. Signature of Néel order in exact spectra of quantum antiferromagnets on finite lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2590–2593, Oktober 1992.
- [8] L. Capriotti, A. E. Trumper, and S. Sorella. Long-Range Néel Order in the Triangular Heisenberg Model. *Phys. Rev. Lett.*, 82:3899–3902, Mai 1999.
- [9] S. R. White and A. L. Chernyshev. Neel Order in Square and Triangular Lattice Heisenberg Models. *Phys. Rev. Lett.*, 99:127004, September 2007.
- [10] R. Zinke, S.-L. Drechsler, and J. Richter. Influence of interchain coupling on spiral ground-state correlations in frustrated spin- $1/2$ $J_1 - J_2$ Heisenberg chains. *Phys. Rev. B*, 79:094425–1 094425–9, März 2009.
- [11] A. Lüscher and A. M. Läuchli. Exact diagonalization study of the antiferromagnetic spin- $1/2$ Heisenberg model on the square lattice in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 79:195102–1 – 195102–15, Mai 2009.
- [12] L. Balents. Spin liquids in frustrated magnets. *Nature*, 464:199–208, März 2010.
- [13] P. W. Anderson. The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity. *Science*, 235:1196–1198, März 1987.

- [14] L. B. Ioffe, M. V. Feigel'man, A. Ioselevich, D. Ivanov, M. Troyer, and G. Blatter. Topologically protected quantum bits from Josephson junction arrays. *Nature*, 415:503–506, Januar 2002.
- [15] J. Vidal, S. Dusuel, and K. P. Schmidt. Low-energy effective theory of the toric code model in a parallel magnetic field. *Phys. Rev. B*, 79:033109, Januar 2009.
- [16] P. Mendels and A. S. Wills. Kagomé Antiferromagnets: Materials Vs. Spin Liquid Behaviors. 2011.
- [17] J. B. Marston and C. Zeng. Spin Peierls and spin liquid phases of Kagomé quantum antiferromagnets. *Journal of Applied Physics*, 69, 1991.
- [18] P. Nikolic and T. Senthil. Physics of low-energy singlet states of the Kagomé lattice quantum Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 68:214415–1 – 214415–17, Dezember 2003.
- [19] R. R. P. Singh and D. A. Huse. Ground state of the spin-1/2 Kagome-lattice Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 76:180407–1 – 180407–4, November 2007.
- [20] G. Evenbly and G. Vidal. Frustrated Antiferromagnets with Entanglement Renormalization: Ground State of the Spin-1/2 Heisenberg Model on a Kagomé Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 104:187203–1 – 187203–4, Mai 2010.
- [21] S. Yan, D. A. Huse, and S. R. White. Spin-Liquid Ground State of the $S = 1/2$ Kagomé Heisenberg Antiferromagnet. *Science*, 332:1173–1176, April 2011.
- [22] P. Mendels, F. Bert, M. A. de Vries, A. Olariu, A. Harrison, F. Duc, J. C. Trombe, J. S. Lord, A. Amato, and C. Baines. Quantum Magnetism in the Paratacamite Family: Towards an Ideal Kagomé Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 98:077204–1 – 077204–4, Februar 2007.
- [23] J. S. Helton, K. Matan, M. P. Shores, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, Y. Yoshida, Y. Takano, A. Suslov, Y. Qiu, J.-H. Chung, D. G. Nocera, and Y. S. Lee. Spin Dynamics of the Spin-1/2 Kagomé Lattice Antiferromagnet $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 98:107204–1 – 107204–4, März 2007.
- [24] O. Ofer, A. Keren, E. A. Nytko, M. P. Shores, B. M. Bartlett, D. G. Nocera, C. Baines, and A. Amato. Ground state and excitation properties of the quantum kagome system $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ investigated by local probes. *Arxiv*, 0610540:1 – 5, Oktober 2006.
- [25] T. Imai, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, M. P. Shores, and D. G. Nocera. ^{63}Cu , ^{35}Cl , and ^1H NMR in the $S=1/2$ Kagomé Lattice $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 100:077203–1 – 077203–4, Februar 2008.
- [26] S. T. Bramwell and M. J. P. Gingras. Spin Ice State in Frustrated Magnetic Pyrochlore Materials. *Science* 16, 294:1495 – 1501, November 2001.

