

Zusammenfassung:

In dieser Arbeit haben wir uns mit einer effektiven Quasi-Teilchen-Beschreibung der Dimer-Phase [1] [2] des Shastry-Sutherland-Modells [3] 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 [4]. 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 [5], die emergente bosonische Mott-Isolatoren mit spontaner Brechung der Translationssymmetrie darstellen.

Historisch hat sich mit exakten Diagonalisierungen und klassischen Näherungen [1] [6] 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 [2] oder nicht-perturbativen Ansätzen [7] bestimmt werden. Die Lösungen der angesprochenen effektiven Modelle können weitere Plateaus vorhergesagen, die im Nachhinein auch gemessen wurden [8] [9] [10]. 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 [2].

Ein Teil dieser Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment kann durch die zusätzliche Betrachtung von DM-Wechselwirkungen aufgehoben werden [11]. 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 [11]. Das mikroskopische Magnetisierungsprofil der Plateaus des Experimentes kann aber weiterhin nicht konsistent mit diesem erweiterten Bild erklärt werden [11].

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 [12] 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 [13], 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 [12] 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 $1/8 M_{\text{sat}}$ und $1/4 M_{\text{sat}}$ 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 $1/8 M_{\text{Sat}}$ 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 [13] 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 [13]. 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 Hüpfsterme 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 $3/16 M_{\text{Sat}}$ 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 [14]. 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 [14]. 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 [13]. 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 [1].

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.

Literaturverzeichnis

- [1] 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.
- [2] 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.
- [3] B. S. Shastry and B. Sutherland. Exact Ground State of a Quantum Mechanical Antiferromagnet. *Physica B*, 108 B:1069–1070, August 1981.
- [4] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila. Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory. Januar 2011.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] A. Abendschein and S. Capponi. Effective Theory of Magnetization Plateaux in the Shastry-Sutherland Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 101:227201, November 2008.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.

-
- [12] 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.
- [13] P. Corboz and F. Mila. Crystals of bound states in the magnetization plateaus of the Shastry-Sutherland model. *Arxiv*, 1401.3778, Januar 2014.
- [14] 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.