

Spin Liquid Zustände auf einem Dreiecksgitter



Bachelorarbeit der Fakultät für Physik
der
Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von
Paul Koschmieder
geboren in Speyer

München, den 15. September 2016

Spin liquid states on a triangular lattice



Bachelor thesis
Faculty of Physics
Ludwig-Maximilians-Universität München

submitted by
Paul Koschmieder
born in Speyer

Munich, september 15th 2016

Gutachter: Prof. Dr. Matthias Punk
Tag der mündlichen Prüfung: 30.09.2016

Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, das Verhalten eines Spinsystems auf einem antiferromagnetischen Dreiecksgitter bei $T = 0$ zu beschreiben. Da dieses System geometrisch frustriert ist, ist es möglich, dass sich hochgradig entartete Spin-Liquid Zustände auf dem Gitter ausbilden. Um dies herauszufinden wird der Heisenberg-Hamiltonian in eine mögliche Form der zweiten Quantisierung überführt, die sogenannte Schwinger-Boson Darstellung. Zur Diagonalisierung des Hamiltonians wird ein Mean-Field Näherung gemacht, die die Gittersymmetrien und die $SU(2)$ -Symmetrie des Spinsystems erhält. Mithilfe einer Bogoljubow-Transformation wird der Hamiltonian anschließend diagonalisiert. Dabei fallen neuartige Anregungen auf die sich bosonisch verhalten, jedoch ein $\Delta S = \frac{1}{2}$ tragen. Diese Spinonanregungen werden untersucht, ihre Dispersionsrelation ermittelt und der experimentell messbare Strukturfaktor des Systems bei $T = 0$ numerisch berechnet.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Mathematisch-physikalische Grundlagen	3
2.1	Zweite Quantisierung	3
2.1.1	Besetzungszahldarstellung	5
2.2	Mean-Field Theorie	5
2.3	Bogoljubow-Transformation	6
2.4	Numerische Berechnungen/ Mathematica	7
3	Systembeschreibung	8
3.1	Heisenberg-Hamiltonian	8
3.2	Schwinger-Boson-Repräsentation	9
3.3	Mean-Field-Näherung	10
3.4	Bogoljubow-Transformation	16
4	Analyse der Ergebnisse	18
4.1	Dispersionsrelation der Spinonanregungen	19
4.2	Statischer Strukturfaktor bei $T=0$	21
5	Zusammenfassung und Ausblick	27

Kapitel 1

Einleitung

In der modernen Welt ist Elektrizität die zentrale Form des Energietransports, den sich die Menschheit zu Nutze gemacht hat. Neben dem Transport von elektrischer Ladung ist das Erzeugen starker Magnetfelder von einer zunehmend großen Bedeutung. Für verschiedene wissenschaftliche Anwendungen, wie beispielsweise das Betreiben eines ringförmigen Teilchenbeschleunigers für geladene Teilchen wie dem Large-Hadron-Collider (LHC) in der Nähe von Genf, oder aber auch für bildgebende medizinische Anwendungen, die mittlerweile weit verbreitet sind, wie die Magnetresonanztomografie (MRT), werden starke Magnetfelder in der Größenordnung von 10 Tesla magnetischer Feldstärke für den Betrieb benötigt. Wie die Maxwellgleichungen der Elektrodynamik zeigen, ist für das Erzeugen eines starken Magnetfeldes eine große Stromstärke notwendig. Um eine große Stromstärke möglichst energiesparend zu erreichen versucht man, den Widerstand des verwendeten Leiters möglichst gering zu halten. Hier kommen Supraleiter zum Einsatz. Supraleitung ist ein Phänomen, bei dem der elektrische Widerstand eines Materials nahezu verschwindet, wenn eine gewisse kritische Temperatur (T_c) unterschritten wird. Für bisher realisierte Anwendungen werden klassische Supraleiter wie Niob-Legierungen verwendet, deren Sprungtemperatur mit $T_c \approx 10K$ sehr niedrig ist, was eine entsprechend aufwändige Kühlung notwendig macht. Eine Alternative könnten Hochtemperatursupraleiter darstellen wie zum Beispiel $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$ mit $T_c = 110K$ [1]. Für Stoffe, die ein solches Verhalten im Experiment zeigen, hat die theoretische Physik noch keine Erklärung gefunden. Es werden verschiedene Modelle getestet. Ein Ansatz für antiferromagnetische Stoffe sind neuartige, ungeordnete Spinzustände, die durch die innere Geometrie des Materials eine geometrische Frustration besitzen. Diese ungeordneten Spinzustände, sogenannte Spin-Liquids, liegen energetisch höher als Spinzustände mit antiferromagnetischer Ordnung, was die erhöhte Sprungtemperatur erklären könnte.

In der vorliegenden Arbeit wird ein solches System eines quantenmechanischen,

geometrisch frustrierten Antiferromagneten theoretisch untersucht. Auf einem Dreiecksgitter angeordnete Spins wechselwirken im Rahmen des Heisenberg-Modells für Magnetismus miteinander. Der das System beschreibende Hamiltonian wird so manipuliert, dass ein ungeordneter, die Gittersymmetrien erhaltender Grundzustand gefunden werden kann. Anschließend wird dieser Grundzustand und elementare Anregungen aus diesem Zustand untersucht.

Kapitel 2

Mathematisch-physikalische Grundlagen

Dieses Kapitel gibt einen Überblick über die wesentlichen mathematisch-physikalischen Grundlagen, die zur Beschreibung eines Spin-Liquid Zustands sinnvoll sind. In diesem Abschnitt sollen die Methoden unabhängig von der konkreten Problemstellung eines quantenmechanischen Antiferromagneten vorgeteilt werden, um ein allgemeines Verständnis für diese Rechenmethoden zu erhalten. Auch die genutzte Software für numerische Berechnungen und graphische Darstellung der Ergebnisse, Wolfram Mathematica 10, wird hier in kompakter Form vorgestellt.

2.1 Zweite Quantisierung

Die zweite Quantisierung ist eine effektive Methode, um Wellenfunktionen für Vielteilchensysteme ($N \propto 10^{23}$) aufzustellen und zu manipulieren. Entwickelt wurde diese Methode kurz nach der Einführung der Quantenmechanik in der theoretischen Physik Ende der 1920er Jahre. Federführend in der Entwicklung der zweiten Quantisierung war der britische Physiker Paul Dirac.

Die zweite Quantisierung ist vor allem dann eine sinnvolle Methode, wenn die Zahl der Teilchen in einem System sich verändert (großkanonisches Ensemble) und das direkte Aufstellen einer Wellenfunktion sehr ineffizient ist. Dies ist oft der Fall bei großen Systemen mit identischen Teilchen, wie sie häufig in der Festkörperphysik auftreten.

Die Wellenfunktion eines solchen Systems aus identischen Teilchen muss korrekt (anti-)symmetrisiert werden [2]:

$$\Psi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = \zeta \Psi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N) \quad (2.1)$$

Dabei muss $\zeta = +1$ für Bosonen und $\zeta = -1$ für Fermionen sein. Entwickelt man die Wellenfunktion nun so, dass sie aus den Einteilchenwellenfunktionen zusammengesetzt ist, erhält man folgende Form:

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \frac{1}{\sqrt{N!}} c_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \sum_p \zeta^{\sigma_p} \Phi_{\alpha_1}(x_{p_1}) \dots \Phi_{\alpha_N}(x_{p_N}) \quad (2.2)$$

In dieser Form sind $c_{\alpha_1 \dots \alpha_N}$ die Entwicklungskoeffizienten und σ_p ist eine Funktion, die bei gerader Permutation der Φ $\sigma_p = 1$ ist und bei ungerader Permutation $\sigma_p = -1$ ist. Man bezeichnet diese Form auch einen Determinantenzustand (für Fermionen) bzw. einen Permanentenzustand (für Bosonen). In dieser Form wird auch deutlich, weshalb es eine enormer Rechenaufwand ist, diese Form der Wellenfunktion zu nutzen. Meist kennt man ja die Zustände der einzelnen Teilchen in einem solchen System, will dann aber herausfinden, wie sich das makroskopische System verhält. Dazu müssten dann jeweils die Entwicklungskoeffizienten $c_{\alpha_1 \dots \alpha_N}$ bestimmt werden und deren Anzahl ist $\propto (N!)$.

Statt dieser expliziten Darstellung der Wellenfunktion geht man einen Schritt zurück und schreibt die Wellenfunktion zunächst in abstrakter Form auf, jedoch schon korrekt (anti-)symmetrisiert:

$$|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p \zeta^{\sigma_p} |\alpha_{p(1)}\rangle \dots |\alpha_{p(N)}\rangle \quad (2.3)$$

Hierbei sind $|\alpha_{p(i)}\rangle$ abstrakte Zustandsvektoren (z.B. $\langle x | \alpha_{p(1)}\rangle = \Phi_{\alpha(1)}(x)$). Nun definiert man lineare Erzeugung- und Vernichtungsoperatoren a_β^\dagger und a_β , wobei a_β^\dagger ein Teilchen im Zustand β erzeugt und der dazu adjungierte Operator a_β ein Teilchen im Zustand β annihiliert.

$$a_\beta^\dagger |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = |\beta, \alpha_1 \dots \alpha_N\rangle \quad (2.4)$$

$$a_\beta |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = \sum_{k=1}^N \zeta^{k-1} \langle \beta | \alpha_k \rangle |\alpha_1 \dots (\text{no } \alpha_k) \dots \alpha_N\rangle \quad (2.5)$$

Diese Operatoren dienen unter anderem dazu, jeden Zustand des makroskopischen Systems aus dessen Vakuumzustand durch (mehrfache) Anwendung von a_β^\dagger zu erzeugen und dabei diesen Zustand korrekt (anti-)symmetriert vorliegen zu haben. Dies gelingt, da das ganze (Anti-)Symmetrieproblem in die Kommutatorbeziehung zwischen a_β^\dagger und a_β ausgelagert wurde.

$$[a_\alpha, a_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha, \beta} \quad (2.6)$$

$$\{a_\alpha, a_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha, \beta} \quad (2.7)$$

Hier ist [2.6](#) der charakterisierende Kommutator für bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und [2.7](#) der entsprechende Antikommutator für fermionische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

2.1.1 Besetzungszahldarstellung

Um eine brauchbarere Darstellung für den abstrakten Zustand zu bekommen, ist es oft hilfreich in die Besetzungszahldarstellung zu wechseln. Dabei ist n_{β_i} die Anzahl der Teilchen im Zustand β_i . Die Besetzungszahldarstellung beschreibt den Zustand eines Vielteilchensystems $|\beta_1 \dots \beta_N\rangle$ vollständig. Für Bosonen gibt es keine Beschränkung, wie viele Bosonen in einem quantenmechanisch identischen Zustand sein können ($n_{\beta_i} = \{0, 1, \dots, \infty\}$). In einem System aus Fermionen ist dies wegen des Pauliprinzip nicht möglich ($n_{\beta_i} = \{0, 1\}$). Die Besetzungszahldarstellung sieht wie folgt aus:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} |\beta_1 \dots \beta_1, \beta_2 \dots \beta_2 \dots\rangle \quad (2.8)$$

