
**Qualitative Analyse der Spin-Anisotropien im
frustrierten Spinleitersystem BiCu_2PO_6**

Masterarbeit
zur Erlangung des akademischen Grades
Master of Science

vorgelegt von
Leanna Blanche Splinter
geboren in Dortmund

Lehrstuhl für Theoretische Physik I
Fakultät Physik
Technische Universität Dortmund

2015

1. Gutachter: Prof. Dr. Götz S. Uhrig

2. Gutachter: Dr. Kai P. Schmidt

Datum des Einreichens der Arbeit: 30. September 2015

Kurzfassung

In dieser Arbeit wird der Einfluss der anisotropen Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung auf das Anregungsspektrum des frustrierten Spinleitersystems BiCu_2PO_6 (kurz: BCPO) untersucht. Als Grundlage werden die Ergebnisse einer kontinuierlichen unitären Transformation für die frustrierte Spinleiter verwendet. Mit Hilfe von Störungstheorie wird der Effekt der anisotropen Wechselwirkung auf die Dispersion der Triplonen analysiert. Das Ziel ist es, einen Satz von Parametern zu finden, der den niederenergetischen Bereich der Dispersion beschreibt, ohne unrealistische Kopplungen anzunehmen.

Abstract

In this thesis the influence of the anisotropic Dzyaloshinskii-Moriya interaction on the excitation spectrum of the frustrated spinladder system BiCu_2PO_6 (short: BCPO) will be investigated. As a basis the results for a frustrated spin ladder by a continuous unitary transformation will be used. The effect of the anisotropic interaction on the dispersion of triplons will be analysed by perturbation theory. The aim is to find a set of parameters, which is able to describe the low-energy part of the dispersion without assuming unrealistic couplings.

Inhaltsverzeichnis

I	Theoretische Grundlagen: Modelle und Methoden	9
1	Einleitung	11
2	Bondoperatoren	13
2.1	Triplettoperatoren	13
2.2	Hardcoreoperatoren	14
3	Spinleiter-Modelle	17
3.1	Spinleiter	18
3.2	Frustrierte Spinleiter	20
3.3	Kopplung mehrerer Spinleitern	22
3.4	Die Struktur von BCPO	23
4	CUT-Methode	27
4.1	Konzept der CUT	27
4.2	Generatoren	28
4.2.1	Wegner Generator	28
4.2.2	Teilchenzahlerhaltender Generator	28
4.3	CUT-Varianten	30
4.3.1	Perturbative CUT	30
4.3.2	Selbstähnliche CUT	30
4.4	Verbesserte perturbative CUT	31
4.4.1	Algorithmus zur Berechnung der Beiträge D_{ijk}	33
4.4.2	epCUT mit direkter Auswertung	34
4.4.3	Transformation von Observablen	34
5	Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung	37
5.1	Symmetrische anisotrope Wechselwirkung	39

5.2	Auswahlregeln nach Moriya	41
5.2.1	Inversionssymmetrie	41
5.2.2	Senkrechte Spiegelebene	42
5.2.3	Parallele Spiegelebene	43
5.2.4	Senkrechte Rotationsachse	44
5.2.5	Parallele Rotationsachse	45
5.2.6	Überblick der Auswahlregeln	46
5.3	Symmetrien in BCPO	46
II Ergebnisse der Arbeit		51
6	Berechnung der Dispersionen	53
6.1	Berücksichtigung der Zwischen-Leiter-Kopplung	53
6.2	Transformation eines antisymmetrischen Wechselwirkungsterms	55
6.3	Aufstellen der Dispersion	58
6.4	Lineare Beiträge zur Dispersion	61
6.4.1	Analyse der D_2^z -Komponente	63
6.4.2	Analyse der Zwischen-Leiter-Kopplung J'	64
6.5	Quadratische Beiträge zur Dispersion	65
6.5.1	Analyse der Beiträge Γ_0^{xx} und Γ_0^{yy}	70
6.5.2	Analyse der Beiträge Γ_1^{xx} , Γ_1^{yy} und Γ_1^{xy}	73
6.5.3	Analyse der Beiträge Γ_2^{xx} und Γ_2^{yy}	76
6.5.4	Zusammenfassung	80
6.6	Einfluss der DM-Wechselwirkung auf die z -Mode	81
7	Vergleich mit experimentellen Daten	83
8	Alternierende J_2-Kopplung	101
8.1	Berücksichtigung der alternierenden J_2 -Kopplung	101
8.1.1	Analyse der Alternierung δ	104
8.2	Symmetrien in BCPO mit alternierender J_2 -Kopplung	105
8.3	Transformation des linearen Beitrags von D_1^z	107
8.3.1	Analyse der D_1^z -Komponente	109
8.4	Einfluss der Alternierung δ auf die x - und y -Mode	109
8.5	Einfluss der Alternierung δ auf die z -Mode	111
8.6	Vergleich mit experimentellen Daten	113
9	Zusammenfassung	121
9.1	Ergebnisse	121

9.2 Ausblick	124
III Anhang	125
Abbildungsverzeichnis	127
Tabellenverzeichnis	132
Literaturverzeichnis	134

Teil I

Theoretische Grundlagen: Modelle und Methoden

1 Einleitung

Ein Festkörper besteht aus einer Vielzahl wechselwirkender Atome, die jeweils aus einem Kern und einer bestimmten Anzahl an Elektronen zusammengesetzt sind. Die Eigenenergien jedes einzelnen Atoms sind diskret. Durch die Vielzahl an (meist unterschiedlichen) Atomen in einem Festkörper verschmelzen diese diskreten Eigenenergien zu sogenannten Energiebändern, die in ein Valenz- und ein Leitungsband aufgeteilt werden. Auf mikroskopischer Ebene wird ein Festkörper anhand seiner Gitterstruktur klassifiziert [1]. In der theoretischen Festkörperphysik werden Gitterstrukturen meist mit Hilfe von Spin-Modellen beschreiben. Das berühmteste Modell, um die Wechselwirkung zwischen zwei Spins zu darzustellen, ist das Heisenberg-Modell. Der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = J\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 \quad (1.0.1)$$

beschreibt die Wechselwirkung zwischen zwei Spins \mathbf{S}_1 und \mathbf{S}_2 [2]. Das Vorzeichen der Kopplungskonstante J entscheidet, ob es sich um eine ferromagnetische ($J < 0$) oder um eine antiferromagnetische ($J > 0$) Wechselwirkung handelt. Der Hamiltonoperator aus Gleichung 1.0.1 ist spinisotrop, d.h. alle Spinkomponenten sind gleichgestellt. Neben der isotropen Wechselwirkung existieren in jedem realen Material spinanisotrope Wechselwirkungen. Sie werden jedoch meist in theoretischen Berechnungen aufgrund ihrer komplizierten Struktur vernachlässigt. Im Jahr 1958 führte DZYLALOSHINSKII [3] mittels phänomenologischer Argumentation eine antisymmetrische spinanisotrope Wechselwirkung

$$\mathcal{H}_{\mathbf{D}} = \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2) \quad (1.0.2)$$

zwischen zwei Spins \mathbf{S}_1 und \mathbf{S}_2 ein, um den schwachen Ferromagnetismus in hauptsächlich antiferromagnetischen Materialien erklären zu können. Der Vektor \mathbf{D} aus Gleichung 1.0.2 besitzt konstante reelle Koeffizienten. Zwei Jahre später gelang es MORIYA [4] die antisymmetrische anisotrope Wechselwirkung aus Gleichung 1.0.2 theoretisch herzuleiten. Dazu wurde die Anderson Theorie des Supertauschs um die Spin-Bahn-Kopplung erweitert. Die Wechselwirkung aus Gleichung 1.0.2 wird auch als Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung (kurz: DM-Wechselwirkung) bezeichnet. Die Spin-Bahn-Kopplung ist

ein relativistischer Effekt und proportional zur vierten Potenz der Kernladungszahl Z [5]. Das bedeutet, dass die Spin-Bahn-Kopplung und damit die DM-Wechselwirkung bei Atomen mit hoher Kernladungszahl einen nicht vernachlässigbaren Einfluss besitzt. Ihr Effekt zeigt sich beispielsweise in der aufgehobenen Entartung der elementaren Anregungen. Die Verbindung BiCu_2PO_6 (kurz: BCPO) besitzt solch ein aufgespaltenes Anregungsspektrum. Aufgrund der hohen Kernladungszahl von Bismut (Elementsymbol Bi und Kernladungszahl $Z = 83$) [5] ist es nötig anisotrope Wechselwirkungen bei der Analyse von BCPO zu berücksichtigen. Die Struktur von BCPO besteht aus gekoppelten frustrierten Spin $S=1/2$ Heisenberg-Leitern. Im Jahr 2014 publizierten PLUMB *et al.* eine theoretische Analyse mittels quadratischer Bondoperatoren-Theorie zu diesem Material [6]. Ihr Ziel war es die Anregungen im energetisch niedrigen Bereichen (2-4 meV) zu beschreiben. Dazu wählten sie anisotrope Wechselwirkungen, deren Größe 60% von der isotropen Wechselwirkung ausmachen. Diese gigantischen Anisotropien scheinen sehr fragwürdig vor dem Hintergrund, dass ihr Ursprung in der Spin-Bahn-Kopplung liegt. Die Anisotropien sollten deswegen einen Wert annehmen, der ca. 10-20 % von der isotropen Wechselwirkung entspricht.

In dieser Arbeit soll untersucht werden, ob das entartete Anregungsspektrum von BiCu_2PO_6 mit geringen Anisotropien von ca. 10-20%, beschrieben werden kann. Als Grundlage dient die bereits gelöste frustrierte Spin $S=1/2$ Heisenberg-Leiter, durchgeführt mit einer kontinuierlichen unitären Transformation (engl: continuous unitary transformation, kurz: CUT) von DRESCHER und KRULL. Aufbauend darauf soll der Einfluss der anisotropen Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung auf das Anregungsspektrum mittels Störungstheorie im Rahmen einer Mean-Field Näherung untersucht werden.

2 Bondoperatoren

2.1 Tripletoperatoren

Das einfachste Modell für wechselwirkende Spins stellt ein isoliertes Dimer dar.

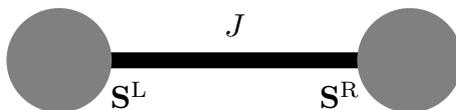


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung eines Dimers. Die grauen Punkte stehen für den linken (\mathbf{S}^L) und den rechten (\mathbf{S}^R) Spin mit jeweils $S=1/2$. Die schwarze Linie stellt die Kopplung J zwischen den Spins dar.