- [27] M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. Zeiske, and K. W. Godfrey. Geometrical Frustration in the Ferromagnetic Pyrochlore $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$. *Phys. Rev. Lett.*, 79:2554 – 2557, November 2011.
- [28] A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan, and B. S. Shastry. Zero-point entropy in 'spin ice'. *Nature*, 399:333 – 335, Mai 1999.
- [29] A. P. Ramirez, B. S. Shastry, A. Hayashi, J. J. Krajewski, D. A. Huse, and R. J. Cava. Multiple Field-Induced Phase Transitions in the Geometrically Frustrated Dipolar Magnet: $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$. *Phys. Rev. Lett.*, 89:067202–1 – 067202–4, Juli 2002.
- [30] J. S. Gardner, G. Ehlers, N. Rosov, R. W. Erwin, and C. Petrovic. Spin-spin correlations in $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$: A polarized neutron scattering study. *Phys. Rev. B*, 70:180404–1 – 180404–4, November 2004.
- [31] A. Yaouanc, P. Dalmas de Reotier, C. Marin, and V. Glazkov. Single-crystal versus polycrystalline samples of magnetically frustrated $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$: Specific heat results. *Phys. Rev. B*, 84:172408–1 – 172408–3, November 2011.
- [32] C. Castelnovo, R. Moessner, and S. L. Sondhi. Magnetic monopoles in spin ice. *Nature*, 451, Oktober 2007.
- [33] T. Ishiguro, K. Yamaji, and G. Saito. Organic Superconductors. März 1990.
- [34] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato, and G. Saito. Spin Liquid State in an Organic Mott Insulator with a Triangular Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 91:107001, September 2003.
- [35] A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan, and B. S. Shastry. Superconductivity in a synthetic organic conductor $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$. *J. Physique Lett.*, 41:95 – 98, Februar 1980.
- [36] R. W. Smith and D. A. Keszler. Synthesis, structure, and properties of the orthoborate $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Journal of Solid State Chemistry*, 93:430–435, August 1991.
- [37] H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern, N. V. Mushnikov, K. Onizuka, M. Kato, K. Kosuge, Shin Miyahara, Federico Becca, and Frederic Mila. Exact Dimer Ground State and Quantized Magnetization Plateaus in the Two-Dimensional Spin System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 82.
- [38] K. Sparta, G.J. Redhammer, P. Roussel, G. Heger, G. Roth, P. Lemmens, A. Ionescu, M. Grove, G. Güntherodt, F. Hüning, H. Lueken, H. Kageyama, K. Onizuka, and Y. Ueda. Structural phase transition in the 2D spin dimer compound $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Eur. Phys. J. B*, 19:507 – 519, 2001.
- [39] K. Kodama, M. Takigawa, M. Horvatic, C. Berthier, H. Kageyama, Y. Ueda, S. Miyahara, F. Becca, and F. Mila. Magnetic Superstructure in the Two-Dimensional Quantum Antiferromagnet $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Science*, 298.