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_i \frac{1}{\sqrt{n_i!}} (a_i^\dagger)^{n_i} |0\rangle \quad (2.9)$$

In Gleichung 2.9 ist formuliert, wie man einen Zustand eines Vielteilchensystems aus dessen Vakuum ($|0\rangle$) erzeugt. Eine sinnvolle Ergänzung ist der hermitesche Besetzungszahloperator $\hat{n}_i \equiv a_i^\dagger a_i$, da dieser die Anzahl der Teilchen im Zustand β_i ausliest und gleichzeitig mit den zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren folgende Kommutatorrelation erfüllt.

$$[\hat{n}_i, a_i] = -a_i \quad (2.10)$$

$$[\hat{n}_i, a_i^\dagger] = a_i^\dagger \quad (2.11)$$

2.2 Mean-Field Theorie

Eine Mean-Field Theorie (zu deutsch auch oft Molekularfeldtheorie) ist eine Näherungsmethode für Vielteilchensysteme, in denen die einzelnen Teilchen miteinander wechselwirken. Hierbei werden die wechselwirkenden Teilchen als freie Teilchen in einem externen Feld beschrieben. Das externe Feld fasst die Wechselwirkungen der umliegenden Teilchen mit dem zu beschreibenden Teilchen zusammen. Die Vereinfachung entsteht daraus, dass das externe Feld als konstant angenommen wird, also alle Fluktuationen der umliegenden Teilchen vernachlässigt werden. Formal bedeutet dies, dass die Mean-Field Näherung den Zustand mit dem größten Beitrag zur Zustandssumme des Vielteilchensystems auswählt und festsetzt, dadurch kann auch von einer *klassischen Näherung* gesprochen werden. Bezogen auf die Operatoren, die das System beschreiben, versucht man bei einer Mean-Field Näherung, eine komplizierte Operatorenkombination so zu vereinfachen, dass diese lösbar wird, beispielsweise diese zu Linearisieren oder auf eine quadratische Form zu bringen. Durch diese Vereinfachung werden viele quantitative Werte unbrauchbar ungenau, jedoch

lassen sich so oft qualitative Ergebnisse erzielen, die auf keinem anderen Weg erreicht werden können.

Erfolgreich angewendet wurde diese Methode beispielsweise bei Hamiltonians, die das Verhalten von Flüssigkristalle beschreiben oder der möglichen räumlichen Anordnung von Aminosäureseitenketten an eine festgelegte Proteinstruktur.

2.3 Bogoljubow-Transformation

Die Bogoljubow-Transformation wurde 1958 von Nikolai Bogoljubow und John George Valatin gleichzeitig, aber unabhängig voneinander entwickelt. Entwickelt wurde die Bogoljubow-Transformation ursprünglich, um eine Lösung für die Supraleitungstheorie von Bardeen, Cooper und Schrieffer (BCS-Theorie) in homogenen Systemen zu finden. In der modernen Vielteilchenphysik ist diese Transformation eine oft angewendete Operation, um Hamiltonians zu diagonalisieren, und somit stationäre Lösungen der Schrödingergleichungen eines Systems zu bestimmen. Eine weitere Anwendung der Bogoljubow-Transformation sind beispielsweise in der Erklärung des Unruh-Effekt zur Schwarzkörperstrahlung, die ein beschleunigender Beobachter messen kann, ein stationärer Beobachter jedoch nicht, zu finden.

Die Transformation ist ein Isomorphismus, der die (Anti-) Kommutatorrelation der Algebra erhält. Dies kann je nach System entweder eine fermionische Algebra oder eine bosonische Algebra sein. Im bosonischen Fall gilt für die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{b}^\dagger und \hat{b} der Kommutator $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$. Dies muss auch für die neuen bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{\beta}^\dagger$ und $\hat{\beta}$ gelten, also $[\hat{\beta}, \hat{\beta}^\dagger] = 1$ sein.

Nimmt man nun an, dass $\hat{\beta}$ eine Linearkombination aus \hat{b} und \hat{b}^\dagger ist und zusätzlich $\hat{\beta}^\dagger$ der adjungierte Operator zu $\hat{\beta}$ ist,

$$\hat{\beta} = u\hat{b} + v\hat{b}^\dagger \quad (2.12)$$

$$\hat{\beta}^\dagger = u^*\hat{b}^\dagger + v^*\hat{b} \quad (2.13)$$

dann gilt für u und v ($\in \mathbb{C}$) die Bedingung

$$\|u\|^2 - \|v\|^2 = 1. \quad (2.14)$$

Die Form der Bedingung an u und v weist auf die trigonometrischen Hyperbolfunktionen als Parametrisierung hin [3]. Versehen mit einer komplexen Phase bilden sie die allgemeine Parametrisierung für u und v .

$$u = e^{i\alpha_1} \cosh(r) \quad (2.15)$$

$$v = e^{i\alpha_2} \sinh(r) \quad (2.16)$$

2.4 Numerische Berechnungen/ Mathematica

Für numerische Berechnungen und die graphische Darstellung der Ergebnisse wurde die Software Wolfram Mathematica [4] eingesetzt. Die erste Version von Mathematica kam 1988 auf den Markt und wird seitdem von der Firma Wolfram Research, Inc. weiterentwickelt. Mathematica ist ein Softwarepaket, das ein Algebrasystem enthält, womit symbolische Gleichungen verarbeitet werden können. Mathematica bietet auch die Möglichkeit viele numerische Methoden einzusetzen, um nicht-analytische Funktionen zu berechnen. Zudem ist ein 2D und 3D Visualisierungstool enthalten, mit dem Ergebnisse grafisch dargestellt werden können. Die Gleichungen und Befehle müssen in einer eigens für Mathematica entwickelten Programmiersprache formuliert werden.

Von spezieller Bedeutung ist im Folgenden der Befehl „NIntegrate“. Dieser berechnet das Integral einer Funktion, die keine analytische Stammfunktion besitzt, indem die Stammfunktion numerisch angenähert wird. Der Befehl NIntegrate untersucht zunächst die gegebene Funktion auf Pole am Rand und in der zu integrierenden Domäne. Ist die Funktion „glatt“ genug, hat Mathematica mehrere numerische Integrationsmethoden zur Verfügung, um die Näherung durchzuführen [5]. Man kann manuell einstellen, an wie vielen einzelnen Punkten angenähert werden soll und somit die Zeit beschränken, die die Berechnung benötigt oder ein Genauigkeitsziel setzen, wie viele Stellen man genau berechnet haben will. Je nachdem mit welcher Zielsetzung man die Berechnung startet und ja nach dem, wie die zu integrierende Funktion aussieht, wählt Mathematica die geeignete möglichst effizient arbeitende Methode aus, es ist aber auch möglich alle Einstellungen manuell vorzunehmen. Mathematica hat viele verschiedene Methoden zur Auswahl. Eine Methode ist, dass Mathematica versucht eine geeignete analytische Funktion zu finden, die die Ursprungsfunktion auf der Integrationsdomäne genügend präzise annähert (GlobalAdaptive). Oder Mathematica sucht mehrere Funktionen, die die Ursprungsfunktion jeweils in Teilen gut annähert (LocalAdaptive). Eine weitere Näherungsmethode ist der Variablenwechsel mit Hilfe der Hyperbolfunktionen. Auch dabei wird die Ursprungsfunktion abschnittsweise approximiert, diese Methode hat den Vorteil, dass der transformierte Integrand doppelt exponentiell nach außen abfällt, weshalb die Methode auch DoubleExponential heißt. Zudem gibt es Methoden, die die Integrationsdomäne in regelmäßigen Abständen abtastet oder die Punkte zur Integration zufällig auswählt (Monte-Carlo Integration).

Kapitel 3

Systembeschreibung

In diesem Kapitel soll das Problem eines quantenmechanischen Antiferromagneten auf einem zweidimensionalen Dreiecksgitter näher betrachtet werden. Als Geometrie liegt ein isotropes, zweidimensionales Dreiecksgitter aus gleichseitigen Dreiecken zu Grunde. Die Orte der Spins sind jeweils an den Ecken der Dreiecke. Ein solches Gitter ist in Abb. 3.1 dargestellt. Der Betrag des Spins \mathbf{S} kann in dieser theoretischen Betrachtung zunächst als freier Parameter belassen werden. In vielen realen Systemen ist der Betrag des Spins häufig $S = \frac{1}{2}$, da an den Gitterpunkten beispielsweise Atome sitzen und das Verhalten der Valenzelektronen dieser Atome in dem makroskopischen Festkörper beschrieben werden soll. Das Dreiecksgitter als solches ist im hier betrachteten antiferromagnetischen Fall geometrisch frustriert, was bedeutet, dass die Spins nicht so angeordnet werden können, dass ein eindeutiger Grundzustand erreicht werden kann. Stattdessen ist der Grundzustand, den das Spinsystem auf einem Dreiecksgitter annehmen kann, energetisch angehoben und stark entartet. Das bedeutet, dass der makroskopische Grundzustand durch viele verschiedene mikroskopische Zustände realisiert werden kann. Zudem soll der Grundzustand alle Gittersymmetrien des Dreiecksgitters erhalten und auch unter $SU(2)$ -Transformationen des Spins invariant sein. Einen solcher, sogenannter Spin-Liquid Grundzustand wird im folgenden gesucht.

3.1 Heisenberg-Hamiltonian

Der Hamiltonian der die Wechselwirkung in dem System der Spins auf einem zweidimensionalen Dreiecksgitter beschreibt, ist der Heisenberg-Hamiltonian. Der Heisenberg-Hamiltonian liegt den gängigsten Modellen zur Beschreibung von Magnetismus in Ferromagneten und Isolatoren in der theoretischen Physik zu Grunde. Die

allgemeine Form des Heisenberg-Hamiltonians ist diese [7]:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.1)$$

Dabei ist \mathcal{J}_{ij} die Kopplungsstärke der Wechselwirkung zwischen den Spins am Ort i und j . \mathcal{J}_{ij} bestimmt auch welche Art von Wechselwirkung vorliegt. Ist $\mathcal{J}_{ij} < 0$ wird die Wechselwirkung als ferromagnetisch bezeichnet, da die Energie minimiert wird, wenn sich die jeweiligen Spins parallel ausrichten. Für den Fall $\mathcal{J}_{ij} > 0$ wird die Wechselwirkung als anti-ferromagnetisch bezeichnet. Es ist für die Spins dann am günstigsten sich antiparallel zueinander zu orientieren. Einige einleitende Vereinfachungen des Heisenbergmodells sind sinnvoll und können gut begründet werden. So kann nur noch die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn betrachtet werden, da diese den wichtigsten Beitrag zum Hamiltonian liefert. Die elementaren Wechselwirkungen, die die Kopplungsstärke bestimmen, sind in Stärke allesamt antiproportional zum Abstand, wie zum Beispiel die Abstoßung durch das Pauliprinzip (Potenzial $\Phi \propto \frac{1}{r^{12}}$). Daher wird im Folgenden nur noch über benachbarte Gitterplätze $\langle i,j \rangle$ summiert. Da das System ein isotropes Gitter aus gleichseitigen Dreiecken ist, kann die Kopplungsstärke der Wechselwirkung \mathcal{J}_{ij} zu einer einzigen Konstante \mathcal{J} vereinfacht werden [8]. In dem hier betrachteten Fall ist $\mathcal{J} > 0$, da ein Antiferromagnet untersucht werden soll.