Es sollen hier zwei Spins $S=1/2$ betrachtet werden. Der dazugehörige Hilbertraum \mathbb{H} ist vierdimensional. Der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = J\mathbf{S}^L\mathbf{S}^R, \quad J > 0 \quad (2.1.1)$$

beschreibt eine rein antiferromagnetische Heisenberg-Wechselwirkung auf einem Dimer. Eine mögliche Basis ist durch das Singlett $|s\rangle$ und die drei Triplets $|x\rangle$, $|y\rangle$ und $|z\rangle$ gegeben. SACHDEV und BHATT nutzten diese Basis für die Untersuchung eines zweidimensionalen Gitters, bestehend aus gekoppelten Dimeren mit jeweils zwei Spins $S=1/2$. Im Rahmen einer Mean-Field-Rechnung konnten sie den Übergang zwischen der dimerisierten und magnetisch geordneten Phase von Quantenantiferromagneten qualitativ beschreiben [7]. Dabei definierten sie die Operatoren s^\dagger und $\tilde{t}^{\alpha,\dagger}$, die die dazugehörigen

Zustände angewandt auf ein abstraktes Vakuum $|\tilde{0}\rangle$ erzeugen, wie folgt:

$$|s\rangle = s^\dagger |\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.1.2a)$$

$$|x\rangle = \tilde{t}^{x,\dagger} |\tilde{0}\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle) \quad (2.1.2b)$$

$$|y\rangle = \tilde{t}^{y,\dagger} |\tilde{0}\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \quad (2.1.2c)$$

$$|z\rangle = \tilde{t}^{z,\dagger} |\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (2.1.2d)$$

Diese vier Zuständen sind Eigenzustände des Hamiltonoperators aus Gleichung 2.1.1. Sie bilden eine Orthonormalbasis für den vierdimensionalen Hilbertraum \mathbb{H} eines einzelnen Dimers. Die Spinoperatoren haben in dieser Basis die Form

$$S^{\alpha,L} = \frac{1}{2} \left(s^\dagger \tilde{t}^\alpha + \tilde{t}^{\alpha,\dagger} s - \sum_{\beta,\gamma} i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \tilde{t}^{\beta,\dagger} \tilde{t}^\gamma \right) \quad (2.1.3a)$$

$$S^{\alpha,R} = \frac{1}{2} \left(s^\dagger \tilde{t}^\alpha + \tilde{t}^{\alpha,\dagger} s + \sum_{\beta,\gamma} i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \tilde{t}^{\beta,\dagger} \tilde{t}^\gamma \right). \quad (2.1.3b)$$

Die griechischen Indizes stehen für x , y und z . Diese Darstellung hat den Nachteil, das System eines einzelnen Dimers in größere und unendlichdimensionale Hilberträume einzufügen [8]. Es ist beispielsweise bei dieser Schreibweise möglich mehrere Triplets auf einem Dimer vorzufinden [8]. Eine Darstellung, in der dies nicht der Fall ist und die sich eignet, ein einzelnes Dimersystem in größere Hilberträume einzufügen, wird im nächsten Unterkapitel vorgestellt.

2.2 Hardcoreoperatoren

Der Zustand niedrigster Energie eines Dimers mit antiferromagnetischer Wechselwirkung, siehe 2.1.1, ist der Singlettzustand. Dieser wird als Referenzzustand

$$|0\rangle := |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.2.4)$$

genutzt [8]. Wir definieren die sogenannten Triplettoperatoren als

$$t^{x,\dagger} := |x\rangle \langle s| \quad (2.2.5a)$$

$$t^{y,\dagger} := |y\rangle \langle s| \quad (2.2.5b)$$

$$t^{z,\dagger} := |z\rangle \langle s|. \quad (2.2.5c)$$

Die Spinoperatoren \mathbf{S}^L und \mathbf{S}^R haben in dieser Operatorbasis die Form

$$S^{\alpha,L} = \frac{1}{2} \left(t^{\alpha,\dagger} + t^\alpha - \sum_{\beta,\gamma} i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} t^{\beta,\dagger} t^\gamma \right) \quad (2.2.6a)$$

$$S^{\alpha,R} = -\frac{1}{2} \left(t^{\alpha,\dagger} + t^\alpha + \sum_{\beta,\gamma} i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} t^{\beta,\dagger} t^\gamma \right). \quad (2.2.6b)$$

Die griechischen Indizes stehen für x , y und z . Durch explizites Ausrechnen lässt sich zeigen, dass die Basiszustände die Identität

$$\begin{aligned} \mathbb{1} &= |s\rangle \langle s| + |x\rangle \langle x| + |y\rangle \langle y| + |z\rangle \langle z| \\ &= |s\rangle \langle s| + \sum_{\alpha} t^{\alpha,\dagger} t^\alpha \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

erfüllen. Umgestellt nach dem Singlettprojektor ergibt sich der Zusammenhang

$$|s\rangle \langle s| = \mathbb{1} - \sum_{\alpha} t^{\alpha,\dagger} t^\alpha. \quad (2.2.8)$$

Ausgehend von der Matrixdarstellung der Triplettoperatoren ist die lokale Kommutatorrelation durch

$$\begin{aligned} [t^\alpha, t^{\beta,\dagger}] &= |s\rangle \langle \alpha| |\beta\rangle \langle s| - |\beta\rangle \langle s| |s\rangle \langle \alpha| \\ &= \delta_{\alpha,\beta} |s\rangle \langle s| - |\beta\rangle \langle \alpha| \\ &= \delta_{\alpha,\beta} \left(\mathbb{1} - \sum_{\gamma} t^{\gamma,\dagger} t^\gamma \right) - t^{\beta,\dagger} t^\alpha \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

gegeben. Der Kommutator von jeweils zwei Tripletterzeugern/-vernichtern verschwindet stets. Diese Kommutatorrelation beschreibt sogenannte Hardcore-Bosonen. Sie sagt anschaulich aus, dass sich nur ein Triplet lokal auf einem Dimer befinden kann.

Von nun an betrachten wir ausgedehnte Modelle, auf dessen Gitterplätze jeweils ein Dimer vorzufinden ist. Werden Triplettoperatoren, die sich auf Gitterplätzen i und j befinden, betrachtet, so muss die Kommtatorialgebra auf

$$[t_i^\alpha, t_j^{\beta,\dagger}] = \delta_{ij} \left(\delta_{\alpha,\beta} \left(\mathbb{1} - \sum_{\gamma} t_i^{\gamma,\dagger} t_i^\gamma \right) - t_i^{\beta,\dagger} t_i^\alpha \right) \quad (2.2.10)$$

erweitert werden.

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden wir diese Operatoren verwenden.

3 Spinleiter-Modelle

In diesem Kapitel werden die Spin $S=1/2$ Heisenberg-Leiter (kurz: Spinleiter) und verschiedene Variationen vorgestellt.

Die Spinleiter stellt die Struktur vieler Materialien dar. Sie kann deswegen in der experimentellen Festkörperphysik untersucht werden. Insbesondere die Kuprate SrCu_2O_3 und $\text{A}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ ($\text{A} = \{\text{Sr}, \text{Ca}, \text{La}\}$), sowie die Verbindungen $\text{La}_4\text{Sr}_{10}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ und $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$ realisieren durch ihre Struktur das Modell der Spinleiter und wurden bereits ausführlich theoretisch analysiert [9–11]. Die Spinleiter ist ein in der theoretischen Festkörperphysik häufig untersuchtes und auch gut verstandenes Modell, siehe [9–12]. Sie wurde mit Hilfe unterschiedlichster Methoden analysiert, z.B. Dichtematrix Renormierungsgruppe (kurz: DMRG) [13], exakte Diagonalisierung [14], Lanczos-Methode [15], Quanten-Monte-Carlo [16], sowie mit perturbativen Methoden [17,18]. Desweiteren wurde die Spinleiter mit unterschiedlichen CUT-Varianten untersucht, z.B. mit der perturbativen CUT (kurz: pCUT) [19], der selbstähnlichen CUT (kurz: sCUT) [20] und der verbesserten perturbativen CUT mit direkter Auswertung (kurz: deepCUT) [21].

In den nachfolgenden Unterkapiteln soll zuerst der Übergang von isolierten Dimeren zur Spinleiter beschrieben werden. Anschließend wird dieses Modell auf die frustrierte Spinleiter erweitert. In dem vorletzten Unterkapitel wird dargestellt, wie die Kopplung mehrerer Spinleitern untereinander beschrieben werden kann. Im letzten Unterkapitel soll die Struktur des Quantenantiferromagneten BiCu_2PO_6 (kurz: BCPO) aufgezeigt werden, der in dieser Arbeit untersucht wird.

3.1 Spinleiter

Um den Übergang von isolierten Dimeren, siehe Kapitel 2.1, auf die Spinleiter durchzuführen, werden der linke Spin \mathbf{S}_i^L und der rechte Spin \mathbf{S}_i^R des Dimers i mit dem jeweils linken Spin \mathbf{S}_{i+1}^L und rechten Spin \mathbf{S}_{i+1}^R des Dimers $i + 1$ gekoppelt.

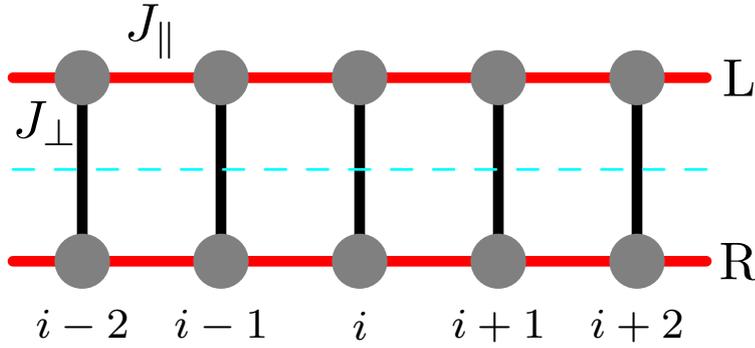


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Spinleiter. Die grauen Kreise stellen Spins mit $S=1/2$ dar. Die roten Linien stehen für die Holmkopplung J_{\parallel} und die schwarzen Linien für die Sprosskopplung J_{\perp} . Die türkisfarbene Gerade stellt die Symmetrieachse der Spinleiter dar.

Diese Spinleiter wird durch den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = J_{\perp} \mathcal{H}_{\perp} + J_{\parallel} \mathcal{H}_{\parallel} \quad \text{mit} \quad (3.1.1a)$$

$$\mathcal{H}_{\perp} = \sum_i \mathbf{S}_i^L \mathbf{S}_i^R \quad (3.1.1b)$$

$$\mathcal{H}_{\parallel} = \sum_{i,\tau} \mathbf{S}_i^{\tau} \mathbf{S}_{i+1}^{\tau} \quad (3.1.1c)$$

beschrieben. Hierbei steht der Index i für den Gitterplatz des jeweiligen Dimers, in Bezug auf Spinleitern meist Sprosse genannt. Die Variable τ nimmt die Werte L für den linken Spin und R für den rechten Spin einer Sprosse an. Die Holmkopplung wird mit J_{\parallel} bezeichnet und die Sprosskopplung mit J_{\perp} . Wir betrachten den Fall einer antiferromagnetischen Spinleiter, d.h. für die Kopplungen gilt $J_{\perp}, J_{\parallel} > 0$. Das Verhältnis von Holmkopplung zu Sprosskopplung wird mit $x = J_{\parallel}/J_{\perp}$ bezeichnet und stellt den Entwicklungsparameter für die CUT dar. Das bedeutet es wird eine Entwicklung im Grenzfall isolierter Sprossen ($x = 0$) durchgeführt.