- [40] H. Kageyama, K. Onizuka, T. Yamauchi, Yu. Ueda, S. Hane, H. Mitamura, T. Goto, K. Yoshimura, and K. Kosuge. Anomalous Magnetizations in Single Crystalline $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 68:1821–1823, Juni 1999.
- [41] K. Kodama, J. Yamazaki, M. Takigawa, H. Kageyama, K. Onizuka, and Y. Ueda. Cu nuclear spin-spin coupling in the dimer singlet state in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *J. Phys.: Condens. Matter*, 14:L319 – L325, April 2002.
- [42] V. V. Mazurenko, S. L. Skornyakov, V. I. Anisimov, and F. Mila. First-principles investigation of symmetric and antisymmetric exchange interactions of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. B*, 78:195110, November 2008.
- [43] O. Cepas, K. Kakurai, L. P. Regnault, T. Ziman, J. P. Boucher, N. Aso, M. Nishi, H. Kageyama, and Y. Ueda. Dzyaloshinski-Moriya Interaction in the 2D Spin Gap System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 87:167205–1 – 167205–4, Oktober 2001.
- [44] K. Kodama, S. Miyahara, M. Takigawa, M. Horvatic, C. Berthier, F. Mila, H. Kageyama, and Y. Ueda. Field-induced effects of anisotropic magnetic interactions in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 17:L61 – L68, Februar 2005.
- [45] S. Miyahara and K. Ueda. Theory of the orthogonal dimer Heisenberg spin model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 15,9, Februar 2003.
- [46] C. Knetter, E. Müller-Hartmann, and G. S Uhrig. Symmetries and triplet dispersion in a modified Shastry-Sutherland model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 12:9069 – 9083, Oktober 2000.
- [47] H. Nojiri, H. Kageyama, K. Onizuka, Y. Ueda, and M. Motokawa. Direct Observation of the Multiple Spin Gap Excitations in Two-Dimensional Dimer System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Journal of the Physical Society of Japan*, 68:2906 – 2909, September 1999.
- [48] H. Kageyama, M. Nishi, N. Aso, K. Onizuka, T. Yosihama, K. Nukui, K. Kodama, K. Kakurai, and Y. Ueda. Direct Evidence for the Localized Single-Triplet Excitations and the Dispersive Multitriplet Excitations in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 84:5876 – 5879, Juni 2000.
- [49] C. Knetter and G. S. Uhrig. Dynamic Structure Factor of the Two-Dimensional Shastry-Sutherland Model. *Phys. Rev. Lett.*, 92:027204–1 – 027204–4, Januar 2004.
- [50] Z. Weihong, C. J. Hamer, and J. Oitmaa. Series expansions for a Heisenberg antiferromagnetic model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. B*, 60:6608–6616, September 1999.
- [51] H. Nojiri, H. Kageyama, Y. Ueda, and M. Motokawa. ESR Study on the Excited State Energy Spectrum of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$: A Central Role of Multiple-Triplet Bound States. *Journal of the Physical Society of Japan*, 72:3243 – 3253, Dezember 2003.

- [52] P. Lemmens, M. Grove, M. Fischer, and G. Güntherodt. Collective Singlet Excitations and Evolution of Raman Spectral Weights in the 2D Spin Dimer Compound $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 85:2605 – 2608, September 2000.
- [53] B. D. Gaulin, S. H. Lee, S. Haravifard, J. P. Castellan, A. J. Berlinsky, H. A. Dabkowska, Y. Qiu, and J. R. D. Copley. High-Resolution Study of Spin Excitations in the Singlet Ground State of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 93:267202–1 – 267202–4, Dezember 2004.
- [54] S. Miyahara and K. Ueda. Exact Dimer Ground State of the Two Dimensional Heisenberg Spin System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 82:3701 – 3704, Mai 1999.
- [55] K. Onizuka, H. Kageyama, Y. Narumi, K. Kindo, Y. Ueda, and T. Goto. $1/3$ Magnetization Plateau in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ - Stripe Order of Excited Triplets -. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 69:1016–1018, April 2000.
- [56] M. Jaime, R. Daou, S. A. Crooker, F. Weickert, A. Uchida, A. Feiguin, C. D. Batista, H. A. Dabkowska, and B. D. Gaulin. Magnetostriction and magnetic texture to 97.4 Tesla in frustrated $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Arxiv*, 1202.0812:1–16, Februar 2012.
- [57] Y.H. Matsuda, N. Abe¹, S. Takeyama, H. Kageyama, P. Corboz, A. Honecker, S.R. Manmana, G.R. Foltin, K.P. Schmidt, and F. Mila. Magnetization of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ in Ultrahigh Magnetic Fields up to 118 T. *Phys. Rev. Lett.*, 111:137204–1 – 137204–5, September 2013.
- [58] Y. H. Matsuda, S. Takeyama N. Abe¹, H. Kageyama, P. Corboz, A. Honecker, S. R. Manmana, G. R. Foltin, K. P. Schmidt, and F. Mila. Magnetization of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ in Ultrahigh Magnetic Fields up to 118 T. *Phys. Rev. Lett. 111 137204 Supplementary material*, September 2013.
- [59] K. P. Schmidt and G. S. Uhrig. Excitations in One-Dimensional $S=1/2$ Quantum Antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 90:227204, Juni 2003.
- [60] F. Levy, I. Sheikin, C. Berthier, M. Horvatic, M. Takigawa, H. Kageyama, T. Waki, and Y. Ueda. Field dependence of the quantum ground state in the Shastry-Sutherland system $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Eur. Phys. Lett.*, 81:67004–p1 – 67004–p5, März 2008.
- [61] M. Takigawa, S. Matsubara, M. Horvatic, C. Berthier, H. Kageyama, and Y. Ueda. NMR Evidence for the Persistence of a Spin Superlattice Beyond the $1/8$ Magnetization Plateau in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 101:037202, Juli 2008.
- [62] M. Takigawa, M. Horvatic, T. Waki, S. Krämer, C. Berthier, F. Levy-Bertrand, I. Sheikin, H. Kageyama, Y. Ueda, and F. Mila. Incomplete Devil’s Staircase in the Magnetization Curve of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 110:067210, Februar 2013.
- [63] E. Dagotto and A. Moreo. Phase diagram of the frustrated spin- $1/2$ Heisenberg antiferromagnet in 2 dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 63:2148–2151, November 1989.
- [64] P. Corboz and F. Mila. Tensor network study of the Shastry-Sutherland model in zero magnetic field. *Arxiv*, 1212.2983:1–11, Dezember 2012.