$$\mathcal{H} = \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.2)$$

3.2 Schwinger-Boson-Repräsentation

Die Schwinger Boson Repräsentation des Heisenberg-Hamiltonians macht sich die Vorteile der zweiten Quantisierung (vergleiche Abschnitt 2.1) zunutze. So kann das innere Produkt der Spinoperatoren im Heisenberg-Hamiltonian durch die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren dargestellt werden[8]:

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \frac{1}{4} \sum_a (\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \sigma_{a,\sigma'}^\sigma \hat{b}_i^{\sigma'}) \cdot (\hat{b}_{j,\tau}^\dagger \sigma_{a,\tau'}^\tau \hat{b}_j^{\tau'}) \quad , \quad a = 1, 2, 3 \quad (3.3)$$

In dieser Gleichung wird implizit über die Spinindizes σ, σ', τ und τ' summiert (einsteinsche Summenkonvention). Die Spinindizes können die Werte \uparrow und \downarrow annehmen. Die σ_a sind die Paulimatrizen:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

In dieser Formulierung könnten sich nun jedoch noch beliebig viele Spins an einem Ort i befinden. Daher muss ein Constraint aufgestellt werden, dass nur ein Spin des Betrags S an dem Gitterplatz i vorhanden ist:

$$\sum_{\sigma} \hat{b}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{i,\sigma} = \kappa \quad , \quad \kappa = 2S \quad (3.5)$$

Wichtig zu bemerken ist hier, dass Betrag von S nicht eingeschränkt ist. Durch die Bedingung $\kappa = 2S$ ist sichergestellt, dass die Operatoren \hat{b}^{\dagger} und \hat{b} für jeden halbzahligen Betrag S des Spin bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sind.

3.3 Mean-Field-Näherung

Der Heisenberg-Hamiltonian in einer Schwinger-Boson Repräsentation ist leider noch nicht direkt diagonalisierbar beziehungsweise lösbar, da der Hamiltonian noch quartisch in den Operatoren \hat{b}^{\dagger} und \hat{b} ist. Daher wird nun mit Hilfe einer Mean-Field-Theorie approximiert. Jedoch verwendet man keine klassische Mean-Field-Theorie über die Spinoperatoren \mathbf{S} , da diese keine sinnvollen Ergebnisse liefern würde. Die hier gesuchten Spin-Liquid Grundzustände sind eben gerade dadurch charakterisiert, dass der Erwartungswert $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$ ist. Für einen solchen Erwartungswert ist ein Mean-Field-Ansatz ungeeignet. Hier versucht man also, den Hamiltonian in solche Operatoren zu überführen, dass ein Mean-Field-Ansatz Sinn macht. Dies sind die hier definierten Operatoren \hat{A}_{ij} und \hat{B}_{ij} :

$$\hat{A}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{b}_{i,\sigma} \epsilon_{\sigma, \sigma'} \hat{b}_{j, \sigma'} \quad , \quad \epsilon_{\sigma, \sigma'} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

$$\hat{B}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \hat{b}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{j,\sigma} \quad (3.7)$$

Dabei ist $\epsilon_{\sigma, \sigma'}$ der angegebene antisymmetrische Tensor. Nun ist noch zu zeigen, dass die Operatoren \hat{A}_{ij} und \hat{B}_{ij} geschickt kombiniert tatsächlich das innere Produkt der Spinoperatoren sind, wie in Paper [8] Gleichung (4) angegeben. Hier : ... : ist eine Notation für normal ordering, was bedeutet, dass alle Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die dazwischen stehen geordnet werden und zwar so, dass alle Erzeugungsoperatoren nach links und alle Vernichtungsoperatoren nach rechts geordnet werden, ohne beim Vertauschen auf die Kommutationsrelationen zu achten.

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j =: \hat{B}_{ij}^{\dagger} \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^{\dagger} \hat{A}_{ij} \quad (3.8)$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= \frac{1}{4} ((\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \sigma_{1,\sigma'}^\sigma \hat{b}_i^{\sigma'}) \cdot (\hat{b}_{j,\tau}^\dagger \sigma_{1,\tau'}^\tau \hat{b}_j^{\tau'}) + (\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \sigma_{2,\sigma'}^\sigma \hat{b}_i^{\sigma'}) \cdot (\hat{b}_{j,\tau}^\dagger \sigma_{2,\tau'}^\tau \hat{b}_j^{\tau'})) \\
&\quad + (\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \sigma_{3,\sigma'}^\sigma \hat{b}_i^{\sigma'}) \cdot (\hat{b}_{j,\tau}^\dagger \sigma_{3,\tau'}^\tau \hat{b}_j^{\tau'}) \\
&= \frac{1}{4} ((\hat{b}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i,\uparrow} - \hat{b}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i,\downarrow}) \cdot (\hat{b}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{j,\uparrow} - \hat{b}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{j,\downarrow})) \\
&\quad + (i\hat{b}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i,\downarrow} - i\hat{b}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i,\uparrow}) \cdot (i\hat{b}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{j,\downarrow} - i\hat{b}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{j,\uparrow}) + (\hat{b}_{i,\downarrow} + \hat{b}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i,\uparrow}) \cdot (\hat{b}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{j,\downarrow} + \hat{b}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{j,\uparrow})) \\
&= \frac{1}{4} (\hat{b}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i,\uparrow} \hat{b}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{j,\uparrow} - \hat{b}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i,\uparrow} \hat{b}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{j,\downarrow} - \hat{b}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i,\downarrow} \hat{b}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{j,\uparrow} + \hat{b}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i,\downarrow} \hat{b}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{j,\downarrow}) + (\dots) + (\dots) \\
&= \frac{1}{4} (:(\hat{b}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i,\uparrow} + \hat{b}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i,\downarrow}) \cdot (\hat{b}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{j,\uparrow} + \hat{b}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{j,\downarrow})) : - ((\hat{b}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{i,\downarrow}^\dagger - \hat{b}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{i,\uparrow}^\dagger) \cdot (\hat{b}_{i,\uparrow} \hat{b}_{j,\downarrow} - \hat{b}_{i,\downarrow} \hat{b}_{j,\uparrow}))) \\
&= \frac{1}{4} (:(\hat{b}_{j,\sigma}^\dagger \hat{b}_i^\sigma) \cdot (\hat{b}_{i,\sigma'}^\dagger \hat{b}_j^{\sigma'}) : - (\hat{b}_{j,\alpha}^\dagger \epsilon_\beta^\alpha \hat{b}_i^{\dagger,\beta}) \cdot (\hat{b}_{i,\gamma} \epsilon_\delta^\gamma \hat{b}_j^\delta)) \\
&= : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \quad \square \tag{3.9}
\end{aligned}$$

Hier wurde ausgenutzt, dass Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren an unterschiedlichen Gitterplätzen miteinander kommutieren ($[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0$).

Nun kann ein Mean-Field Ansatz für die Operatoren \hat{A}_{ij} und \hat{B}_{ij} gemacht werden da im allgemeinen Fall für Antiferromagneten die Erwartungswerte $\langle \hat{A}_{ij} \rangle$ und $\langle \hat{B}_{ij} \rangle$ ungleich 0 sind. Wie in Abschnitt 2.2 beschrieben, approximiert man die Felder \hat{A}_{ij} , \hat{A}_{ij}^\dagger , \hat{B}_{ij} und \hat{B}_{ij}^\dagger durch ihren statistisch mittleren Wert, den Erwartungswert und lässt dabei aber kleine Fluktuationen um diesen Wert zu

$$\hat{A}_{ij}^{(\dagger)} \approx \langle \hat{A}_{ij}^{(\dagger)} \rangle + \delta \hat{A}_{ij}^{(\dagger)} \quad ; \quad \hat{B}_{ij}^{(\dagger)} \approx \langle \hat{B}_{ij}^{(\dagger)} \rangle + \delta \hat{B}_{ij}^{(\dagger)} \tag{3.10}$$

dann kann der Hamiltonian wie folgt approximiert werden:

$$\mathcal{H} = \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \tag{3.11}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{MF} &= \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} (\langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle + \delta \hat{B}_{ij}^\dagger) \cdot (\langle \hat{B}_{ij} \rangle + \delta \hat{B}_{ij}) - (\langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle + \delta \hat{A}_{ij}^\dagger) \cdot (\langle \hat{A}_{ij} \rangle + \delta \hat{A}_{ij}) \\
&= \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle \langle \hat{B}_{ij} \rangle - \langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle \langle \hat{A}_{ij} \rangle + \langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle \delta \hat{B}_{ij} + \langle \hat{B}_{ij} \rangle \delta \hat{B}_{ij}^\dagger + \mathcal{O}((\delta \hat{B}_{ij})^2) \\
&\quad - \langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle \delta \hat{A}_{ij} - \langle \hat{A}_{ij} \rangle \delta \hat{A}_{ij}^\dagger - \mathcal{O}((\delta \hat{A}_{ij})^2) \tag{3.12}
\end{aligned}$$

Da die Fluktuationen um den Erwartungswert der Felder $\delta \hat{A}_{ij}$ und $\delta \hat{B}_{ij}$ (und die jeweils dazu hermitesch Konjugierten) klein sind, können Terme der Ordnung $\mathcal{O}((\delta \hat{A}_{ij})^2)$

und $\mathcal{O}((\delta\hat{B}_{ij})^2)$ vernachlässigt werden. Resubstituiert man dann noch die Terme $\delta\hat{A}_{ij}$ und $\delta\hat{B}_{ij}$ durch die ursprüngliche Approximation in 3.10, erhält man den lös-
baren Mean-Hamiltonian, analog zu Paper [8] Gleichung (7):

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{MF} &= \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle \langle \hat{B}_{ij} \rangle - \langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle \langle \hat{A}_{ij} \rangle + \langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle (\hat{B}_{ij} - \langle \hat{B}_{ij} \rangle) \\ &\quad - \langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle (\hat{A}_{ij} - \langle \hat{A}_{ij} \rangle) + h.c. \\ &= \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle \langle \hat{A}_{ij} \rangle - \langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle \langle \hat{B}_{ij} \rangle + \mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle \hat{B}_{ij} - \langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle \hat{A}_{ij} + h.c. \quad (3.13)\end{aligned}$$

Der nun vorhandene Mean-Field-Hamiltonian bildet jedoch noch nicht vollständig ab, wie man zu einem Spin-Liquid Grundzustand kommt, der keine Gittersymmetrie bricht. Er sollte zwar prinzipiell lösbar sein, da er quadratisch in den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{b}^\dagger und \hat{b} ist, erfüllt aber noch nicht die Bedingung, dass der Spin-Liquid Grundzustand des Systems keine Symmetrie des Gitters brechen soll. Schaut man sich die Operatoren \hat{A}_{ij} und \hat{B}_{ij} noch einmal genauer an, stellt man fest, dass das Operatorenpaar \hat{B}_{ij} und \hat{B}_{ij}^\dagger magnetische Ordnung in dem makroskopischen Körper erzeugt. Jedoch brechen magnetisch geordnete Systeme Gittersymmetrien, zum einen die SU(2)-Symmetrie, dass das System symmetrisch sein soll unter dem Flip eines jeden einzelnen Spins auf dem Gitter. Auch die Translationsymmetrie bei Verschiebung um eine ungerade Anzahl von Gittervektoren in Gittervektorrichtung ist bei magnetisch geordneten Systemen gebrochen. Daher muss der Beitrag von den Operatoren \hat{B}_{ij} und \hat{B}_{ij}^\dagger bei einem Spin-Liquid Grundzustand verschwinden. Das heißt, dass $\langle \hat{B}_{ij} \rangle = \langle \hat{B}_{ij}^\dagger \rangle = 0$ sein muss. Das Operatorenpaar \hat{A}_{ij} und \hat{A}_{ij}^\dagger hingegen, erzeugt Singlettkonfigurationen der Spins an den Orten i und j. Sind die Spins in Singlettkonfigurationen, brechen sie keine der Gittersymmetrien. Der Erwartungswert $\langle \hat{A}_{ij} \rangle$ ist dann eine sogenannte Singlettamplitude und hat eine geometrische Richtung (vergleiche Abbildung 3.1).