Um die Spinleiter besser analysieren zu können, wird der Hamiltonoperator aus Gleichungen 3.1.1 mit Hilfe der Bondoperatoren aus Kapitel 2.2 umgeschrieben. In dieser

Darstellung hat der Hamiltonoperator die Form

$$\frac{\mathcal{H}}{J_{\perp}} = \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)} \quad (3.1.2)$$

mit

$$\mathcal{H}^{(0)} = -\frac{3}{4} \sum_i \mathbb{1} + \sum_{i,\alpha} t_i^{\alpha,\dagger} t_i^{\alpha} \quad (3.1.3a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(1)} &= \frac{x}{2} \sum_{i,\alpha} \left(t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+1}^{\alpha} + t_{i+1}^{\alpha,\dagger} t_i^{\alpha} \right) \\ &+ \frac{x}{2} \sum_{i,\alpha \neq \beta} t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+1}^{\beta,\dagger} t_i^{\beta} t_{i+1}^{\alpha} \\ &- \frac{x}{2} \sum_{i,\alpha \neq \beta} t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+1}^{\alpha,\dagger} t_i^{\beta} t_{i+1}^{\beta} \\ &+ \frac{x}{2} \sum_{i,\alpha} \left(t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+1}^{\alpha,\dagger} + t_i^{\alpha} t_{i+1}^{\alpha} \right). \end{aligned} \quad (3.1.3b)$$

$\mathcal{H}^{(0)}$ bzw. $\mathcal{H}^{(1)}$ stehen für alle Terme, die nullter bzw. erster Ordnung in x sind. Die griechischen Indizes stehen für die Moden x, y und z [22]. Da alle Moden bezüglich des Hamiltonoperators gleichgestellt sind, ist die Spinleiter isotrop.

Der Hamiltonoperator $\mathcal{H}^{(1)}$ beschreibt Hüpfprozesse der Triplets zu benachbarten Dimeren sowie Quantenfluktuationen. Die bilinearen Terme $t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+1}^{\alpha}$ und $t_{i+1}^{\alpha,\dagger} t_i^{\alpha}$ aus Gleichung 3.1.3b beschreiben Hüpfprozesse. Werden nur diese Terme in $\mathcal{H}^{(1)}$ berücksichtigt und die Hardcoreeigenschaft der Operatoren, siehe Unterkapitel 2.2, vernachlässigt, so kann der Hamiltonoperator \mathcal{H} aus Gleichung 3.1.2 mit Hilfe einer Fouriertransformation diagonalisiert werden. Die Triplets stellen folglich bei Systemen, die nur bilineare Hüpfprozesse enthalten, die elementaren Anregungen dar.

Die Terme $t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+1}^{\alpha,\dagger}$ und $t_i^{\alpha} t_{i+1}^{\alpha}$ beschreiben Quantenfluktuationen. Diese sorgen dafür, dass Triplets nicht mehr die elementaren Anregungen des Systems darstellen. Anschaulich führen die Quantenfluktuationen zu einer Polarisationswolke um das Triplet. Deshalb wird das Triplet inklusive der magnetischen Polarisation der Umgebung zu einem neuen Quasiteilchen, dem Triplon, zusammengefasst. Dieses stellt die elementare Anregung in einem wechselwirkenden System von Dimeren dar.

Die oben beschriebene Spinleiter ist invariant unter einer Spiegelung entlang der Geraden, die senkrecht durch die Mitte der Sprossen verläuft, siehe Abbildung 3.1. Aufgrund dieser Symmetrie existieren keine Matrixelemente zwischen Unterräumen mit ungerader und gerader Anzahl an Quasiteilchen [23]. Das bedeutet, dass die Triplonen eine

unendliche Lebensdauer besitzen [23].

3.2 Frustrierte Spinleiter

Wird die Spinleiter aus dem vorherigen Kapitel um eine antiferromagnetische Wechselwirkung zwischen den Übernächst-Nachbar-Spins auf dem Holmen erweitert, erhält man die frustrierte Spin $S=1/2$ Heisenberg-Leiter (kurz: frustrierte Spinleiter).

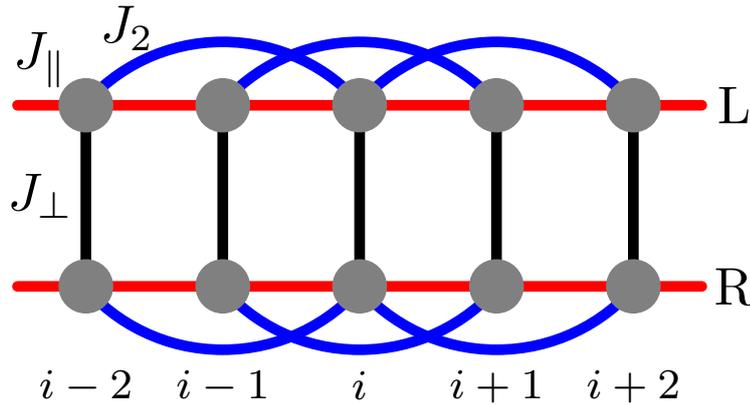


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der frustrierten Spinleiter. Die grauen Kreise stellen Spins mit $S=1/2$ dar. Die roten Linien stehen für die Holmkopplung J_{\parallel} , die schwarzen Linien für die Sprossenkopplung J_{\perp} und die blauen Linien für die Übernächst-Nachbar-Kopplung J_2 .

Die frustrierte Spinleiter wird durch den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = J_{\perp} \mathcal{H}_{\perp} + J_{\parallel} \mathcal{H} + J_2 \mathcal{H}_2 \quad \text{mit} \quad (3.2.4a)$$

$$\mathcal{H}_{\perp} = \sum_i \mathbf{S}_i^L \mathbf{S}_i^R \quad (3.2.4b)$$

$$\mathcal{H}_{\parallel} = \sum_{i,\tau} \mathbf{S}_i^{\tau} \mathbf{S}_{i+1}^{\tau} \quad (3.2.4c)$$

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{i,\tau} \mathbf{S}_i^{\tau} \mathbf{S}_{i+2}^{\tau} \quad (3.2.4d)$$

beschrieben. Dieser Hamiltonoperator entspricht dem der Spinleiter aus Gleichungen 3.1.1 und wurde um die Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung auf dem Holmen, ausgedrückt durch \mathcal{H}_2 , erweitert. Die Kopplung zwischen den Übernächst-Nachbar-Spins auf den Holmen wird mit J_2 bezeichnet und soll wie die anderen Kopplungen antiferromagnetisch sein: $J_2 > 0$. Aufgrund der zusätzlichen Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung ist das System frustriert. Es existiert kein klassischer Grundzustand, der allen Kopplungen

gerecht wird¹.

Die Spiegelsymmetrie der Spinleiter ist bei der frustrierten Spinleiter noch immer erhalten. Deshalb ist auch in diesem Modell die Lebensdauer der Triplonen unendlich, siehe Unterkapitel 3.1. Im Vergleich zur Spinleiter besitzt die frustrierte Spinleiter neben dem Parameter x einen weiteren Parameter y , der das Verhältnis zwischen der Übernächst-Nachbar-Kopplung zur Nächst-Nachbar-Holmkopplung $y=J_2/J_{\parallel}$ beschreibt. Hierbei ist anzumerken, dass J_{\parallel} und J_2 beides Holmkopplungen sind.

Zur besseren Analyse wird der Hamiltonoperator der frustrierten Spinleiter ebenfalls mit Hilfe der Bondoperatoren aus Kapitel 2.2 ausgedrückt, sodass sich

$$\frac{\mathcal{H}}{J_{\perp}} = \mathcal{H}^{(0,0)} + \mathcal{H}^{(1,0)} + \mathcal{H}^{(1,1)} \quad (3.2.5)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(1,1)} &= \frac{xy}{2} \sum_{i,\alpha} \left(t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+2}^{\alpha} + t_{i+2}^{\alpha,\dagger} t_i^{\alpha} \right) \\ &+ \frac{xy}{2} \sum_{i,\alpha \neq \beta} t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+2}^{\beta,\dagger} t_i^{\beta} t_{i+2}^{\alpha} \\ &- \frac{xy}{2} \sum_{i,\alpha \neq \beta} t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+2}^{\alpha,\dagger} t_i^{\beta} t_{i+2}^{\beta} \\ &+ \frac{xy}{2} \sum_{i,\alpha} \left(t_i^{\alpha,\dagger} t_{i+2}^{\alpha,\dagger} + t_i^{\alpha} t_{i+2}^{\alpha} \right). \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

ergibt.

Die Terme $\mathcal{H}^{(0,0)}$ bzw. $\mathcal{H}^{(1,0)}$ entsprechen den Termen $\mathcal{H}^{(0)}$ bzw. $\mathcal{H}^{(1)}$ aus Gleichungen 3.1.3a bzw. 3.1.3b. Der erste Index bezieht sich auf die Ordnung in x und der zweite Index auf die Ordnung in y .

¹Der quantenmechanische Néel-Zustand ist ebenfalls nicht der Grundzustand eines frustrierten/unfrustrierten Spinsystems.

3.3 Kopplung mehrerer Spinleitern

In dieser Arbeit untersuchen wir ein Material, das sich durch ein zweidimensionales Modell aus gekoppelten (frustrierten) Spinleitern beschreiben lässt. Wechselwirken mehrere Spinleitern miteinander, so gibt es zusätzlich zu dem Hamiltonoperator der einzelnen Leitern noch den Zwischen-Leiter-Kopplungsterm

$$\mathcal{H}' = J' \sum_{i,j} \mathbf{S}_{i,j}^R \mathbf{S}_{i,j+1}^L. \quad (3.3.7)$$

Der Summenindex i steht für die Sprossen der Leitern und j für die jeweilige Leiter. Es wird also der rechte Spin der j -ten Leiter auf der i -ten Sprosse $\mathbf{S}_{i,j}^R$ an den linken Spin der $(j+1)$ -ten Leiter auf der i -ten Sprosse $\mathbf{S}_{i,j+1}^L$ gekoppelt. Die nachfolgende Abbildung 3.3 verdeutlicht die Kopplung zweier Spinleitern.

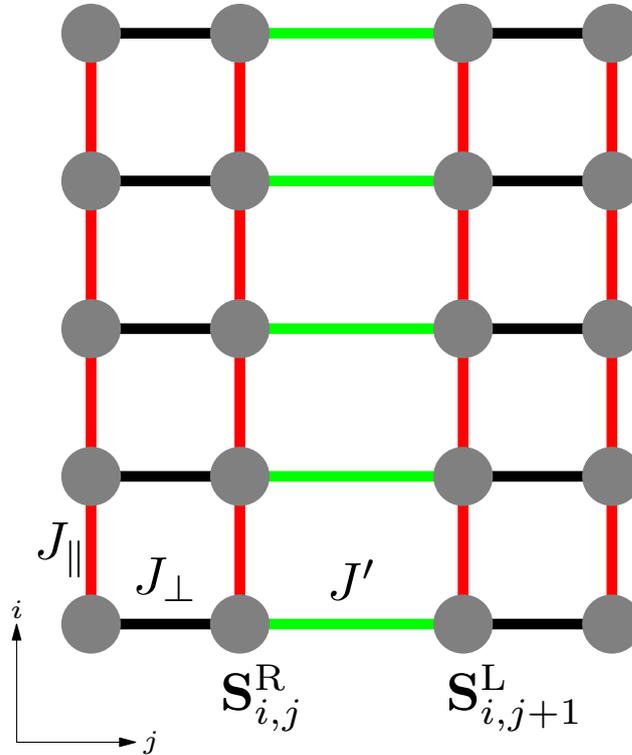


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung zweier gekoppelter Spinleitern. Die grauen Kreise stellen Spins mit $S=1/2$ dar. Die roten Linien stehen für die Holmkopplung J_{\parallel} , die schwarzen Linien für die Sprossenkopplung J_{\perp} und die grünen Linien für die Zwischen-Leiter-Kopplung J' .