- [65] J. Lou, T. Suzuki, K. Harada, and N. Kawashima. Study of the Shastry Sutherland Model Using Multi-scale Entanglement Renormalization Ansatz. *Arxiv*, 1212:1999:1–10, Dezember 2012.
- [66] S. El Shawish, A. Ramsak, and J. Bonca. Thermal entanglement of qubit pairs on the Shastry-Sutherland lattice. *Phys. Rev. B*, 75:205442, Mai 2007.
- [67] A. Isacsson and O. F. Syljuåsen. Variational treatment of the Shastry-Sutherland antiferromagnet using projected entangled pair states. *Phys. Rev. E*, 74:026701, August 2006.
- [68] E. Müller-Hartmann, R. R. P. Singh, C. Knetter, and G. S. Uhrig. Exact Demonstration of Magnetization Plateaus and First-Order Dimer-Neel Phase Transitions in a Modified Shastry-Sutherland Model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 84:1808 – 1811, Februar 2000.
- [69] M. Albrecht and F. Mila. First-order transition between magnetic order and valence bond order in a 2D frustrated Heisenberg model. *Eur. Phys. Lett.*, 34:145 – 150, April 1996.
- [70] R. Darradi, J. Richter, and D. J. J. Farnell. Coupled cluster treatment of the Shastry-Sutherland antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 72:104425–1 – 104425–5, September 2005.
- [71] B. S. Shastry and B. Kumar. $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$: A Unique Mott Hubbard Insulator. *Progress of Theoretical Physics*, 145:1–16, März 2002.
- [72] W. Zheng, J. Oitmaa, and C. J. Hamer. Phase diagram of the Shastry-Sutherland antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 65:014408, November 2001.
- [73] S. Moukouri. The Plaquette Ground State of the Shastry-Sutherland Model. *Arxiv*, 0805.0574:1–41, Mai 2008.
- [74] T. Munehisa and Y. Munehisa. The Stochastic State Selection Method for Energy Eigenvalues in the Shastry Sutherland Model. *J. Phys. Soc. Jpn*, 73:340–347, September 2003.
- [75] A. Läuchli, S. Wessel, and M. Sigrist. Phase diagram of the quadrumerized Shastry-Sutherland model. *Phys. Rev. B*, 66:014401–1 – 014401–7, Juni 2002.
- [76] Z. Y. Meng and S. Wessel. Phases and magnetization process of an anisotropic Shastry-Sutherland model. *Phys. Rev. B*, 78:224416, Dezember 2008.
- [77] M. Al Hajj and J.-P. Malrieu. Phase transitions in the Shastry-Sutherland lattice. *Phys. Rev. B*, 72:094436, September 2005.
- [78] J. Liu, N. Trivedi, Y. Lee, B. N. Harmon, and J. Schmalian. Quantum Phases in a Doped Mott Insulator on the Shastry-Sutherland Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 99:227003, November 2007.
- [79] A. Koga and N. Kawakami. Quantum Phase Transitions in the Shastry-Sutherland Model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 84:4461–4464, Mai 2000.