Weiterhin ist aber der Constraint (3.5) an das System zu beachten, dass nur je ein Spin an einem Gitterpunkt vorhanden sein soll. Da die Energie, sprich der Hamiltonian für den Grundzustand minimiert werden soll, kann der Constraint mit einem Lagrangemultiplikator (λ) versehen an den Meanfield-Hamiltonian angehängt werden. Zudem werden im Folgenden konstante Terme wie $(\langle \hat{A}_{ij}^\dagger \rangle \langle \hat{A}_{ij} \rangle)$ vernachlässigt. Diese Terme bilden einen konstanten Energieoffset, da der Nullpunkt der Energie aber hier frei wählbar ist, kann dieser Offset vernachlässigt werden. Daraus ergibt sich der effektive Mean-Field-Hamiltonian, der im Weiteren genauer untersucht wer-

den soll:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{MF,eff} &= -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \hat{A}_{ij} \rangle \hat{A}_{ij}^\dagger + \langle \hat{A}_{ij} \rangle^* \hat{A}_{ij} - \lambda \sum_i \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_i^\sigma \\ &= -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \hat{A}_{ij} \rangle \hat{b}_{j,\alpha}^\dagger \epsilon_\beta^\alpha \hat{b}_i^{\dagger,\beta} + \langle \hat{A}_{ij} \rangle^* \hat{b}_{i,\gamma} \epsilon_\delta^\gamma \hat{b}_j^\delta - \lambda \sum_i \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_i^\sigma\end{aligned}\quad (3.14)$$

Nun wendet man jeweils eine Fouriertransformation auf die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren an, um das Problem im Impulsraum betrachten zu können, da sich dort weitere Vereinfachungen ergeben.

$$\hat{b}_i = \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \hat{b}_q ; \quad \hat{b}_j = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \hat{b}_k \quad (3.15)$$

Damit sieht der Mean-Field Hamiltonian im Impulsraum zunächst so aus:

$$\tilde{\mathcal{H}}_{MF,eff} = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \hat{A}_{ij} \rangle \left(\sum_{\vec{k},\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \hat{b}_{k,\alpha}^\dagger \epsilon_\beta^\alpha \hat{b}_q^{\dagger,\beta} \right) + \langle \hat{A}_{ij} \rangle^* \left(\sum_{\vec{k},\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \hat{b}_{q,\gamma} \epsilon_\delta^\gamma \hat{b}_k^\delta \right) \quad (3.16)$$

$$- \lambda \sum_i \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \hat{b}_{q,\sigma}^\dagger \hat{b}_q^\sigma \quad (3.17)$$

Anhand der Abbildung 3.1 kann man die Orte \vec{r}_j der sechs nächsten Nachbarn des i -ten Gitterpunktes explizit und in Abhängigkeit vom Ort \vec{r}_i umformulieren. Man substituiert also \vec{r}_j durch $\vec{r}_i \pm \vec{e}_{1,2,3}$. Der Einfachheit halber wird der Betrag von $\vec{e}_{1,2,3}$, das heißt die Gitterkonstante a des Dreiecksgitters gleich 1 gesetzt. Durch diesen Schritt entfällt die Summe über j .

Zudem antizipiert man, dass $\langle \hat{A}_{ij} \rangle$ unabhängig der Orte i und j ist und $\langle \hat{A}_{ij} \rangle \in \mathbb{R}$ (vergleiche Sachdev [9]). Da die gesamte Problemstellung isotrop ist kann $\langle \hat{A}_{ij} \rangle$ desweiteren zu $\pm A$ vereinfacht werden, wobei das relative Vorzeichen von der Orientierung der jeweiligen Singlettamplitude relativ zum dazugehörigen Gittervektor $\vec{e}_{1,2,3}$ bestimmt wird. Somit formt man den Mean-Field-Hamiltonian um zu:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}_{MF,eff} &= -\mathcal{J} A \sum_i \sum_{\vec{k},\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \hat{b}_{q,\gamma} \epsilon_\delta^\gamma \hat{b}_k^\delta \\ &\quad (e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i+\vec{e}_1)} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i+\vec{e}_2)} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i+\vec{e}_3)} - e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i-\vec{e}_1)} - e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i-\vec{e}_2)} - e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i-\vec{e}_3)}) \\ &\quad + h.c. - \lambda \sum_{\vec{q}} \hat{b}_{q,\sigma}^\dagger \hat{b}_q^\sigma\end{aligned}\quad (3.18)$$

Nun kann man $\vec{q}\cdot\vec{e}_a \equiv q_a$, $a = 1, 2, 3$ für eine bessere Übersichtlichkeit definieren

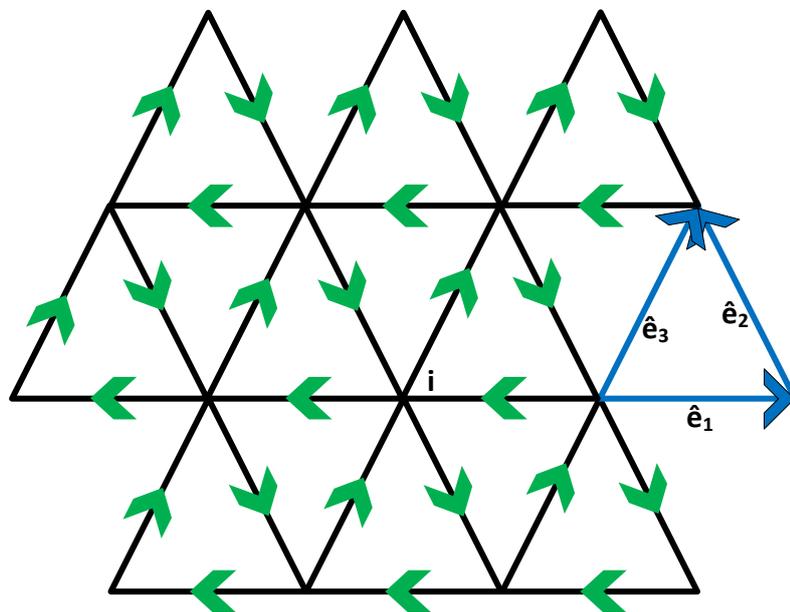


Abbildung 3.1: Isotropes Dreiecksgitter mit Spins jeweils an den Knotenpunkten der Gitterlinien; grüne Pfeile geben die Orientierung von $\langle \hat{A}_{ij} \rangle$ an; rechts in blau: Orientierung der Gittervektoren $\vec{e}_{1,2,3}$, jeweils mit Betrag a (Gitterkonstante)

und die Terme umsortieren und man erhält

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}_{MF,eff} = & -\mathcal{J}A \sum_i \sum_{\vec{k}, \vec{q}} e^{i(\vec{q}+\vec{k}) \cdot \vec{r}_i} \hat{b}_{q,\gamma} \epsilon_\delta^\gamma \hat{b}_k^\delta (e^{iq_1} + e^{iq_2} + e^{iq_3} - e^{-iq_1} - e^{-iq_2} - e^{-iq_3}) \\ & + h.c. - \lambda \sum_{\vec{q}} \hat{b}_{q,\sigma}^\dagger \hat{b}_q^\sigma\end{aligned}\quad (3.19)$$

Da in dieser Form nur noch der Term $e^{i(\vec{q}+\vec{k}) \cdot \vec{r}_i}$ vom Ort i abhängt, kann man die Summe über i ausführen und erhält eine Deltafunktion $\delta_{\vec{q}+\vec{k},0}$, was gleichbedeutend ist mit $\vec{k} = -\vec{q}$. Diese Vereinfachung erlaubt es, die Terme, die abhängig von q_a sind, zu Sinusfunktionen zusammenzufassen.

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}_{MF,eff} = & -\mathcal{J}A \sum_{\vec{q}} \hat{b}_{q,\gamma} \epsilon_\delta^\gamma \hat{b}_{-q}^\delta (2i)(\sin(q_1) + \sin(q_2) + \sin(q_3)) \\ & - \mathcal{J}A \sum_{\vec{q}} \hat{b}_{-q,\alpha}^\dagger \epsilon_\beta^\alpha \hat{b}_q^{\dagger,\beta} (-2i)(\sin(q_1) + \sin(q_2) + \sin(q_3)) - \lambda \sum_{\vec{q}} \hat{b}_{q,\sigma}^\dagger \hat{b}_q^\sigma\end{aligned}\quad (3.20)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{MF,eff} = & -\mathcal{J}A \sum_{\vec{q}} (\hat{b}_{q,\uparrow} \hat{b}_{-q,\downarrow} - \hat{b}_{q,\downarrow} \hat{b}_{-q,\uparrow}) 2i (\sum_a \sin(q_a)) \\ & - \mathcal{J}A \sum_{\vec{q}} (\hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger - \hat{b}_{-q,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{q,\downarrow}^\dagger) (-2i) (\sum_a \sin(q_a)) \\ & - \lambda \sum_{\vec{q}} \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{q,\uparrow} + \hat{b}_{q,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{q,\downarrow}\end{aligned}\quad (3.21)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{MF,eff} = & -\mathcal{J}A \sum_{\vec{q}} (\hat{b}_{q,\uparrow} \hat{b}_{-q,\downarrow} + \hat{b}_{-q,\downarrow} \hat{b}_{q,\uparrow}) 2i (\sum_a \sin(q_a)) \\ & - \mathcal{J}A \sum_{\vec{q}} (\hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger + \hat{b}_{-q,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{q,\downarrow}^\dagger) (-2i) (\sum_a \sin(q_a)) \\ & - \lambda \sum_{\vec{q}} \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{q,\uparrow} + \hat{b}_{q,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{q,\downarrow}\end{aligned}\quad (3.22)$$

Bei den beiden Umformungen in Gleichung 3.21 und 3.22 hat man in einigen Termen die Variable von $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$ und $-\vec{q} \rightarrow \vec{q}$ verändert, dadurch kann man den Mean-Field Hamiltonian auf die folgende, kompakte Form bringen. Zugunsten einer kompakteren Form wurde $\gamma \equiv 4\mathcal{J}A(\sum_a \sin(q_a))$ definiert.