Der Hamiltonoperator dieses Modells

$$\mathcal{H}_{\text{gesamt}} = \left(\sum_j \mathcal{H}_{\text{Leiter},j} \right) + \mathcal{H}' \quad (3.3.8)$$

setzt sich zusammen aus den Hamiltonoperatoren der einzelnen Leitern ($\mathcal{H}_{\text{Leiter},j}$), und dem Hamiltonoperator, der die Kopplung der Leitern untereinander beschreibt (\mathcal{H}'). Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird gezeigt, wie der Hamiltonoperator aus Gleichung 3.3.8 mit Hilfe einer geeigneten Näherung diagonalisiert werden kann. Es soll hier erwähnt werden, dass die einzelnen Spinleitern auch frustriert sein können.

3.4 Die Struktur von BCPO

Ein Beispiel für ein Material, das durch gekoppelte frustrierte Spinleitern beschrieben werden kann, stellt der Quantenantiferromagnet BCPO dar. Mit Hilfe von inelastischer Neutronenstreuung wurde das Anregungsspektrum dieser Kristallstruktur analysiert. Aufgrund dieser zeigt das Material interessante Phänomene in seinem Anregungsspektrum auf [6]. In diesem Abschnitt soll zuerst nur auf die Struktur von BCPO eingegangen werden.

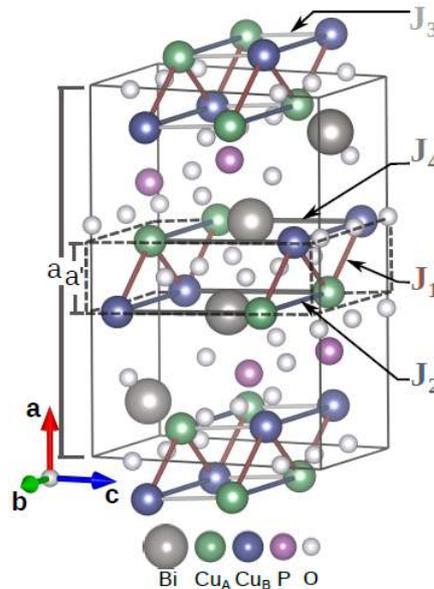


Abbildung 3.4: Kristallstruktur von BCPO. Die orthorhombische Einheitszelle mit der Länge a besteht aus frustrierten Spinleitern mit einer Höhe von $a' = 0.162a$. Um die bereits eingeführten Kopplungsbezeichnungen beizubehalten, werden die hier eingezeichneten Kopplungen wie folgt identifiziert: $J_1 = J_{\parallel}$, $J_2 = J_2$, $J_3 = J'$ und $J_4 = J_{\perp}$. Die Abbildung wurde entnommen aus [6].

Es ist deutlich in Abbildung 3.4 zu erkennen, dass die Struktur von BCPO Spinleitern mit Übernächst-Nachbar-Wechselwirkungen auf den Holmen beinhaltet. Dabei stellen zwei kristallographisch verschiedene Arten an Kupferkationen, Cu_A und Cu_B , die Spins der Spinleiter dar.

Die Spins der Kupferionen derselben Art koppeln mit der Kopplungskonstanten J_2 ent-

Abbildung 3.5 zeigt das Kopplungsschema nach TSIRLIN einer einzelnen Spinleiter. Es ist deutlich zu erkennen, dass die unterschiedlichen Übernächst-Nachbar-Kopplungen J_2 und J'_2 die Spiegelsymmetrie, die durch die Mitte der Sprossen entlang der Holme verläuft, brechen. Dieser Effekt wird in dieser Arbeit vernachlässigt. Es wird davon ausgegangen, dass die beiden Übernächst-Nachbar-Kopplungen J_2 und J'_2 identisch sind.

4 CUT-Methode

Quantenmechanische Vielteilchensysteme mit Korrelationen sind theoretisch aufwändig zu beschreiben. Der Hamiltonoperator eines solchen Systems ist meist sehr kompliziert und nicht mit Hilfe einer einzigen einfachen unitären Transformation diagonalisierbar. Mit Hilfe der CUT-Methode ist es möglich, einen komplexen Hamiltonoperator \mathcal{H} auf ein einfacheres effektives Modell \mathcal{H}_{eff} abzubilden. Dazu wird der Hamiltonoperator \mathcal{H} schrittweise durch das systematische Anwenden von unitären Transformationen vereinfacht bis dieser in einer weniger komplizierten Form vorliegt. Erstmals wurde diese Methode von WEGNER [25] und unabhängig davon von GLAZEK und WILSON [26, 27] präsentiert.

4.1 Konzept der CUT

Mit Hilfe einer unitären Transformation U lässt sich aus einem gegebenen Hamiltonoperator \mathcal{H} ein effektiver Hamiltonoperator \mathcal{H}_{eff} wie folgt bestimmen

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = U\mathcal{H}U^\dagger. \quad (4.1.1)$$

Dabei handelt es sich um einen Basiswechsel. Die Eigenwerte von \mathcal{H} wie z.B. die Dispersion werden nicht geändert. Anstatt einer diskreten unitären Transformation wird bei der CUT-Methode eine kontinuierliche unitäre Transformation $U(l)$ verwendet, die abhängig von dem sogenannten Flussparameter l ist. Es gilt

$$\mathcal{H}(l) = U(l)\mathcal{H}U^\dagger(l) \quad (4.1.2)$$

mit der Anfangsbedingung

$$U(0) = \mathbb{1}. \quad (4.1.3)$$

Wird Gleichung 4.1.2 partiell nach dem Flussparameter differenziert, ergibt sich eine Differentialgleichung erster Ordnung, die Flussgleichung für $\mathcal{H}(l)$

$$\partial_l \mathcal{H}(l) = [\eta(l), \mathcal{H}(l)]. \quad (4.1.4)$$

Hierbei bezeichnet $\eta(l) = (\partial_l U(l)) U^\dagger(l)$ den Generator der CUT. Dieser ist antihermitesch: $\eta(l) = -\eta^\dagger(l)$. Die Lösung dieser Differentialgleichung für $l \rightarrow \infty$ definiert den effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}(\infty) = \mathcal{H}_{\text{eff}}. \quad (4.1.5)$$

Observablen $O(l)$ müssen ebenfalls mit derselben unitären Transformation in die neue Basis umgeschrieben werden. Hier gilt ebenfalls die Flussgleichung

$$\partial_l O(l) = [\eta(l), O(l)] \quad (4.1.6)$$

analog zur Flussgleichung des Hamiltonoperators 4.1.4.

4.2 Generatoren

Der Generator der CUT kontrolliert den Fluss des Hamiltonoperators, siehe Gleichung 4.1.4, und beeinflusst so seine konkrete Gestalt. In diesem Unterkapitel sollen verschiedene Generatoren kurz vorgestellt werden.

4.2.1 Wegner Generator

Für den Generator nach WEGNER η_{Weg} [25] wird der Hamiltonoperator \mathcal{H} in einen diagonalen \mathcal{H}_d und einen nichtdiagonalen Anteil \mathcal{H}_{nd} gemäß

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_{nd} \quad (4.2.7)$$

aufgeteilt. Der Generator ist definiert als

$$\eta_{\text{Weg}} := [\mathcal{H}(l), \mathcal{H}_{nd}(l)] = [\mathcal{H}_d(l), \mathcal{H}_{nd}(l)]. \quad (4.2.8)$$

Die Konvergenz dieses Generators konnte allgemein für endliche Hilberträume bewiesen werden [25, 28].

4.2.2 Teilchenzahlerhaltender Generator

Der teilchenzahlerhaltende Generator (englisch: particle-conserving-generator, kurz: pc-Generator) η_{pc} wurde von MIELKE [29] in Bezug auf Bandmatrizen und unabhängig von KNETTER und UHRIG in Bezug auf Vielteilchensysteme [30] vorgeschlagen. Bei der Formulierung des pc-Generators ist es notwendig, den Hamiltonoperator im Quasiteil-

chenbild zweiter Quantisierung

$$\mathcal{H}(l) = \mathcal{H}^+(l) + \mathcal{H}^0(l) + \mathcal{H}^-(l) \quad (4.2.9)$$

darzustellen¹.

Dabei beinhaltet $\mathcal{H}^+(l)$ die teilchenzahlerhöhenden, $\mathcal{H}^0(l)$ die teilchenzahlerhaltenden und $\mathcal{H}^-(l)$ die teilchenzahlerniedrigenden Terme des Hamiltonoperators².

Der pc-Generator ist definiert als

$$\eta_{\text{pc}} = \mathcal{H}^+(l) - \mathcal{H}^-(l). \quad (4.2.10)$$

Die Banddiagonalität bei MIELKE bzw. die Blockbanddiagonalität bei KNETTER und UHRIG des Anfangshamiltonoperators wird während des Flusses vom pc-Generator erhalten [29, 30]. Das bedeutet, die maximale Anzahl an erzeugten Quasiteilchen bleibt während der Berechnung konstant. Der effektive Hamiltonoperator am Ende der CUT ist blockdiagonal teilchenzahlerhaltend und die Quasiteilchenunterräume nach ihrer Energie sortiert.

Bei der Diagonalisierung eines Hamiltonoperators ist es meist nicht nötig den gesamten Operator zu diagonalisieren, sondern nur bestimmten Unterräume, die durch ihre Anzahl an Quasiteilchen gekennzeichnet sind [20, 31]. Um beispielsweise die Energie des Vakuums, also die Grundzustandsenergie, zu berechnen, reicht es aus, den Unterraum (0), auch 0-Teilchenraum genannt, vom restlichen Hamiltonoperator zu entkoppeln. Im 0-Teilchenraum existieren keine Quasiteilchen. Dieser Unterraum entspricht also dem physikalischen Grundzustand des Systems. Der 0n-Generator [31]

$$\eta_{0\text{n}} = \mathcal{H}_0^+(l) - \mathcal{H}_0^-(l) \quad (4.2.11)$$

ist der simpelste Generator, der nur den 0-Teilchenraum vom restlichen Hamiltonoperator entkoppelt. $\mathcal{H}_0^+(l)$ steht für alle Terme in $\mathcal{H}(l)$, die Quasiteilchen aus dem Vakuum erzeugen, $\mathcal{H}_0^-(l)$ beinhaltet alle Terme, die Zustände mit einer Quasiteilchenanzahl ungleich Null in das Vakuum übergehen lassen.

Soll zusätzlich zur Energie des Vakuums die Energie der niedrigsten elementaren Anregungen, also die Dispersion, berechnet werden, so kann der 1n-Generator

$$\eta_{1\text{n}} = \mathcal{H}_0^+(l) + \mathcal{H}_1^+(l) - \mathcal{H}_0^-(l) - \mathcal{H}_1^-(l) \quad (4.2.12)$$

¹Der formulierte Generator nach MIELKE arbeitet ausschließlich auf Matrixlevel. Der Generator nach KNETTER und UHRIG ist sowohl mittels der zweiten Quantisierung als auch auf Matrixlevel definiert.