- [80] K. Y. Takushima, A. Koga, and N. Kawakami. Competing Spin-Gap Phases in a Frustrated Quantum Spin System in Two Dimensions. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 70:1369–1374, Mai 2001.
- [81] J. Lou, T. Suzuki, K. Harada, and N. Kawashima. Study of the Shastry Sutherland Model Using Multi-scale Entanglement Renormalization Ansatz. *Arxiv*, 1212:1999:1–10, Dezember 2012.
- [82] C. Knetter, A. Bühler, E. Müller-Hartmann, and G. S. Uhrig. Dispersion and Symmetry of Bound States in the Shastry-Sutherland Model. *Phys. Rev. Lett.*, 85:3958 – 3961, Oktober 2000.
- [83] S. Miyahara and K. Ueda. Thermodynamic Properties of Three-Dimensional Orthogonal Dimer Model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Arxiv*, 0004260:1 – 4, April 2000.
- [84] S. Miyahara and K. Ueda. Superstructures at magnetization plateaus in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. B*, 61:3417 – 3424, Februar 2000.
- [85] T. Momoi and K. Totsuka. Magnetization plateaus of the Shastry-Sutherland model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$: Spin-density wave, supersolid, and bound states. *Phys. Rev. B*, 62:15067 – 15078, Dezember 2000.
- [86] Y. Fukumoto. Magnetization Plateaus in the Shastry-Sutherland Model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$: Results of Fourth-Order Perturbation Expansion with a Low-Density Approximation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 70:1397 – 1403, Mai 2001.
- [87] J. Dorier, K. P. Schmidt, and F. Mila. Theory of Magnetization Plateaux in the Shastry-Sutherland Model. *Phys. Rev. Lett.*, 101:250402–1 – 250402–4, Dezember 2008.
- [88] L. Isaev, G. Ortiz, and J. Dukelsky. Local Physics of Magnetization Plateaux in the Shastry-Sutherland Model. *Phys. Rev. Lett.*, 103:177201, Oktober 2009.
- [89] A. Fledderjohann and K.-H. Mütter. Magnetic order in the Shastry-Sutherland model. *Eur. Phys. J. B*, 26:211–218, Januar 2002.
- [90] A. Abendschein and S. Capponi. Effective Theory of Magnetization Plateaux in the Shastry-Sutherland Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 101:227201, November 2008.
- [91] G. Misguich, T. Jolicoeur, and S. M. Girvin. Magnetization Plateaux of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ from a Chern-Simons Theory. *Phys. Rev. Lett.*, 87:097203, August 2001.
- [92] P. Corboz and F. Mila. Crystals of bound states in the magnetization plateaux of the Shastry-Sutherland model. *Arxiv*, 1401.3778, Januar 2014.
- [93] F. Mila, J. Dorier, and K. P. Schmidt. Supersolid Phases of Hardcore Bosons on the Square Lattice: Correlated Hopping, Next-Nearest Neighbor Hopping and Frustration. *Progress of Theoretical Physics Supplements*, 176.
- [94] K. P. Schmidt, J. Dorier, A. Laeuchli, and F. Mila. Single-particle versus pair condensation of hard-core bosons with correlated hopping. *Phys. Rev. B*, 74.