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}_{MF,eff} = & - \sum_{\vec{q}} \begin{pmatrix} \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger & \hat{b}_{-q,\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 4i\mathcal{J}A(\sum_a \sin(q_a)) \\ -4i\mathcal{J}A(\sum_a \sin(q_a)) & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_{q,\uparrow} \\ \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \\ = & - \sum_{\vec{q}} \Psi_q^\dagger \begin{pmatrix} \lambda & i\gamma \\ -i\gamma & \lambda \end{pmatrix} \Psi_q = - \sum_{\vec{q}} \Psi_q^\dagger D \Psi_q\end{aligned}\quad (3.23)$$

Die hier eingeführten Operatoren Ψ_q^\dagger und Ψ_q sind sogenannte Nambu-Spinoren, die es erlauben, den Mean-Field Hamiltonian als eine einfache Bilinearform darzustellen [6]. Von dieser Form ausgehend kann der Hamiltonian mit einer linearen, kanonischen Transformation diagonalisiert werden.

3.4 Bogoljubow-Transformation

Wie im vorangegangenen Abschnitt in Gleichung 3.23 sichtbar ist, ist der Hamiltonian noch nicht diagonal bezüglich der Operatoren Ψ_q und Ψ_q^\dagger . Dieses Problem löst man, indem man die Operatoren einer Bogoljubow-Transformation unterzieht (vergleiche Abschnitt 2.3). In diesem Abschnitt soll explizit gezeigt werden, dass die Bogoljubow Transformation der geeignete lineare, kanonische Isomorphismus ist, um den Hamiltonian zu diagonalisieren. Es sei die lineare Transformation gegeben:

$$\Psi_q = \mathbf{M} \tilde{\Psi}_q \quad (3.24)$$

Damit $\tilde{\Psi}_q$ immernoch eine sinnvolle bosonische Algebra ist und der Hamiltonian dadurch auch tatsächlich diagonalisiert wird, müssen die beiden Bedingungen 3.25 und 3.26 erfüllt sein (vergleiche Sachdev [9] Gleichung (2.7) und (2.11)). Dabei ist σ_3 die Paulimatrix wie in Abschnitt 3.2 definiert.

$$[\Psi_q, \Psi_q^\dagger]_{ij} = [\tilde{\Psi}_q, \tilde{\Psi}_q^\dagger]_{ij} = (\sigma_3)_{ij} \quad (3.25)$$

$$\mathbf{M}^\dagger \sigma_3 \mathbf{M} = \sigma_3 \quad (3.26)$$

Nun macht man einen Ansatz für die Form von \mathbf{M} und zeigt anschließend, dass dieser Ansatz richtig ist:

$$\Psi_q = \mathbf{M} \tilde{\Psi}_q \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \hat{b}_{q,\uparrow} \\ \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_q & -V_q^* \\ V_q & U_q^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{q,\uparrow} \\ \hat{\gamma}_{-q,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

Damit ist auch $\tilde{\Psi}_q$ und $\tilde{\Psi}_q^\dagger$ gegeben:

$$\tilde{\Psi}_q = \mathbf{M}^{-1} \Psi_q = \frac{1}{U^2 + V^2} \begin{pmatrix} U_q^* & V_q^* \\ -V_q & U_q \end{pmatrix} \Psi_q \quad (3.28)$$

$$\tilde{\Psi}_q^\dagger = \Psi_q^\dagger (\mathbf{M}^\dagger)^{-1} = \Psi_q^\dagger \frac{1}{U^2 + V^2} \begin{pmatrix} U_q & -V_q^* \\ V_q & U_q^* \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

Die Bedingung 3.25 vereinfacht sich zunächst, da $[\hat{\gamma}_q, \hat{\gamma}_{-q}] = 0$ ist. Man muss anschließend noch zeigen, dass $[\hat{\gamma}_{q,\uparrow}, \hat{\gamma}_{q,\uparrow}^\dagger] = 1$ und $[\hat{\gamma}_{-q,\downarrow}^\dagger, \hat{\gamma}_{-q,\downarrow}] = -1$ ist:

$$[\tilde{\Psi}_q, \tilde{\Psi}_q^\dagger] = \begin{pmatrix} [\hat{\gamma}_{q,\uparrow}, \hat{\gamma}_{q,\uparrow}^\dagger] & [\hat{\gamma}_{q,\uparrow}, \hat{\gamma}_{-q,\downarrow}] \\ [\hat{\gamma}_{-q,\downarrow}^\dagger, \hat{\gamma}_{q,\uparrow}^\dagger] & [\hat{\gamma}_{-q,\downarrow}^\dagger, \hat{\gamma}_{-q,\downarrow}] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\hat{\gamma}_{q,\uparrow}, \hat{\gamma}_{q,\uparrow}^\dagger] & 0 \\ 0 & [\hat{\gamma}_{-q,\downarrow}^\dagger, \hat{\gamma}_{-q,\downarrow}] \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

Nun nutzt man die Kommutatorrelationen für \hat{b} und \hat{b}^\dagger und findet heraus, dass die Bedingung 3.25 für alle U und V erfüllt ist.

$$\begin{aligned} [\hat{\gamma}_{q,\uparrow}, \hat{\gamma}_{q,\uparrow}^\dagger] &= \frac{1}{U^2 + V^2} ((U_q^* \hat{b}_{q,\uparrow} + V_q^* \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger)(U_q \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger + V_q \hat{b}_{-q,\downarrow}) \\ &\quad - (U_q \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger + V_q \hat{b}_{-q,\downarrow})(U_q^* \hat{b}_{q,\uparrow} + V_q^* \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger)) \\ &= \frac{1}{U^2 + V^2} ((U_q U_q^* \hat{b}_{q,\uparrow} \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger + U_q^* V_q \hat{b}_{q,\uparrow} \hat{b}_{-q,\downarrow} + U_q V_q^* \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger + V_q V_q^* \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{-q,\downarrow}) \\ &\quad - (U_q U_q^* \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{q,\uparrow} + U_q^* V_q \hat{b}_{q,\uparrow} \hat{b}_{-q,\downarrow} + U_q V_q^* \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger + V_q V_q^* \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{-q,\downarrow})) \\ &= \frac{1}{U^2 + V^2} (U^2 (\hat{b}_{q,\uparrow} \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger - \hat{b}_{q,\uparrow}^\dagger \hat{b}_{q,\uparrow}) + V^2 (\hat{b}_{-q,\downarrow} \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger - \hat{b}_{-q,\downarrow}^\dagger \hat{b}_{-q,\downarrow})) \\ &= \frac{U^2 + V^2}{U^2 + V^2} = 1 \quad \square \end{aligned} \quad (3.31)$$

Für den Kommutator $[\hat{\gamma}_{-q,\downarrow}^\dagger, \hat{\gamma}_{-q,\downarrow}]$ funktioniert der Nachweis ganz analog. Die Bogoljubow-Transformation muss zusätzlich auch die zweite Bedingung (3.26) erfüllen.

$$\begin{pmatrix} U_q^* & V_q^* \\ -V_{-q} & U_{-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_q & -V_{-q}^* \\ -V_q & -U_{-q}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_q^* U_q - V_q^* V_q & -(U_q^* V_{-q}^* + U_{-q}^* V_q^*) \\ -(U_q V_{-q} + U_{-q} V_q) & V_{-q}^* V_{-q} - U_{-q}^* U_{-q} \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\longrightarrow U_q^* U_q - V_q^* V_q = U_{-q}^* U_{-q} - V_{-q}^* V_{-q} \stackrel{!}{=} 1 \quad (3.32)$$

$$\longrightarrow U_q V_{-q} + U_{-q} V_q = U_q^* V_{-q}^* + U_{-q}^* V_q^* \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.33)$$

Die Gleichung 3.32 gibt den Hinweis, dass die geeigneten Funktionen zur Parametrisierung der Bogoljubow-Transformation die trigonometrischen Hyperbolfunktionen sind.

$$U_q = U_{-q}^* = \cosh(\Theta_q) \quad (3.34)$$

$$V_q = V_{-q}^* = \sinh(\Theta_q) \quad (3.35)$$

Kapitel 4

Analyse der Ergebnisse

Im vorangegangenen Kapitel hat man alle Umformungen gemacht, um den Hamiltonian auf Diagonalform zu bringen. Die nach Abschnitt 3.4 parametrisierte Bogoljubow-Transformation diagonalisiert den Hamiltonian (analog zu Sachdev [9] Gleichung (2.12)). Zu erkennen ist dies daran, dass die Offdiagonalelemente von $\sigma_3 \tilde{\mathbf{D}}$ identisch sind. Drückt man diese beiden Matrixelemente auf 0, hat die Matrix $\sigma_3 \tilde{\mathbf{D}}$ Diagonalform.

$$\begin{aligned} M^{-1} \sigma_3 \mathbf{D} M &= \sigma_3 \tilde{\mathbf{D}} \\ &= \frac{1}{\cosh(2\Theta_q)} \begin{pmatrix} \lambda + i\gamma \sinh(2\Theta_q) & i\gamma - \lambda \sinh(2\Theta_q) \\ i\gamma - \lambda \sinh(2\Theta_q) & -(\lambda + i\gamma \sinh(2\Theta_q)) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Die Bedingung, unter der $\sigma_3 \tilde{\mathbf{D}}$ diagonal ist ist also $i\gamma - \lambda \sinh(2\Theta_q) \stackrel{!}{=} 0$, Damit gilt für den bislang freien Parameter Θ_q

$$\Theta_q = \frac{-i}{2} \arcsin\left(\frac{\gamma}{\lambda}\right) \quad (4.2)$$

Damit sind die Eigenwerte von $\sigma_3 \tilde{\mathbf{D}}$ gegeben als

$$\omega(\vec{q}) = \pm \sqrt{\lambda^2 - \gamma^2} \quad (4.3)$$

Durch das Voranstellen von σ_3 vor $\tilde{\mathbf{D}}$ hat man die Entartung der Eigenwerte aufgehoben. Der Eigenwert von $\tilde{\mathbf{D}}$ kann als

$$\omega(\vec{q}) = \sqrt{\lambda^2 - \gamma^2} \quad (4.4)$$

gewählt werden.