²Es ist stets möglich, einen Hamiltonoperator in einem Quasiteilchenbild darzustellen. Jedoch ist diese Darstellung nicht immer anschaulich bzw. von Nutzen.

verwendet werden. Dieser beinhaltet alle Terme in $\mathcal{H}(l)$, die auf das Vakuum oder den Zustand mit einem Quasiteilchen wirken. Der 1n-Generator entkoppelt den 0-Teilchenraum und den 1-Teilchenraum, der den elementaren Anregungen entspricht.

In dieser Arbeit wird bei CUT-Berechnungen ausschließlich der 1n-Generator verwendet.

4.3 CUT-Varianten

Bezüglich der konkreten Durchführung der CUT wurden in der Vergangenheit verschiedene Varianten entwickelt. Bevor die CUT-Methode, die in dieser Arbeit genutzt wurde, vorgestellt wird, werden in diesem Abschnitt zwei andere Varianten kurz vorgestellt [21].

4.3.1 Perturbative CUT

Um die perturbative CUT (kurz: pCUT) [30] für ein System verwenden zu können, muss sich der Hamiltonoperator des Systems als

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + xV \quad (4.3.13)$$

darstellen lassen. Hierbei steht \mathcal{H}_0 für den ungestörten Anteil und V für die Störung des Systems. Der Störparameter wird durch x bezeichnet. Die pCUT ist anwendbar unter zwei Bedingungen:

1. Der ungestörte Hamiltonoperator \mathcal{H}_0 muss ein äquidistantes Spektrum besitzen.

2. Die Störung V muss sich schreiben lassen als: $V = \sum_{m=-N}^N T_m$.

Der Operator T_m erzeugt ($m > 0$) bzw. vernichtet ($m < 0$) insgesamt m Quasiteilchen. Die maximale Anzahl an Quasiteilchen, die die Störung V erzeugt bzw. vernichtet, ist mit N gekennzeichnet.

Die pCUT ist ausschließlich für den pc-Generator definiert, siehe Gleichung 4.2.10.

4.3.2 Selbstähnliche CUT

Bei der Anwendung der selbstähnlichen CUT (kurz: sCUT) [28] gibt es keine Einschränkung für das Spektrum des ungestörten Hamiltonoperators. Bei dieser CUT-Variante wird ein Satz von Operatoren als Basis gewählt. Der gesamte Hamiltonoperator und der

Generator werden als Linearkombination dieser Basisoperatoren aufgefasst. Der Satz an Operatoren bleibt während des Flusses unverändert, nur die Koeffizienten sind abhängig von l und ändern sich. Dadurch reduzieren sich die Flussgleichungen aus 4.1.4 auf ein Differentialgleichungssystem für die Koeffizienten. Beim Berechnen des Kommutators $[\eta(l), \mathcal{H}(l)]$ ist es möglich, dass neue Operatorterme entstehen, die nicht in dem gewählten Operatorsatz vorhanden sind. Deswegen ist es nötig, die Operatorbasis nach einem ausgewählten Schema zu trunkieren. Die Wahl der Operatorbasis und des Generators definiert das resultierende Differentialgleichungssystem der Koeffizienten.

4.4 Verbesserte perturbative CUT

Die verbesserte perturbative CUT (engl: enhanced perturbative CUT, kurz: epCUT) ist eine CUT-Methode, die auf sCUT basiert und mit einer perturbativen Entwicklung kombiniert wurde [21]. Die Idee dieser Methode ist es, alle relevanten Koeffizienten des Hamiltonoperators bis zu einer gewissen Ordnung korrekt zu berechnen. Zuerst ist es notwendig einen Satz an Operatoren $\{A_i\}$ als Basis festzulegen. Der Hamiltonoperator kann dann als

$$\mathcal{H}(l) = \sum_i h_i(l) A_i \quad (4.4.14)$$

geschrieben werden. Die Operatoren bleiben während des Flusses konstant, lediglich die Koeffizienten sind l -abhängig. Der gewählte Generator

$$\eta(l) = \sum_i \eta_i(l) A_i := \sum_i h_i(l) \hat{\eta}[A_i] \quad (4.4.15)$$

wird ebenfalls in dieser Basis dargestellt. $\hat{\eta}[A_i]$ steht für den Superoperator, der das Generatorschema auf die Operatoren A_i anwendet. Nutzt man beispielsweise den pc-Generator, dann erhalten alle Generatorterme, die mehr Quasiteilchen vernichten als sie erzeugen, ein negatives Vorzeichen [32]. Alle Generatorterme, die die Quasiteilchenzahl erhalten, werden zu Null gesetzt.

Werden die beide Darstellungen von $\mathcal{H}(l)$ und $\eta(l)$ in die Flussgleichung 4.1.4 eingesetzt, ergibt sich

$$\sum_i \partial_l h_i(l) A_i = \sum_{j,k} h_j(l) h_k(l) [\hat{\eta}[A_j], A_k]. \quad (4.4.16)$$

Mit Hilfe eines Koeffizientenvergleichs der Basisoperatoren A_i erhält man eine Differentialgleichung für die Koeffizienten $h_i(l)$

$$\partial_l h_i(l) = \sum_{j,k} D_{ijk} h_j(l) h_k(l). \quad (4.4.17)$$

Der Koeffizient D_{ijk} ist im Allgemeinen eine komplexe Zahl, in den meisten Rechnungen aber reell, und wird als Beitrag zum Differentialgleichssystem bezeichnet. Er ist durch

$$[\hat{\eta}[A_i], A_k] = \sum_i D_{ijk} A_i \quad (4.4.18)$$

definiert. Es muss also der Kommutator auf der linken Seite berechnet und dann in der Operatorbasis $\{A_i\}$ entwickelt werden.

Bis zu diesem Punkt ist das Vorgehen der epCUT identisch zu dem der sCUT. Nun soll eine perturbative Lösung der Flussgleichung entwickelt werden, um einen effektiven Hamiltonoperator als Störungsreihe zu erhalten. Dazu muss zuerst der Anfangshamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + xV \quad (4.4.19)$$

in einen ungestörten Hamiltonoperator \mathcal{H}_0 und eine Störung V zerlegt werden. Der Entwicklungsparameter der Störungsreihe wird mit x bezeichnet. Im Gegensatz zur pCUT ist es bei der epCUT nicht notwendig, dass \mathcal{H}_0 ein äquidistantes Spektrum besitzt. Der Formalismus ist sehr allgemein und stellt keine weiteren Bedingungen an das zu untersuchende System. Als Nächstes wird der Hamiltonoperator während des Flusses

$$\mathcal{H}(l) = \sum_{m=0}^n \mathcal{H}^{(m)}, \quad \mathcal{H}^{(m)} \propto x^m \quad (4.4.20)$$

in Ordnungen von x^m mit $m \leq n$ entwickelt. Hierbei steht n für die Ordnung, bis zu der korrekt gerechnet werden soll. Da der Hamiltonoperator, wie in Gleichung 4.4.14 beschrieben, dargestellt werden soll, müssen die Koeffizienten $h_i(l)$ in Ordnungen von x entwickelt werden

$$h_i(l) = \sum_{m=0}^n x^m f_i^{(m)}(l). \quad (4.4.21)$$

Die Werte für $f_i^{(m)}(0)$ sind durch den Anfangshamiltonoperator gegeben. Wird diese Darstellung der $h_i(l)$ in Gleichung 4.4.17 eingesetzt, ergibt sich

$$\partial_l \sum_{m=0}^n x^m f_i^{(m)}(l) = \sum_{j,k} D_{ijk} \sum_{p,q=0}^n x^{p+q} f_j^{(p)}(l) f_k^{(q)}(l). \quad (4.4.22)$$

Durch Vergleich der Potenzen von x folgt

$$\partial_l f_i^{(m)}(l) = \sum_{j,k} \sum_{p+q=m} D_{ijk} f_j^{(p)}(l) f_k^{(q)}(l). \quad (4.4.23)$$

Die Koeffizienten D_{ijk} sind unabhängig von der Ordnung m in x . Sie hängen nur von den algebraischen Zusammenhängen zwischen den Basisoperatoren $\{A_i\}$ ab. Sie müssen nur einmal berechnet werden. Gleichung 4.4.23 definiert eine Hierarchie zwischen den Koeffizienten $f_i^{(m)}(l)$. Diese sind nur abhängig von Koeffizienten derselben oder niedriger Ordnung.

4.4.1 Algorithmus zur Berechnung der Beiträge D_{ijk}

Für die epCUT müssen alle Beiträge D_{ijk} berechnet und eine Operatorbasis $\{A_i\}$ bestimmt werden. Anschließend werden die Flussgleichungen 4.4.23 gelöst. Die Hauptaufgabe der epCUT besteht darin, einen effizienten Algorithmus zu entwickeln, um die $\{A_i\}$ zu bestimmen und die Kommutatoren, die zum Hamiltonoperator in der festgelegten Zielordnung n beitragen, exakt zu berechnen.

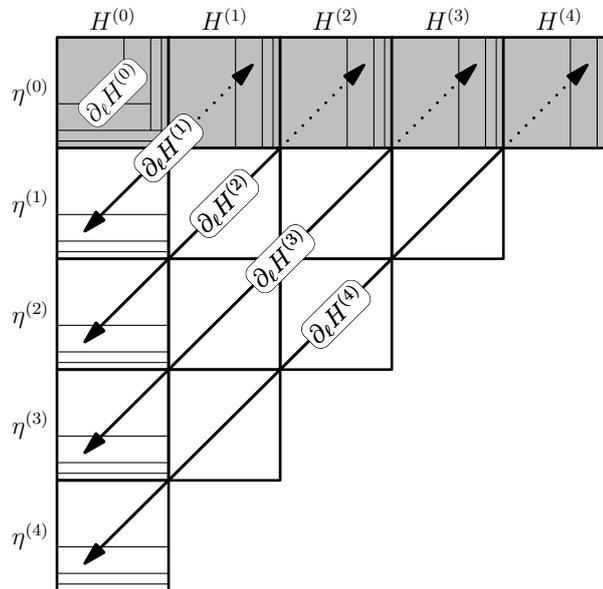


Abbildung 4.1: Darstellung des Algorithmus, um alle Beiträge D_{ijk} für eine gegebene Zielordnung, hier $n = 4$, zu berechnen. Die Kästchen stehen für die Berechnung der Kommutatoren von dem Generator $\eta^{(m)}$ mit dem Hamiltonoperator $\mathcal{H}^{(n)}$, um die Beiträge D_{ijk} zu bestimmen. Die Berechnung für jede Ordnung p basiert auf niedrigeren Ordnungen und benötigt die Berechnung jedes Kommutators mit $p = m + n$. Die Abbildung wurde entnommen aus [21].