- [95] J.-D. Picon, A. F. Albuquerque¹, K. P. Schmidt, N. Laflorencie, M. Troyer, and F. Mila. Mechanisms for spin supersolidity in $S=1/2$ spin-dimer antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 78.
- [96] K. P. Schmidt, J. Dorier, and F. Mila. Magnetization plateaux in an extended Shastry-Sutherland model. *IOP Science*, 145:1 – 8, 2009.
- [97] M. Nemeč, G. R. Foltin, and K. P. Schmidt. Microscopic Mechanism for the $1/8$ Magnetization Plateau in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. B*, 86:174425–1 – 174425–22, November 2012.
- [98] S. R. Manmana, J.-D. Picon, K. P. Schmidt, and F. Mila. Unconventional magnetization plateaus in a Shastry-Sutherland spin tube. *Eur. Phys. Lett.*, 94:67004–p1 – 67004–p6, Juni 2011.
- [99] J. Schulenburg and J. Richter. Infinite series of magnetization plateaus in the frustrated dimer-plaquette chain. *Phys. Rev. B*, 65:054420, Januar 2002.
- [100] C. Knetter. Perturbative Continuous Unitary Transformations: Spectral Properties of Low Dimensional Spin Systems. *Ph.D. Thesis*, 2003.
- [101] K. Schmidt. Spectral Properties of Quasi One-Dimensional Quantum Antiferromagnets: Perturbative Continuous Unitary Transformations. *Ph.D. Thesis*, 2004.
- [102] M. Kamfor. Robustness and spectroscopy of the toric code in a magnetic field. *Ph.D. Thesis*, 2013.
- [103] M. D. Schulz. Topological phase transitions driven by non-Abelian anyons. *Ph.D. Thesis*, 2013.
- [104] J. Vidal. Exotic Phases of Quantum Frustrated Magnets: Magnetization Plateaus, Nematic Order and Supersolid Phases. *Ph.D. Thesis*, 2008.
- [105] C. Knetter. Störungstheorie mit Hilfe von Flußgleichungen angewendet auf dimerisierte Spinmodelle. *Diploma Thesis*, 1999.
- [106] S. Dusuel and G. S. Uhrig. The quartic oscillator: a non-perturbative study by continuous unitary transformations. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 37:9275–9294, September 2004.
- [107] F. J. Wegner. Flow equations for Hamiltonians. *Physics Reports*, 348:77–89, Juli 2001.
- [108] F. Wegner. Flow-equations for Hamiltonians. *Annalen der Physik*, 506:77–91, 1994.
- [109] S. D. Glazek and K. G. Wilson. Renormalization of Hamiltonians. *Phys. Rev. D*, 49:4214–4218, April 1994.
- [110] S. D. Glazek and K. G. Wilson. Perturbative renormalization group for Hamiltonians. *Phys. Rev. D*, 48:5863–5872, Dezember 1993.

- [111] A. Mielke. Flow equations for band-matrices. *The European Physical Journal B*, 5:605–611, März 1998.
- [112] J. Stein. Flow equations and the strong-coupling expansion for the Hubbard model. *Journal of Statistical Physics*, 88:487–511, Juli 1997.
- [113] S. Kehrein, A. Mielke, and P. Neu. High order perturbation theory for spectral densities of multi-particle excitations: $S=1/2$ two-leg Heisenberg ladder. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 99:269–280, März 1995.
- [114] C. P. Heidbrink and G. S. Uhrig. Landau Quasiparticle Mapping: Fermi Liquid Approach and Luttinger Liquid Behavior. *Phys. Rev. Lett.*, 88:146401, März 2002.
- [115] T. Fischer, S. Duffe, and G. S. Uhrig. Adapted continuous unitary transformation to treat systems with quasi-particles of finite lifetime. *New Journal of Physics*, 12:033048, März 2010.
- [116] N. A. Drescher, T. Fischer, and G. S. Uhrig. Truncation errors in self-similar continuous unitary transformations. *Eur. Phys. J. B*, 79:225–240, Januar 2011.
- [117] S. A. Hamerla, S. Duffe, and G. S. Uhrig. Derivation of the t-J model for finite doping. *Phys. Rev. B*, 82:235117, Dezember 2010.
- [118] H. Krull, N. A. Drescher, and G. S. Uhrig. Enhanced perturbative continuous unitary transformations. *Phys. Rev. B*, 86:125113, September 2012.
- [119] C. Knetter and G. S. Uhrig. Perturbation theory by flow equations: dimerized and frustrated $S=1/2$ chain. *Eur. Phys. J. B*, 13:209–225, Januar 2000.
- [120] C. Knetter and G. S. Uhrig. The structure of operators in effective particle-conserving models. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 36:7889–7907, Juli 2003.
- [121] C. Knetter and G. S. Uhrig. High order perturbation theory for spectral densities of multi-particle excitations: $S=1/2$ two-leg Heisenberg ladder. *The European Physical Journal B*, 36:525–544, Dezember 2003.
- [122] S. Duffe. Effektive Hamiltonians for Undoped and Hole-Doped Antiferromagnetic Spin-1/2 Ladder by Self-Similar Continuous Unitary Transformations in Real Space. *Ph.D. Thesis*, 2010.
- [123] C. Knetter, K. P. Schmidt, and G. S. Uhrig. The structure of operators in effective particle-conserving models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36:7889, Juli 2003.
- [124] M. Powalski, K. Coester, R. Moessner, and K. P. Schmidt. Disorder by disorder and flat bands in the kagome transverse field Ising model. *Phys. Rev. B*, 87:054404, Februar 2013.
- [125] H.-Y. Yang and K. P. Schmidt. Effective models for gapped phases of strongly correlated quantum lattice models. *Eur. Phys. Lett.*, 94:17004–p1 – 17004–p6, April 2011.