4.1 Dispersionsrelation der Spinonanregungen

Der Hamiltonian ist nun bezüglich der Basis $\tilde{\Psi}_q$, also bezüglich der Operatoren γ_q^\dagger und $\hat{\gamma}_q$ diagonal. Die γ_q^\dagger und $\hat{\gamma}_q$ sind die bosonische Algebra, die die Anregungen des Systems beschreiben. Sehr interessant und einzigartig ist, dass die Quasiteilchen, die durch γ_q^\dagger und $\hat{\gamma}_q$ erzeugt und vernichtet werden, sich wie Bosonen verhalten, also gemäß ihrer Algebra. Jedoch kann eine solche Anregung bei entsprechender Wahl des Spins an den Gitterpunkten (halbzahlig (z.B. $S = \frac{1}{2}$)), ein $\Delta S = \frac{1}{2}$ bedeuten. Das Quasiteilchen dieser ungewöhnlichen Anregung wird Spinon genannt. Der hochgradig entartete Grundzustand des Systems $|\Omega\rangle$ ist der Vakuumzustand bezüglich der bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren γ_q^\dagger und $\hat{\gamma}_q$. Zu beachten hierbei ist, dass $|\Omega\rangle$ nicht der Vakuumzustand bezüglich der Operatoren \hat{b}_q^\dagger und \hat{b}_q ist

$$\hat{\gamma}_{q,\sigma} |\Omega\rangle = 0 \quad (4.5)$$

$$\hat{b}_{q,\sigma} |\Omega\rangle \neq 0 \quad (4.6)$$

Der Hamiltonian ist diagonal und kann noch einmal umgeschrieben werden. Im zweiten Schritt wird die definierende bosonische Kommutatorrelation für γ_q^\dagger und $\hat{\gamma}_q$ genutzt, sodass sich eine sehr übersichtliche Besetzungszahldarstellung ergibt:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_{MF,eff} &= - \sum_{\vec{q}} \left(\hat{\gamma}_{q,\uparrow}^\dagger \quad , \quad \hat{\gamma}_{-q,\downarrow} \right) \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda^2 - \gamma^2} & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda^2 - \gamma^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{q,\uparrow} \\ \hat{\gamma}_{-q,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \\ &= - \sum_{\vec{q}} \omega(\vec{q}) (\hat{\gamma}_{q,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{q,\uparrow} + \hat{\gamma}_{-q,\downarrow} \hat{\gamma}_{-q,\downarrow}^\dagger) \\ &= - \sum_{\vec{q}} \omega(\vec{q}) (\hat{\gamma}_{q,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{q,\uparrow} + \hat{\gamma}_{-q,\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-q,\downarrow} + 1) \end{aligned} \quad (4.7)$$

In dieser Form wird offensichtlich, dass $\omega(q)$ die Dispersionsrelation der Spinonanregungen ist. Resubstituiert man $\gamma = 4\mathcal{J}A(\sum_a \sin(q_a))$ erhält man für die Sirperionsrelation:

$$\omega(\vec{q}) = \sqrt{\lambda^2 - 16\mathcal{J}^2 A^2 (\sin(q_1) + \sin(q_2) + \sin(q_3))^2} \quad (4.8)$$

Die q_a sind nicht linear unabhängig, denn $q_a = \vec{q} \cdot \vec{e}_a$ $a = 1, 2, 3$. Deshalb muss man diese mit Hilfe der Einheitsvektoren des Gitters (vergleiche Abbildung 3.1) parametrisieren, um die Dispersionsrelation grafisch darstellen zu können. Der Einfachheit

halber wurde die Gitterkonstante $a = 1$ gesetzt.

$$\vec{e}_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \vec{e}_2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \vec{e}_3 = (-1, 0) \quad (4.9)$$

Desweiteren ist zu beachten, dass λ , \mathcal{J} und A für eine erste grafische Veranschaulichung so gewählt werden, dass die Dispersionsrelation einen reellen Wert ergibt. Für die folgenden Plots wurde $\lambda = 3$ und $16\mathcal{J}^2 A^2 = 1$ gewählt. Diese Graphen veranschaulichen die Charakteristik der Dispersionsrelation der Spinonanregung. Dazu wird die Energie der Spinonanregung abhängig vom Impuls des Spinons in x-Richtung (q_x) des Impulses in y-Richtung (q_y) grafisch dargestellt. Die Plots wurden mit Mathematica [4] erstellt.

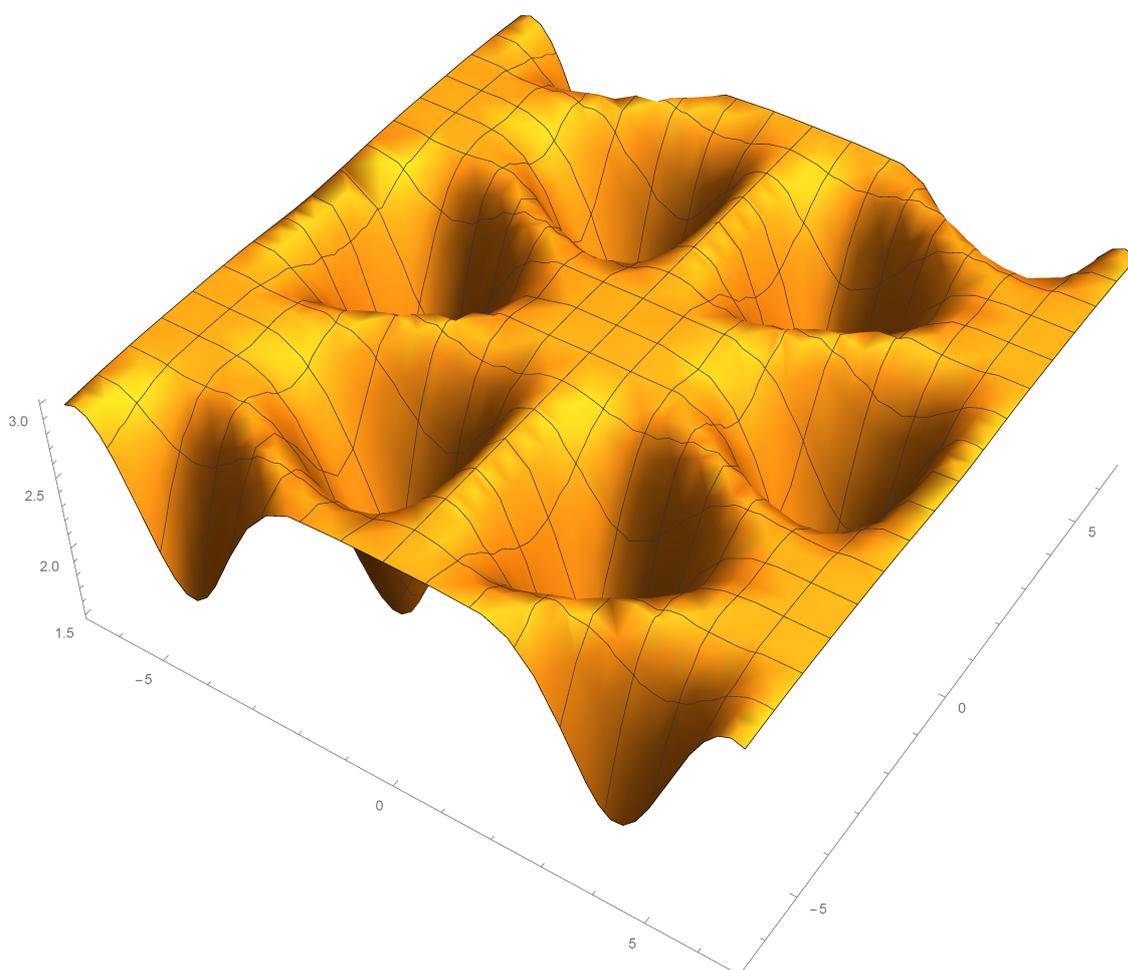


Abbildung 4.1: Dispersionsrelation $\omega(\vec{q})$ aufgetragen gegenüber der Impulse q_x und q_y , Impulsabhängigkeit der Energie des energieärmsten Spinonzustands auf einem antiferromagnetischen Dreiecksgitter; die Minima der Anregungsenergie für einen Spinonzustand liegen an den Eckpunkten der Brillouinzone

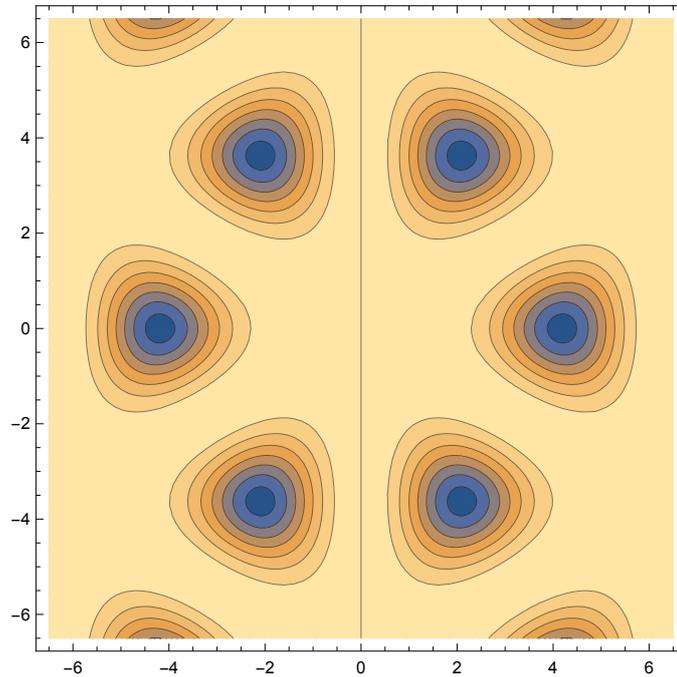


Abbildung 4.2: Konturplot der Energie der niedrigste Spinanregung abhängig vom Impuls \vec{q} auf einem antiferromagnetischen Dreiecksgitter, gut zu erkennen sind die Minima der Anregungsenergie an den Ecken der Brillouinzone

4.2 Statischer Strukturfaktor bei $T=0$

Der Strukturfaktor ist eine interessante Größe des Systems, da der Strukturfaktor eine experimentell messbare Größe ist. Sollte ein solcher Spin-Liquid Grundzustand auf einem antiferromagnetischen Dreiecksgitter in einem experimentell untersuchbaren System vorliegen, könnte man den Strukturfaktor messen. Als experimentelle Methode, um den Strukturfaktor eines solchen Spinsystems zu bestimmen, wird häufig die Neutronenstreuung eingesetzt. Dies ist sinnvoll, da Neutronen einen Spin haben und an andere Spins koppeln, also damit wechselwirken können und somit auch Information über das System gewinnen. Neutronen sind elektrisch neutral, weshalb sie nicht elektrostatisch wechselwirken. Dies hat den Vorteil, dass die Wechselwirkung der Spins beobachtbar bleiben, da die Energieskalen der Spinwechselwirkungen bei diesen Experimenten oft viel kleiner sind als mögliche elektrische Wechselwirkungen. Zudem sind die Neutronenstreuexperimente oft viel genauer und geben mehr Aufschluss über das System, als die sonst eingesetzten Messungen zur spezifischen Wärmekapazität. Hier soll der statische Strukturfaktor bei einer Temperatur $T = 0$ des Systems berechnet werden. Der statische Strukturfaktor bei $T=0$ ist allgemein

gegeben durch die Spin-Spin-Korrelationsfunktion (vergleiche Sachdev [9] Gleichung (2.17)):

$$S(\vec{k}) = \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (4.10)$$

Der Erwartungswert des Spin-Spin-Korrelators muss hierbei bezüglich des Grundzustands $|\Omega\rangle$ bestimmt werden, da dies der Zustand des Systems bei $T = 0$ ist. Im ersten Schritt, kann man den Spin-Spin Korrelator durch die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{b}^\dagger und \hat{b} ausdrücken.