Aufgrund der Hierarchie in Abbildung 4.1 basieren Rechnungen der Ordnung m auf den Ergebnissen aus niedrigeren Ordnungen. Die horizontalen und vertikalen Linien in den Kästchen stehen für selbstkonsistente Berechnungen. Das bedeutet, dass der Kommutator $[\eta^{(2)}, \mathcal{H}^{(0)}]$ möglicherweise neue Terme zweiter Ordnung produziert, die dann in $\eta^{(2)}$ berücksichtigt werden müssen. Der Kommutator muss danach nochmals berechnet

werden so lange bis Selbstkonsistenz erreicht ist. Ist der ungestörte Hamiltonoperator \mathcal{H}_0 lokal und zusätzlich von endlicher Dimension, so ist die Selbstkonsistenz garantiert. Das liegt in der Tatsache begründet, dass die Anzahl an Operatoren auf einem begrenzten Cluster selbst begrenzt ist. Besitzt \mathcal{H}_0 Terme, die nicht blockdiagonal sind, müssen die Kommutatoren $[\eta^{(0)}, \mathcal{H}^{(m)}]$ ebenfalls selbstkonsistent berechnet werden. Falls eine der Selbstkonsistenzberechnungen nicht terminiert, müssen zusätzliche Trunkierungsschemata angewandt werden. Bei der Berechnung des Kommutators $[\hat{\eta}[A_j], A_k]$ können neue Operatoren auftreten, die nicht in der Operatorbasis $\{A_i\}$ enthalten sind. Nach ihrem ersten Auftreten müssen sie zu der Operatorbasis hinzugefügt werden. Die minimale Ordnung dieser Operatoren $O_{\min}(A_i)$ ist definiert als die Ordnung, in der der Operator A_i zuerst auftritt.

4.4.2 epCUT mit direkter Auswertung

Das Ziel der epCUT ist es einen effektiven Hamiltonoperator als eine Potenzreihe in x zu berechnen. Eine weitere Methode, die das Differentialgleichssystem der Beiträge D_{ijk} nicht störungstheoretisch auswertet, zeigt bei der Integration robustes Verhalten bis über den Punkt hinaus, wo die Störungsreihe der epCUT wachsende Abweichungen vom exakten Ergebnis aufzeigt [21]. Bei dieser CUT-Variante wird der vorgestellte Algorithmus aus Kapitel 4.4.1 verwendet, um das Differentialgleichungssystem der Beiträge D_{ijk} aufzustellen. Anschließend wird dieses nach den Regeln der epCUT reduziert. Anstatt wie bei der epCUT die Flussgleichungen für die $f_i^{(m)}(l)$, siehe Gleichung 4.4.23, zu lösen, werden nun die Flussgleichungen für die $h_i(l)$, siehe Gleichung 4.4.17, direkt für jedes x numerisch von neuem ausgewertet. Deshalb trägt diese Methode den Namen epCUT mit direkter Auswertung (engl: directly evaluated epCUT, kurz: deepCUT).

Zwischen der deepCUT und der sCUT herrschen große Ähnlichkeiten, jedoch gibt es einen wichtigen Unterschied zwischen den beiden Methoden: Bei der sCUT wird die Basis an Operatoren nach perturbativen Argumenten trunkiert und das vollständige Differentialgleichungssystem der Koeffizienten gelöst. Die deepCUT hingegen reduziert ebenfalls das Differentialgleichungssystem der Beiträge D_{ijk} , um so ein robustest Ergebnis zu erreichen.

Aufgrund der Erfolge der deepCUT verwenden wir diese Methode im weiteren Verlauf dieser Arbeit.

4.4.3 Transformation von Observablen

Wie schon in Kapitel 4.1 erwähnt wurde, müssen Observablen bei einer CUT in die Basis des effektiven Hamiltonoperators transformiert werden. Der Fluss der Observablen

wird analog zum Fluss des Hamiltonoperators, siehe Gleichung 4.1.6, berechnet. Für die Observablen wird ebenfalls eine Operatorbasis $\{B_i\}$ eingeführt. Die Operatoren bleiben während des Flusses unverändert, lediglich die Vorfaktoren $o_i(l)$ ändern sich

$$O(l) = \sum_i o_i(l) B_i. \quad (4.4.24)$$

Durch perturbative Entwicklung der Koeffizienten in Potenzen von x folgt

$$O(l) = \sum_i \sum_{m=0}^n f_i^{(m),\text{obs}}(l) x^m B_i. \quad (4.4.25)$$

Setzt man diese Darstellung der Observablen in die Flussgleichung 4.1.6 ein, ergibt sich ein Differentialgleichungssystem für die Koeffizienten

$$\partial_l o_i(l) = \sum_{jk} D_{ijk}^{\text{obs}} h_j(l) o_k(l). \quad (4.4.26)$$

Die Beiträge D_{ijk}^{obs} ergeben sich aus der Berechnung des Kommutators

$$\sum_i D_{ijk}^{\text{obs}} B_i = [\hat{\eta}[A_j], B_k]. \quad (4.4.27)$$

Dabei soll betont werden, dass die Basisoperatoren $\{B_i\}$ für die Observablen nicht identisch mit den Basisoperatoren $\{A_i\}$ für den Hamiltonoperator sein müssen. Lediglich die Kommutatorrelationen zwischen ihnen müssen bekannt sein. Es wird daran erinnert, dass η aus den Berechnungen des Hamiltonoperators stammt. Mit Hilfe der Darstellung aus Gleichung 4.4.25 folgt für die Koeffizienten $f_i^{(m),\text{obs}}(l)$

$$\partial_l f_i^{(m),\text{obs}}(l) = \sum_{jk} \sum_{p+q=m} D_{ijk}^{\text{obs}} f_j^{(p)}(l) f_k^{(q),\text{obs}}(l) \quad (4.4.28)$$

ein Differentialgleichungssystem, welches ebenfalls durch eine Hierarchie geprägt ist.

Der Algorithmus, der die Beiträge D_{ijk}^{obs} bestimmt, ist sehr ähnlich zu dem aus Kapitel 4.4.1. Die Berechnung läuft analog zum Hamiltonoperator. Ein wesentlicher Unterschied ist, dass die Kommutatoren $[\eta^{(m)}, O^{(0)}]$ nicht selbstkonsistent berechnet werden müssen. Dies liegt in der Tatsache begründet, dass der Generator η nur vom Hamiltonoperator abhängt und nicht von der transformierten Observablen. Lediglich die Kommutatoren $[\eta^{(0)}, O^{(m)}]$ müssen selbstkonsistent gelöst werden.

5 Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung

Anisotrope Wechselwirkungen werden bei der Beschreibung von Materialien meist vernachlässigt, da ihre Struktur kompliziert und ihr Einfluss meist geringer als der der isotropen Wechselwirkungen ist [6]. Ende der 1940er Jahre wurde festgestellt, dass in hauptsächlich antiferromagnetischen Kristallen, z.B. Hämatit $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, ein schwaches ferromagnetisches Moment existiert [33]. NÉEL versuchte dieses Phänomen basierend auf Störstellen-Effekte zu erklären [33]. Ein paar Jahre später publizierte LI eine Theorie, die diese Tatsache mittels antiferromagnetischer Domänen beschreibt. Nach dieser Theorie wären die magnetischen Eigenschaften des gleichen Materials von Kristall zu Kristall unterschiedlich [34]. Es war also wichtig die Frage zu klären, ob der schwache Ferromagnetismus in Hämatit $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ eine intrinsische Eigenschaft des Materials darstellt. DZYALOSHINSKII konnte 1958 mittels einer phänomenologischen Argumentation, die auf Symmetriebetrachtungen basiert, eine Erklärung für die experimentellen Beobachtungen liefern [3]. Dabei benannte er als Ursprung des schwachen Ferromagnetismus in Antiferromagneten eine antisymmetrische Wechselwirkung

$$\mathcal{H}_D = \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2) \quad (5.0.1)$$

zwischen zwei Spins \mathbf{S}_1 und \mathbf{S}_2 . Hierbei ist \mathbf{D} ein Vektor mit reellen Koeffizienten. Diese Wechselwirkung sorgt dafür, dass sich die Spins in Quantenantiferromagneten verkanten, anstatt sich antiparallel anzuordnen. MORIYA gelang es zwei Jahre später die antisymmetrische Wechselwirkung aus Gleichung 5.0.1 theoretisch herzuleiten [4]. Dabei wurde die Anderson Theorie des Superaustauschs um die Spin-Bahn-Kopplung erweitert. Mittels Störungstheorie zweiter Ordnung konnte MORIYA den Ausdruck

$$E_{R,R'}^{(2)} = J_{R,R'} (\mathbf{S}(R) \cdot \mathbf{S}(R')) + \mathbf{D}_{R,R'}^{(2)} \cdot [\mathbf{S}(R) \times \mathbf{S}(R')] + \mathbf{S}(R) \cdot \Gamma_{R,R'}^{(2)} \cdot \mathbf{S}(R') \quad (5.0.2)$$

für die Energie zwischen zwei Spins an den Positionen R und R' herleiten. Hierbei beschreibt der erste Term den Heisenbergschen Austauschterm mit der Kopplungskonstan-

ten $J_{R,R'}$. Der zweite Term steht für die antisymmetrische anisotrope Wechselwirkung zwischen den Spins. Der dritte Term vermittelt die symmetrische anisotrope Wechselwirkung zwischen den beiden Spins mittels des Tensors $\Gamma_{R,R'}^{(2)}$. Für weitere Details wird auf Referenz [33] verwiesen. Die Begriffe antisymmetrisch bzw. symmetrisch beziehen sich auf das Verhalten der jeweiligen Terme beim Vertauschen der beiden wechselwirkenden Spins. Für die antisymmetrische Austauschwechselwirkung gilt die Abschätzung [33]

$$D \approx \frac{\Delta g}{g} J \quad (5.0.3)$$

und für die symmetrische Wechselwirkung die Abschätzung [33]

$$\Gamma \approx \left(\frac{\Delta g}{g} \right)^2 J. \quad (5.0.4)$$

Hierbei steht g für das gyromagnetische Verhältnis, Δg für dessen Abweichung vom dem Wert für ein freies Elektron und J für die Kopplungskonstante der isotropen Wechselwirkung. Die antisymmetrische Wechselwirkung, auch oft als Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung (kurz: DM-Wechselwirkung) bezeichnet, tritt in linearer Ordnung in der Spin-Bahn-Kopplung auf, die symmetrische hingegen ist zweiter Ordnung in der Spin-Bahn-Kopplung.

Die anisotrope Wechselwirkung verschwindet, falls die Symmetrie des Kristalls hoch genug ist. Dies ist z.B. der Fall, wenn nur ein magnetisches Ion pro Einheitszelle existiert und so Punktsymmetrie vorliegt. Bei Kristallen, die pro Einheitszelle zwei magnetische Ionen besitzen und diese so angeordnet sind, dass Punktsymmetrie bezüglich des Mittelpunktes beider Ionen herrscht, verschwindet die DM-Wechselwirkung ebenfalls. Ist die Symmetrie des Kristalls jedoch niedrig genug, so ist die DM-Wechselwirkung endlich. Ihr Haupteffekt besteht darin, die Entartung zwischen den einzelnen magnetischen Anregungsmoden aufzuheben.