- [126] H.-Y. Yang, A. F. Albuquerque, S. Capponi, A. M. Läuchli, and K. P. Schmidt. Effective spin couplings in the Mott insulator of the honeycomb lattice Hubbard model. *New Journal of Physics*, 14:1–19, November 2012.
- [127] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh, and D. A. Huse. Perturbation expansions for quantum many-body systems. *Journal of Statistical Physics*, 59:1093–1142, Juni 1990.
- [128] M. P. Gelfand. Series expansions for excited states of quantum lattice models. *Solid State Communications*, 98:11–14, April 1996.
- [129] G. S. Uhrig and B. Normand. Magnetic properties of $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ from frustrated interchain coupling. *Phys. Rev. B*, 58:R14705–R14708, Dezember 1998.
- [130] S. Trebst, H. Monien, C. J. Hamer, Z. Weihong, and R. R. P. Singh. Strong-Coupling Expansions for Multiparticle Excitations: Continuum and Bound States. *Phys. Rev. Lett.*, 85:4373–4376, November 2000.
- [131] W. Zheng, C. J. Hamer, R. R. P. Singh, S. Trebst, and H. Monien. Linked cluster series expansions for two-particle bound states. *Phys. Rev. B*, 63:144410, März 2001.
- [132] M. P. Gelfand and R. R. P. Singh. High-order convergent expansions for quantum many particle systems. *Advances in Physics*, 49:93–140, März 2000.
- [133] C. Domb and M. S. Green. Phase Transitions and Critical Phenomena: Band 13. *Guttmann-Artikel*, 1989.
- [134] S. R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2863–2866, November 1992.
- [135] S. R. White. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B*, 48:10345–10356, Oktober 1993.
- [136] R. M. Noack and S. R. Manmana. Diagonalization- and Numerical Renormalization-Group-Based Methods for Interacting Quantum Systems. *AIP Conf Proc.*, 789:93–163, 2005.
- [137] R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino. The Density Matrix Renormalization Group for Fermion Systems. *Arxiv*, 9404100:1–22, April 1994.
- [138] U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group. *Review of Modern Physics*, 77:259–309, Januar 2005.
- [139] U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, 326:96–192, Oktober 2011.
- [140] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, and K. Hallberg. Density-Matrix Renormalization.
- [141] C. Raas. Dynamic Density-Matrix Renormalization for the Symmetric Single Impurity Anderson Model. *PhD. Thesis*, Juli 2005.