$$\begin{aligned} S(\vec{k}) &= \frac{1}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \langle \sum_a (\hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \sigma_{a,\sigma'}^\sigma \hat{b}_i^{\sigma'}) \cdot (\hat{b}_{j,\tau}^\dagger \sigma_{a,\tau'}^\tau \hat{b}_j^{\tau'}) \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \langle \sum_a \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4} e^{i\vec{r}_i \cdot (\vec{k}_2 - \vec{k}_1)} e^{i\vec{r}_j \cdot (\vec{k}_4 - \vec{k}_3)} (\hat{b}_{\vec{k}_1, \sigma}^\dagger \sigma_{a,\sigma'}^\sigma \hat{b}_{\vec{k}_2}^{\sigma'}) \cdot (\hat{b}_{\vec{k}_3, \tau}^\dagger \sigma_{a,\tau'}^\tau \hat{b}_{\vec{k}_4}^{\tau'}) \rangle \\ &= \Phi \langle (\hat{b}_{\vec{k}_1, \sigma}^\dagger \sigma_{1,\sigma'}^\sigma \hat{b}_{\vec{k}_2}^{\sigma'}) \cdot (\hat{b}_{\vec{k}_3, \tau}^\dagger \sigma_{1,\tau'}^\tau \hat{b}_{\vec{k}_4}^{\tau'}) + (\hat{b}_{\vec{k}_1, \sigma}^\dagger \sigma_{2,\sigma'}^\sigma \hat{b}_{\vec{k}_2}^{\sigma'}) \cdot (\hat{b}_{\vec{k}_3, \tau}^\dagger \sigma_{2,\tau'}^\tau \hat{b}_{\vec{k}_4}^{\tau'}) \\ &\quad + (\hat{b}_{\vec{k}_1, \sigma}^\dagger \sigma_{3,\sigma'}^\sigma \hat{b}_{\vec{k}_3}^{\sigma'}) \cdot (\hat{b}_{\vec{k}_3, \tau}^\dagger \sigma_{3,\tau'}^\tau \hat{b}_{\vec{k}_4}^{\tau'}) \rangle \\ &= \Phi \langle \hat{b}_{\vec{k}_1, \uparrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_2, \uparrow} \hat{b}_{\vec{k}_3, \uparrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_4, \uparrow} - \hat{b}_{\vec{k}_1, \uparrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_2, \uparrow} \hat{b}_{\vec{k}_3, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_4, \downarrow} - \hat{b}_{\vec{k}_1, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_2, \downarrow} \hat{b}_{\vec{k}_3, \uparrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_4, \uparrow} \\ &\quad + \hat{b}_{\vec{k}_1, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_2, \downarrow} \hat{b}_{\vec{k}_3, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_4, \downarrow} + 2\hat{b}_{\vec{k}_1, \uparrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_2, \downarrow} \hat{b}_{\vec{k}_3, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_4, \uparrow} + 2\hat{b}_{\vec{k}_1, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_2, \uparrow} \hat{b}_{\vec{k}_3, \uparrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}_4, \downarrow} \rangle \end{aligned} \quad (4.11)$$

Für die Kompaktheit der Notation wurden die Vorfaktoren, Summationen und Exponentialfunktionen zu Φ zusammengefasst. Der Erwartungswert der Operatoren \hat{b}^\dagger und \hat{b} bezüglich des Grundzustands $|\Omega\rangle$ kann jedoch nicht direkt berechnet werden, da $\hat{b}|\Omega\rangle \neq 0$ ist. Deshalb müssen die Terme durch die Operatoren $\hat{\gamma}^\dagger$ und $\hat{\gamma}$ ausgedrückt werden. Die Bogoljubow-Transformation aus Abschnitt 3.4 liefert die nötigen Relationen dazu.

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_{\vec{k}_1, \uparrow} \\ \hat{b}_{-\vec{k}_1, \downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{\vec{k}_1} & -V_{\vec{k}_1}^* \\ V_{\vec{k}_1} & U_{\vec{k}_1}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{\vec{k}_1, \uparrow} \\ \hat{\gamma}_{-\vec{k}_1, \downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_{\vec{k}_1, \uparrow}^\dagger & \hat{b}_{-\vec{k}_1, \downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{\vec{k}_1, \uparrow}^\dagger & \hat{\gamma}_{-\vec{k}_1, \downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{\vec{k}_1}^* & V_{\vec{k}_1}^* \\ -V_{\vec{k}_1} & U_{\vec{k}_1} \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Ersetzt man alle Operatoren \hat{b} durch Ausdrücke mit Operatoren $\hat{\gamma}$, so entstehen 96 Terme, wie beispielsweise $\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger\hat{\gamma}^\dagger\hat{\gamma}^\dagger$. Die Transformaion mischt Terme $\hat{\gamma}$ und $\hat{\gamma}^\dagger$. Zum

Korrelator tragen jedoch nur Terme der Form $\hat{\gamma}\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger\hat{\gamma}^\dagger$ und $\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger$ bei. Alle anderen Permutationen können zwar auf den Grundzustand $|\Omega\rangle$ angewendet werden, liefern aber keinen Beitrag, wie zum Beispiel $\hat{\gamma}\hat{\gamma}^\dagger\hat{\gamma}^\dagger\hat{\gamma}$, was angewendet auf $|\Omega\rangle$ direkt 0 ergibt. Daher werden im nächsten Schritt alle Terme, die nicht zum Erwartungswert des Spin-Spin-Korrelators beitragen vernachlässigt.

$$\begin{aligned}
S(\vec{k}) = & \Phi \langle \Omega | + (-V_{k_1})(-V_{k_2}^*)(-V_{k_3})(-V_{k_4}^*)\hat{\gamma}_{-k_1,\downarrow}\hat{\gamma}_{-k_2,\downarrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_3,\downarrow}\hat{\gamma}_{-k_4,\downarrow}^\dagger \\
& + (-V_{k_1})U_{k_2}U_{k_3}^*(-V_{k_4}^*)\hat{\gamma}_{-k_1,\downarrow}\hat{\gamma}_{k_2,\uparrow}\hat{\gamma}_{k_3,\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_4,\downarrow}^\dagger \\
& - ((-V_{k_1})(-V_{k_2}^*)V_{k_3}V_{k_4}^*)\hat{\gamma}_{-k_1,\downarrow}\hat{\gamma}_{-k_2,\downarrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_3,\uparrow}\hat{\gamma}_{-k_4,\uparrow}^\dagger \\
& - (-V_{k_1})U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*\hat{\gamma}_{-k_1,\downarrow}\hat{\gamma}_{k_2,\uparrow}\hat{\gamma}_{k_3,\downarrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_4,\uparrow}^\dagger \\
& - (V_{k_1}V_{k_2}^*(-V_{k_3})(-V_{k_4}^*))\hat{\gamma}_{-k_1,\uparrow}\hat{\gamma}_{-k_2,\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_3,\downarrow}\hat{\gamma}_{-k_4,\downarrow}^\dagger \\
& - (V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*(-V_{k_4}^*))\hat{\gamma}_{-k_1,\uparrow}\hat{\gamma}_{k_2,\downarrow}\hat{\gamma}_{k_3,\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_4,\downarrow}^\dagger \\
& + V_{k_1}V_{k_2}^*V_{k_3}V_{k_4}^*\hat{\gamma}_{-k_1,\uparrow}\hat{\gamma}_{-k_2,\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_3,\uparrow}\hat{\gamma}_{-k_4,\uparrow}^\dagger \\
& + V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*\hat{\gamma}_{-k_1,\uparrow}\hat{\gamma}_{k_2,\downarrow}\hat{\gamma}_{k_3,\downarrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_4,\uparrow}^\dagger \\
& + 2(-V_{k_1})V_{k_2}^*V_{k_3}(-V_{k_4}^*)\hat{\gamma}_{-k_1,\downarrow}\hat{\gamma}_{-k_2,\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_3,\uparrow}\hat{\gamma}_{-k_4,\downarrow}^\dagger \\
& + 2(-V_{k_1})U_{k_2}U_{k_3}^*(-V_{k_4}^*)\hat{\gamma}_{-k_1,\downarrow}\hat{\gamma}_{k_2,\downarrow}\hat{\gamma}_{k_3,\downarrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_4,\downarrow}^\dagger \\
& + 2V_{k_1}(-V_{k_2}^*)(-V_{k_3})V_{k_4}^*\hat{\gamma}_{-k_1,\uparrow}\hat{\gamma}_{-k_2,\downarrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_3,\downarrow}\hat{\gamma}_{-k_4,\uparrow}^\dagger \\
& + 2V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*\hat{\gamma}_{-k_1,\uparrow}\hat{\gamma}_{k_2,\uparrow}\hat{\gamma}_{k_3,\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-k_4,\uparrow}^\dagger | \Omega \rangle
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Im nächsten Schritt werden die Operatorenkombinationen auf den Grundzustand angewendet, dabei ergeben sich Zusammenhänge für die Impulse der erzeugten/vernichteten Spinonen.