Wie schon bereits erwähnt, ist die symmetrische anisotrope Wechselwirkung zweiter Ordnung in der Spin-Bahn-Kopplung und wird deswegen oft in Rechnungen vernachlässigt. SHEKHTMAN *et al.* [35] konnten jedoch zeigen, dass die symmetrische anisotrope Wechselwirkung nicht vernachlässigbar gegenüber der antisymmetrischen ist. Außerdem erläuterten sie, dass die Aufhebung der Modenentartung der Anregungen nur stattfindet, wenn es sich um ein frustriertes System handelt. Bei einem nicht frustrierten System ist es möglich den Hamiltonoperator auf ein Spinmodell abzubilden, welches invariant unter Spinrotation und somit isotrop ist. Bei einem frustrierten System ist dies nicht mehr möglich. Erst die Kombination aus geringer Kristallsymmetrie und Frustration

sorgt dafür, dass die Spinrotationsinvarianz gebrochen ist. Erst dann ist es möglich, dass die DM Wechselwirkung die Entartung der Anregungsmoden aufhebt [35].

5.1 Symmetrische anisotrope Wechselwirkung

Der Zusammenhang zwischen der symmetrischen anisotropen Wechselwirkung, in Gleichung 5.0.2 durch den Tensor Γ ausgedrückt, und der antisymmetrischen Wechselwirkung soll in diesem Kapitel hergeleitet werden. Wie bereits im vorherigen Kapitel erwähnt, konnten SHEKHTMAN *et al.* zeigen, dass sich ein nicht frustriertes System mit antisymmetrischer und symmetrischer anisotroper Wechselwirkung

$$\mathcal{H} = J\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 + \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2) + \mathbf{S}_1\Gamma\mathbf{S}_2 \quad (5.1.5)$$

auf ein isotropes Modell in einer gedrehten Basis abgebildet werden kann [35]. Es werden hierbei die beiden wechselwirkenden Spins \mathbf{S}_1 und \mathbf{S}_2 betrachtet. Die isotrope Wechselwirkung zwischen ihnen ist mit J bezeichnet und die antisymmetrische bzw. symmetrische anisotrope Wechselwirkung mit dem Vektor \mathbf{D} bzw. dem Tensor Γ , der spurfrei sein soll. Die Aussage von SHEKHTMAN *et al.* bedeutet konkret, dass der Hamiltonoperator aus der oberen Gleichung äquivalent zu dem Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = J'\mathbf{S}_1\mathbf{S}'_2 \quad (5.1.6)$$

ist. Hierbei steht \mathbf{S}'_2 für den zweiten Spin in einer gedrehten Basis und J' für die veränderte isotrope Wechselwirkung zwischen den beiden Spins. Um die Rechnung einfach zu halten, wird die z -Achse als Rotationsachse für den zweiten Spin gewählt. Später wird die Richtung der Rotationsachse wieder verallgemeinert. Der Zusammenhang zwischen den beiden Spins ist durch eine Rotation um den Winkel φ

$$\mathbf{S}'_2 = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{S}_2 \quad (5.1.7)$$

gegeben. Hierbei wird im Uhrzeigersinn gedreht. Durch Einsetzen von Gleichung 5.1.7 in Gleichung 5.1.6 ergibt sich

$$\mathcal{H} = J' \cos(\varphi) \mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 + J' \cos(\varphi) \left(\frac{1}{\cos(\varphi)} - 1 \right) S_1^z S_2^z + J' \sin(\varphi) \vec{e}_z \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2). \quad (5.1.8)$$

Mit den Ersetzungen $J = J' \cos(\varphi)$ und $\mathbf{D} = J' \sin(\varphi) \vec{e}_z$ lässt sich der Hamiltonoperator auf die Form

$$\mathcal{H} = J\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 + J \left(\sqrt{1 + \frac{\mathbf{D}^2}{J^2}} - 1 \right) S_1^z S_2^z + \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2) \quad (5.1.9)$$

bringen. Mit Hilfe der Annahme, dass der Betrag von \mathbf{D} sehr viel kleiner als J sein soll, kann die Wurzel in erster Ordnung entwickelt werden: $\sqrt{1 + \frac{\mathbf{D}^2}{J^2}} = 1 + \frac{\mathbf{D}^2}{2J^2}$. Von jetzt an verallgemeinern wir wieder. Der Vektor \mathbf{D} zeigt in eine beliebige Richtung, sodass der Hamiltonoperator durch

$$\mathcal{H} = J\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 + \frac{\mathbf{D}^2}{2J} S_1^{\mathbf{D}} S_2^{\mathbf{D}} + \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2). \quad (5.1.10)$$

gegeben ist. Hierbei steht $S_i^{\mathbf{D}}$ für die Komponente des jeweiligen Spins in \mathbf{D} -Richtung. Diese ist durch die Projektion gegeben: $S_i^{\mathbf{D}} = \frac{\mathbf{D}\mathbf{S}_i}{\sqrt{\mathbf{D}^2}}$. Der antisymmetrische Term liegt bereits in der korrekten Form vor, siehe Gleichung 5.1.5. Die beiden anderen Terme müssen noch umgeformt werden, um die Abhängigkeit der einzelnen Tensorkomponenten $\Gamma^{\alpha\beta}$ von \mathbf{D} zu bestimmen. Dazu werden die beiden ersten Terme komponentenweise ausgeschrieben

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha,\beta} S_1^\alpha \left(J\delta^{\alpha\beta} + \frac{D^\alpha D^\beta}{2J} \right) S_2^\beta + \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2). \quad (5.1.11)$$

In Hinblick darauf, dass der symmetrische anisotrope Anteil keinen diagonalen Anteil besitzen soll, d. h. die Komponenten $\Gamma^{\alpha\alpha}$ in Summe Null ergeben, wird die obere Gleichung zu

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha,\beta} S_1^\alpha \left(\left(\underbrace{J + \frac{\mathbf{D}^2}{6J}}_{\tilde{J}} \right) \delta^{\alpha\beta} + \underbrace{\frac{D^\alpha D^\beta}{2J} - \frac{\delta^{\alpha\beta} \mathbf{D}^2}{6J}}_{\Gamma^{\alpha\beta}} \right) S_2^\beta + \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2) \quad (5.1.12)$$

umgeformt. Hierbei ist zu betonen, dass nun die isotrope Kopplung durch \tilde{J} gegeben ist und nicht mehr durch J . Wir nehmen an, dass \mathbf{D} sehr viel kleiner als J ist, sodass gilt $\tilde{J} \approx J$. Deswegen ist der Fehler bei der Skalierung der Γ -Komponenten mit J vernachlässigbar klein. Die Abhängigkeit der einzelnen Komponenten des Tensors Γ ist demnach gegeben durch:

$$\Gamma_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{D_{ij}^\alpha D_{ij}^\beta}{2J_{ij}} - \frac{\delta^{\alpha\beta} \mathbf{D}_{ij}^2}{6J_{ij}}. \quad (5.1.13)$$

Hierbei ist zu beachten, dass das obere Ergebnis schon auf alle Kopplungen erweitert wurde. In dieser Arbeit besitzen die Komponenten, die sich auf Sprossen beziehen, den Index 0, d.h. J_0 , \mathbf{D}_0 und $\Gamma_0^{\alpha\beta}$ gehören zu den Sprossen. Die Komponenten, die zu den Nächst-Nachbar-Bonds gehören, erhalten den Index 1, also J_1 , \mathbf{D}_1 und $\Gamma_1^{\alpha\beta}$, und die Komponenten der Übernächst-Nachbar-Bonds besitzen den Index 2, also J_2 , \mathbf{D}_2 und $\Gamma_2^{\alpha\beta}$.

5.2 Auswahlregeln nach Moriya

Es ist noch zu klären, in welche Richtung der Vektor \mathbf{D} aus der DM-Wechselwirkung zeigen kann. Diese Richtung ist durch die Kristallsymmetrien eingeschränkt. MORIYA stellte die Auswahlregeln auf, indem er zwei wechselwirkende Ionen, und damit Spins, betrachtete [33]. Diese Regeln sollen in den folgenden Unterkapiteln anhand von Beispielen erläutert werden. Die beiden wechselwirkenden Ionen werden mit A und B gekennzeichnet [36].

5.2.1 Inversionssymmetrie

Wird eine Punktspiegelung um den Mittelpunkt der Verbindung \overline{AB} der beiden Spins A und B durchgeführt und das System geht in sich selbst über, liegt Inversionssymmetrie vor. Die erste Regel von MORIYA besagt, dass in diesem Fall keine DM-Wechselwirkung zwischen den Spins A und B existiert, also gilt: $\mathbf{D} = 0$.

Diese Tatsache lässt sich einfach erklären. Der anisotrope Einfluss von einem Ion 1 auf ein Ion 2 wird durch ein drittes Ion, was sich räumlich in der entgegengesetzten Richtung zu Ion 1 befindet, kompensiert. Dieser Fall ist also identisch zu dem ohne Umgebung. Die nebenstehende Abbildung soll diese Situation verdeutlichen. Die beiden wechselwirkenden Spins A und B sind rot gekennzeichnet, die Spins, die die isotrope Umgebung darstellen durch blaue Kugeln. Die Verbindungsstrecke der

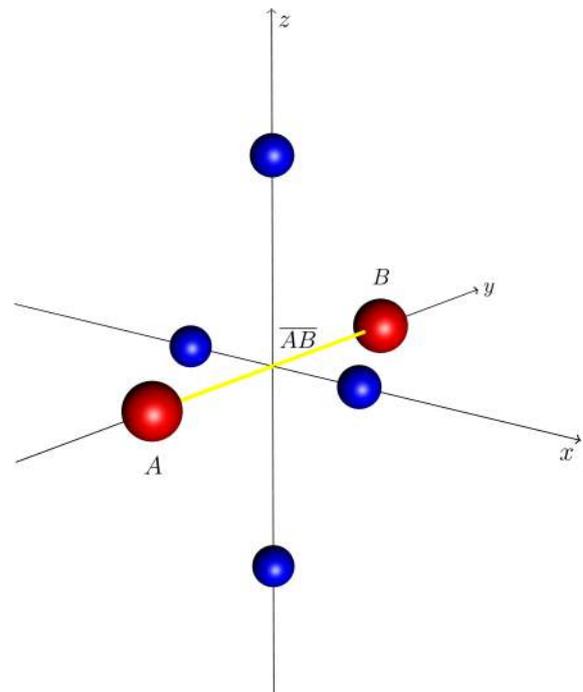


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit Inversionssymmetrie bezüglich des Mittelpunktes der Strecke \overline{AB} .

Spins A und B ist gelb gekennzeichnet.

5.2.2 Senkrechte Spiegelebene

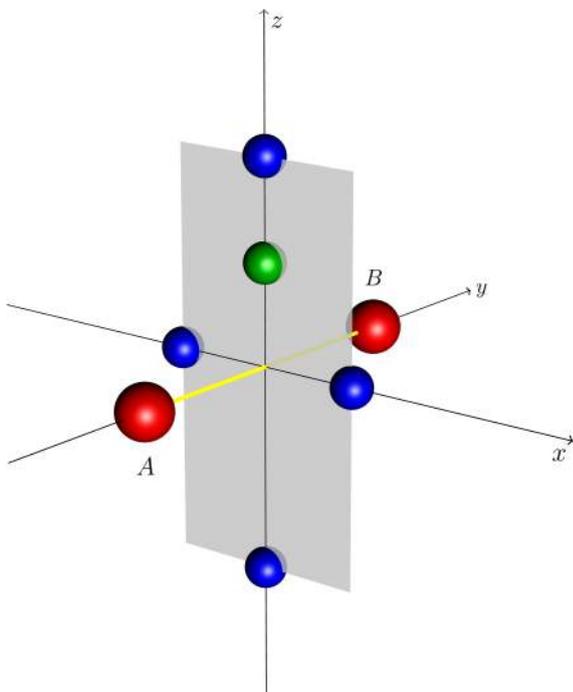


Abbildung 5.2: Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit einer Spiegelebene senkrecht zur Strecke \overline{AB} , die durch den Mittelpunkt der Strecke verläuft.