- [142] P. Grete. Local Dynamics of the Single-Band Hubbard Model in Infinite Dimensions via Dynamic Density-Matrix Renormalization. *PhD. Thesis*, Juli 2010.
- [143] D. Stanek. Dynamics and Decoherence in the Central Spin Model: From a Quantum Mechanical to a Classical Description. *PhD. Thesis*, Februar 2014.
- [144] V. Murg, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Variational study of hard-core bosons in a two-dimensional optical lattice using projected entangled pair states. *Phys. Rev. A*, 75:033605, März 2007.
- [145] J. Jordan, R. Orús, G. Vidal, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in Two Spatial Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 101:250602, Dezember 2008.
- [146] G. Vidal. Entanglement Renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, 99:220405, November 2007.
- [147] G. Evenbly and G. Vidal. Entanglement Renormalization in Two Spatial Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 102:180406, Mai 2009.
- [148] T. Matsubara and H. Matsuda. A Lattice Model of Liquid Helium, I. *Prog. Theor. Phys.*, 16:569–582.
- [149] J.A. Nelder and R. Mead. A simple method for function minimization. *Computer Journal*, 7:308–313, 1965.
- [150] C. Lanczos. AAn Iteration Method for the Solution of the Eigenvalue Problem of Linear Differential and Integral Operators. *Journal of research of the National Bureau of Standards*, 45:255–282, Oktober 1949.
- [151] J. K. Cullum and R. A. Willoughby. Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations: Vol. 1: Theory. 2002.
- [152] Y. Saad. Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems. Mai 2011.
- [153] H. R. Schwarz and N. Köckler. Numerische Mathematik. 2004.
- [154] M. Takahashi. Half-filled Hubbard model at low temperature. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 10:259–287, April 1967.
- [155] D. Klagges and K. P. Schmidt. Constraints on Measurement-Based Quantum Computation in Effective Cluster States. *Phys. Rev. Lett.*, 108:230508, Juni 2012.
- [156] P.-O. Löwdin. Group Algebra, Convolution Algebra, and Applications to Quantum Mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 39:1289–1303, April 1977.
- [157] S. Takeyama, R. Sakakura, Y. H. Matsuda, A. Miyata, and M. Tokunaga. Precise Magnetization Measurements by Parallel Self-Compensated Induction Coils in a Vertical Single-Turn Coil up to 103 T. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 81:014702–1 – 014702–7, Januar 2012.

Teilpublikationen

- 1 M. Nemeč, G. R. Foltin, K. P. Schmidt,
Microscopic Mechanism for the 1/8 Magnetization Plateau in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$,
Phys. Rev. B 86, 17 , 174425-1 - 174425-22 (American Physical Society, November 2012)
doi: 10.1103/PhysRevB.86.174425

- 2 Y.H. Matsuda, N. Abe¹, S. Takeyama, H. Kageyama, P. Corboz, A. Honecker, S.R. Manmana, G.R. Foltin, K.P. Schmidt, F. Mila,
Magnetization of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ in Ultrahigh Magnetic Fields up to 118 T
Phys. Rev. Lett. 111 , 137204-1 - 137204-5 (American Physical Society September 2013)
doi: 10.1103/PhysRevLett.111.137204

Danksagung

Besonders großen Dank gebührt meinem Betreuer Kai Schmidt. Diese Arbeit wäre ohne sein Engagement im Projekt und in der Erstellung dieses Manuskripts nicht möglich gewesen. Die Zeit in seiner Arbeitsgruppe war sehr angenehm. Kai, ich wünsche dir weiterhin viel Erfolg bei deiner wissenschaftlichen Karriere und ich hoffe, dass du deine freundliche Art immer beibehältst.

S. Manmana möchte ich für die DMRG-Daten danken, die uns freundlicherweise für diese Arbeit zur Verfügung gestellt wurden. Ohne unsere Zusammenarbeit wären viele unserer Ergebnisse nicht Zustand gekommen.

Ich möchte mich bei meinen Bürokollegen Peter, Isabel, Simone und Daniel bedanken, die über die ganze Zeit zu wertvollen Freunden geworden sind. Speziell Simone und Isabel möchte ich für regelmäßige Aufmunterungen danken, während der doch stressigen Zeit des Zusammenschreibens.

Simone, dir gebührt nochmal besondere Dank wegen der tatkräftigen Hilfe bei der Korrektur dieses Manuskripts. Anders als viele der Doktoranden willst du in der universitären Laufbahn bleiben und ich wünsche dir dabei viel Erfolg.

Weiter möchte ich allen Mitarbeitern und Freunden aus den Arbeitsgruppen EURYI, T1 und T2 für eine schöne Zeit danken.

Zuletzt möchte ich meiner Familie und meinen Freunden danken, die mich ermuntert haben die Promotion anzustreben und mich motiviert haben diesen Schritt zu beginnen und zu beenden.