Die beiden Terme mit der Operatorkombination $\hat{\gamma}_\downarrow\hat{\gamma}_\uparrow^\dagger\hat{\gamma}_\uparrow\hat{\gamma}_\downarrow^\dagger$ und $\hat{\gamma}_\uparrow\hat{\gamma}_\downarrow^\dagger\hat{\gamma}_\downarrow\hat{\gamma}_\uparrow^\dagger$ tragen nicht zum Ergebnis bei, da diese angewendet auf den Grundzustand Ω direkt 0 ergeben.

$$\begin{aligned}
S(\vec{k}) = & \Phi(+V_{k_1}V_{k_2}^*V_{k_3}V_{k_4}^*(\delta_{-k_1,-k_2})(\delta_{-k_3,-k_4}) \\
& + V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*(\delta_{-k_1,-k_4})(\delta_{k_2,k_3}) \\
& - V_{k_1}V_{k_2}^*V_{k_3}V_{k_4}^*(\delta_{-k_1,-k_2})(\delta_{-k_3,-k_4}) \\
& + V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*(\delta_{-k_1,k_3})(\delta_{k_2,-k_4}) \\
& - V_{k_1}V_{k_2}^*V_{k_3}V_{k_4}^*(\delta_{-k_1,-k_2})(\delta_{-k_3,-k_4}) \\
& + V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*(\delta_{-k_1,k_3})(\delta_{k_2,-k_4}) \\
& + V_{k_1}V_{k_2}^*V_{k_3}V_{k_4}^*(\delta_{-k_1,-k_2})(\delta_{-k_3,-k_4}) \\
& + V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*(\delta_{-k_1,-k_4})(\delta_{k_2,k_3}) \\
& + 2V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*((\delta_{-k_1,-k_4})(\delta_{k_2,k_3}) + (\delta_{-k_1,k_3})(\delta_{k_2,-k_4})) \\
& + 2V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*((\delta_{-k_1,-k_4})(\delta_{k_2,k_3}) + (\delta_{-k_1,k_3})(\delta_{k_2,-k_4}))) \quad (4.15)
\end{aligned}$$

Fasst man die oben aufgeführten Terme zusammen und schreibt man Φ wieder aus, ergeben sich weitere Bedingungen und Vereinfachungen.

$$\begin{aligned}
S(\vec{k}) = & \Phi(V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^*(6(\delta_{-k_1,-k_4})(\delta_{k_2,k_3}) + 6(\delta_{-k_1,k_3})(\delta_{k_2,-k_4}))) \\
= & \Phi(6V_{k_1}U_{k_2}U_{k_3}^*V_{k_4}^* + 6V_{k_1}U_{k_2}U_{-k_1}^*V_{-k_2}^*) \\
= & \frac{1}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} \left(\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} e^{i\vec{r}_i\cdot(\vec{k}_2-\vec{k}_1)} e^{i\vec{r}_j\cdot(\vec{k}_1-\vec{k}_2)} 6V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{-\vec{k}_1}^*V_{-\vec{k}_2}^* \right. \\
& \left. + e^{i\vec{r}_i\cdot(\vec{k}_2-\vec{k}_1)} e^{i\vec{r}_j\cdot(\vec{k}_1-\vec{k}_2)} 6V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{\vec{k}_2}^*V_{\vec{k}_1}^* \right) \\
= & \frac{3}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} \left(\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} e^{i(\vec{r}_i-\vec{r}_j)\cdot(\vec{k}_2-\vec{k}_1)} (V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{-\vec{k}_1}^*V_{-\vec{k}_2}^* + V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{\vec{k}_2}^*V_{\vec{k}_1}^*) \right) \\
= & \frac{3}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_i-\vec{r}_j) + i(\vec{r}_i-\vec{r}_j)\cdot(\vec{k}_2-\vec{k}_1)} (V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{-\vec{k}_1}^*V_{-\vec{k}_2}^* + V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{\vec{k}_2}^*V_{\vec{k}_1}^*) \\
= & \frac{3}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i(\vec{r}_i\cdot(\vec{k}+\vec{k}_2-\vec{k}_1) + \vec{r}_j\cdot(-\vec{k}-\vec{k}_2+\vec{k}_1))} (V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{-\vec{k}_1}^*V_{-\vec{k}_2}^* + V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{\vec{k}_2}^*V_{\vec{k}_1}^*) \\
= & \frac{3}{2} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} (\delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_1-\vec{k}})(\delta_{\vec{k}_2,\vec{k}_1-\vec{k}}) (V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{-\vec{k}_1}^*V_{-\vec{k}_2}^* + V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_2}U_{\vec{k}_2}^*V_{\vec{k}_1}^*) \\
= & \frac{3}{2} \sum_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_1-\vec{k}}U_{-\vec{k}_1}^*V_{-\vec{k}_1+\vec{k}}^* + V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_1-\vec{k}}U_{\vec{k}_1-\vec{k}}^*V_{\vec{k}_1}^* \\
= & \frac{3}{2} \sum_{\vec{k}_1} V_{\vec{k}_1}U_{\vec{k}_1-\vec{k}}(U_{-\vec{k}_1}^*V_{-\vec{k}_1+\vec{k}}^* + U_{\vec{k}_1-\vec{k}}^*V_{\vec{k}_1}^*) \quad (4.16)
\end{aligned}$$

Das Ergebnis zeigt, dass der Strukturfaktor ausschlieslich von den Elementen der

Bogoljubow-Transformation abhängt. Die U und V sind trigonometrische Hyperbolfunktionen, die vom Impuls \vec{k} und den Systemparametern λ , \mathcal{J} und A abhängen. Setzt man diese ein, kann man numerisch den Strukturfaktor des antiferromagnetischen Dreieckgitters berechnen. Dies wurde mithilfe des Programms Mathematica getan. Hier wurde der Befehl `NIntegrate` verwendet, der in Abschnitt 2.4 näher erklärt wurde. Das Ergebnis zeigen die Graphen 4.3 und 4.4.

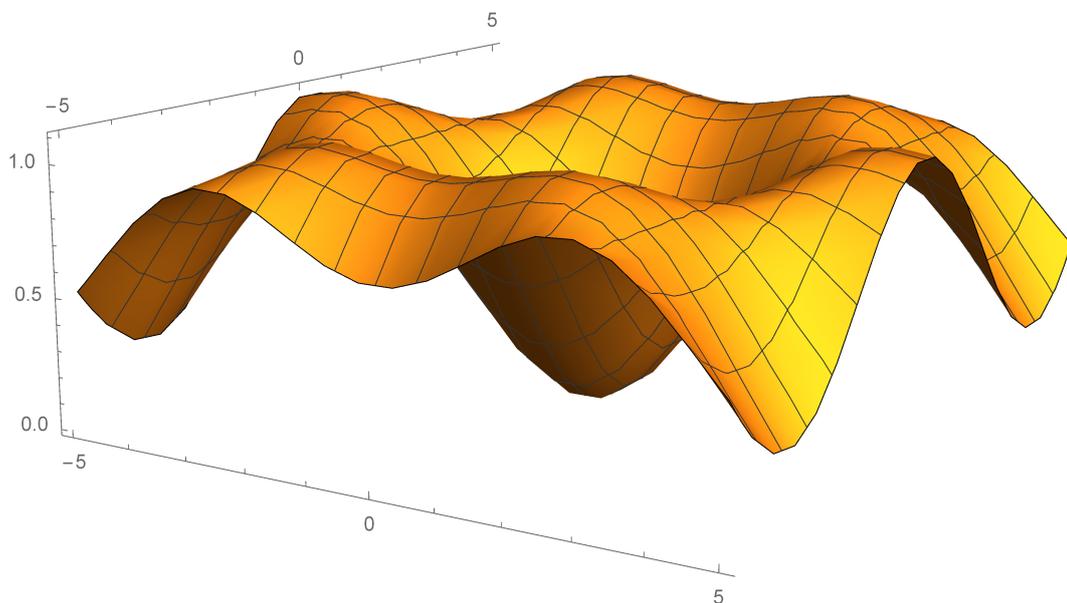


Abbildung 4.3: Strukturfaktor $S(\vec{k})$ bei $T=0$ des antiferromagnetischen Dreieckgitters, Die Maxima liegen auf den Eckpunkten der Brillouinzone

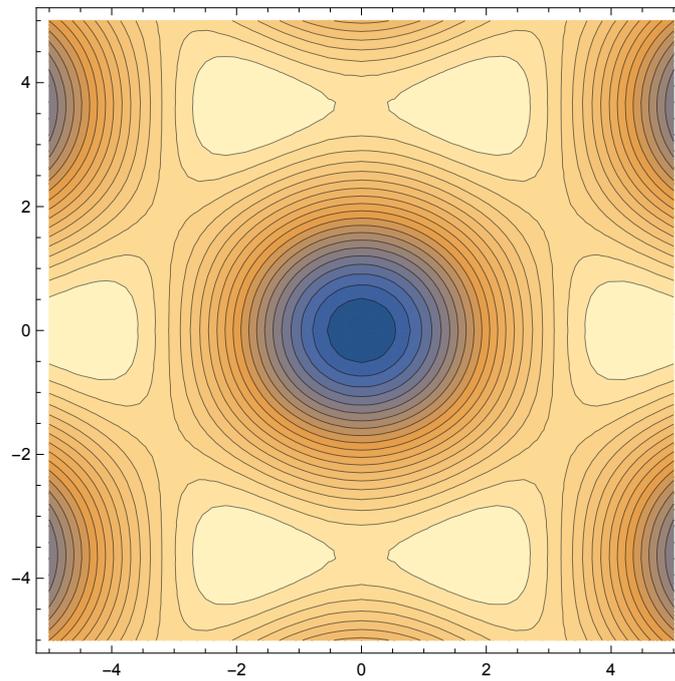


Abbildung 4.4: Konturplot des Strukturfaktors $S(\vec{k})$ bei $T=0$ des antiferromagnetischen Dreieckgitters, Die Maxima (im hellsten Bereich) liegen auf den Eckpunkten der Brillouinzone

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit zeigt, dass es valide Hinweise auf die Existenz von Spin-Liquid Zuständen gibt. Auch die neuartigen elementaren Spinonanregungen gehen aus dieser theoretischen Betrachtung direkt und konsequent hervor. Jedoch ist ein kritischer Punkt, dass realen Festkörpern selten bis gar nie eine perfektes Dreiecksgitter als Struktur zugrunde liegt. Hier ist die theoretische Physik gefragt, kompliziertere Geometrien mit geometrischer Frustration zu untersuchen, die auch in realen Festkörpern realisiert werden. Dies kann zum Beispiel das Kagome-Gitter sein. Von experimenteller Seite her sollte das Ziel sein Methoden zu entwickeln beziehungsweise zu verfeinern, die solche Zustände und Anregungen genügend genau messen und damit nachweisen zu können.

Literaturverzeichnis

- [1] Spektrum. Lexikon der Physik. Hochtemperatursupraleiter.
<http://www.spektrum.de/lexikon/physik/hochtemperatur-supraleiter/6805>
(abgerufen am 13.09.2016)
- [2] R. P. Feynman. Statistical Mechanics A Set of Lectures.
W. A. Benjamin, Inc. (First printing 1972), chapter 6.1; 6.6-6.9
- [3] Jean-Paul Blaizot and Georges Ripka. Quantum Theory of Finite Systems.
The MIT Press (1986), chapter 2.4
- [4] Wolfram Mathematica 10.0.2 Student Edition.
Wolfram Research, Inc. (Released dec. 2014)
- [5] Wolfram Mathematica Language Dokumentation Center. NIntegrate.
<https://reference.wolfram.com/language/ref/NIntegrate.html> (30.08.2016)
- [6] A. Altland, B. Simmons. Condensed Matter Field Theory.
Cambridge University Press (Second Edition 2010), p.270 - p.276
- [7] S. Sachdev. Quantum Antiferromagnets in Two Dimensions.
Lectures presented in Les Houches (2009)
- [8] F. Wang, A. Vishwanath. Spin Liquid States on the Triangular and Kagomé
Lattice: A Projective Symmetry Group Analysis of Schwinger Boson States.
Physical Review B **74**, 174423 (2006)
- [9] S. Sachdev. Kagomé- and triangular-lattice Heisenberg antiferromagnets: Or-
dering from quantum fluctuations and quantum-disordered ground states with
unconfined bosonic spinons.
Physical Review B **45**, 21 (1992)

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit mit dem Titel

„Spin-Liquid Zustände auf einem Dreiecksgitter“

selbstständig verfasst habe und keine weiteren als die explizit ausgezeichneten Literaturquellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Ort, Datum

Paul Koschmieder