Ausgehend von der inversionssymmetrischen Anordnung aus Unterkapitel 5.2.1 wird nun ein Ion, bzw. ein Spin, zusätzlich auf der z -Achse positioniert. Dieser ist in der nebenstehenden Abbildung durch eine grüne Kugel gekennzeichnet. Diese Anordnung der Spins hat zur Folge, dass nun die Inversionssymmetrie bezüglich des Mittelpunktes von \overline{AB} gebrochen ist. Eine Spiegelung an der xy -Ebene ist durch den zusätzlichen Spin nicht mehr gegeben. Jedoch ist das System noch immer invariant unter einer Spiegelung an einer Ebene, die senkrecht auf der Strecke \overline{AB} steht und durch dessen Mittelpunkt verläuft. Diese Spiegelebene ist in der nebenstehenden Abbildung durch eine graue Fläche angedeutet. Die zweite Auswahlregel nach MORIYA besagt, dass der Vektor \mathbf{D} in diesem Fall in der Spiegelebene liegt bzw. senkrecht auf der Strecke \overline{AB} steht.

5.2.3 Parallele Spiegelebene

Ausgehend von Abbildung 5.1 werden zwei Spins zu der Anordnung hinzugefügt. Die zusätzlichen Spins, hier grün gekennzeichnet, sorgen dafür, dass wiederum die Inversionssymmetrie bezüglich des Mittelpunktes von \overline{AB} gebrochen ist. Es existiert jedoch eine Spiegelebene, die entlang der Strecke \overline{AB} verläuft. MORIYAS dritte Auswahlregel besagt, dass in diesem Fall der Vektor \mathbf{D} senkrecht auf der Spiegeleben steht. Bezogen auf die nebenstehende Abbildung zeigt \mathbf{D} in $\pm x$ -Richtung.

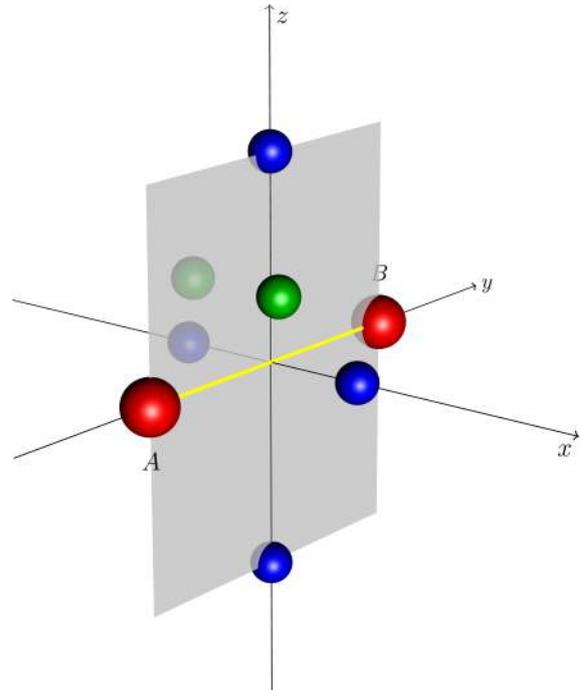


Abbildung 5.3: Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit einer Spiegelebene auf der Strecke \overline{AB} .

Die dritte Regel nach MORIYA lässt sich auch auf die Anordnung in Abbildung 5.2 anwenden. Zusätzlich zu der bereits erwähnten Spiegelebene existiert auch eine Spiegelebene, die auf \overline{AB} liegt. Die zweite Auswahlregel nach MORIYA aus Kapitel 5.2.2 besagt, dass \mathbf{D} in der xz -Ebene liegt. Durch Anwenden der dritten Regel wird die Orientierung von \mathbf{D} auf die $\pm x$ -Achse festgelegt.

5.2.4 Senkrechte Rotationsachse

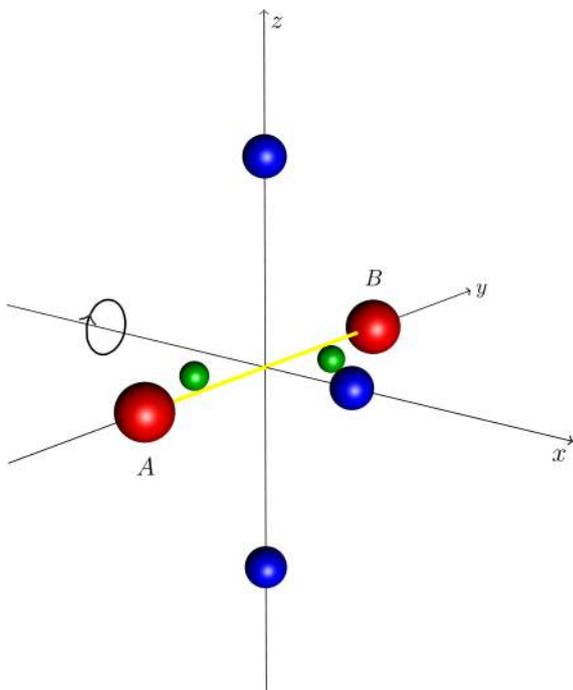


Abbildung 5.4: Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit einer zweifachen Rotationsachse senkrecht zur Strecke \overline{AB} .

In der nebenstehenden Abbildung existieren weder Inversionssymmetrie noch Spiegelebenen. Verglichen mit der Anordnung aus Abbildung 5.1 fehlt der Spin auf der negativen x -Achse. Es sind jedoch auch zwei Spins, durch grüne Kugeln gekennzeichnet, hinzugefügt worden. Einer von ihnen befindet sich leicht oberhalb der y -Achse, der andere dagegen leicht unterhalb der y -Achse. Diese Anordnung sorgt dafür, dass eine zweifache Rotationsachse senkrecht zur Strecke \overline{AB} entlang der x -Achse existiert. Die vierte Regel nach MORIYA besagt in diesem Fall, dass der Vektor \mathbf{D} senkrecht zur zweifachen Rotationsachse liegt.

Diese Regel lässt sich ebenfalls auf die Anordnung in Abbildung 5.2 anwenden. Hierbei

verläuft die zweifache Rotationsachse auf der z -Achse. Nach der vierten Auswahlregel liegt \mathbf{D} folglich auf der x - oder y -Achse. Die zweite Regel legt die Richtung von \mathbf{D} auf die xz -Ebene fest. Also zeigt der Vektor \mathbf{D} in die $\pm x$ -Richtung. Diese Feststellung wurde auch schon im vorherigen Unterkapitel mit Hilfe der zweiten und dritten Auswahlregel gemacht.

5.2.5 Parallele Rotationsachse

Für die fünfte und letzte Auswahlregel nach MORIYA wird die Anordnung aus Abbildung 5.1 so modifiziert, dass der Abstand aller blauen Kugel vom Ursprung identisch ist. Außerdem wird noch ein weiterer Spin, hier grün markiert, auf der negativen y -Achse hinzugefügt. In diesem Fall besitzt die nebenstehende Abbildung eine vierfache Rotationsachse, die auf der y -Achse liegt. Nach der fünften Regel nach MORIYA liegt \mathbf{D} bei einer n -fachen Rotationsachse ($n \geq 2$), die entlang der Strecke \overline{AB} verläuft, parallel zur Verbindung \overline{AB} . Bezogen auf die nebenstehende Abbildung zeigt \mathbf{D} entlang der y -Achse.

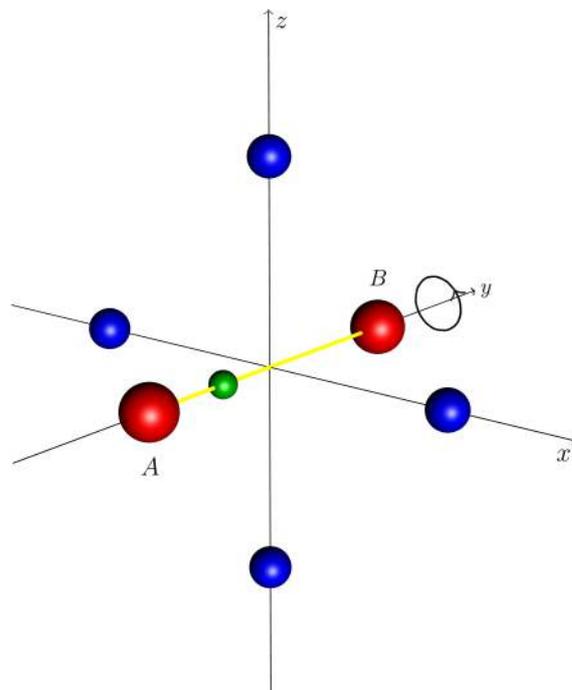


Abbildung 5.5: Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit einer vierfachen Rotationsachse auf der Strecke \overline{AB} .

Die obere Anordnung besitzt ebenfalls eine Spiegelebene, die entlang \overline{AB} liegt.

Nach der dritten Auswahlregel in Kapitel 5.2.3 muss der Vektor \mathbf{D} senkrecht zur Spiegelebene liegen, also in diesem Fall in x -Richtung. Wie bereits erläutert, besagt jedoch die fünfte Regel, dass \mathbf{D} entlang der y -Achse zeigen muss. Damit beide konkurrierenden Symmetrien erfüllt sind, muss $\mathbf{D} = 0$ gelten. Deswegen ist es von großer Wichtigkeit alle herrschenden Symmetrien zu bei dieser Analyse zu berücksichtigen.

5.2.6 Überblick der Auswahlregeln

In der nachfolgenden Tabelle sind die Auswahlregeln von MORIYA kurz zusammengefasst [33].

Symmetrie	Richtung von \mathbf{D}
Inversionssymmetrie	$\mathbf{D} = 0$
Spiegelebene $\perp \overline{AB}$	$\mathbf{D} \parallel$ Spiegelebene
Spiegelebene entlang \overline{AB}	$\mathbf{D} \perp$ Spiegelebene
zweifache Rotationsachse $\perp \overline{AB}$	$\mathbf{D} \perp$ Rotationsachse
n -fache Rotationsachse entlang \overline{AB}	$\mathbf{D} \parallel$ Rotationsachse

Tabelle 5.1: Knappe Zusammenfassung der Auswahlregeln nach MORIYA.

5.3 Symmetrien in BCPO

Um die DM Wechselwirkung für BCPO berechnen zu können, müssen mittels der Auswahlregeln nach MORIYA, siehe Kapitel 5.2, die Richtungen der Vektoren \mathbf{D} für die Sprossen, Nächst-Nachbar- und Übernächst-Nachbar-Bonds bestimmt werden.

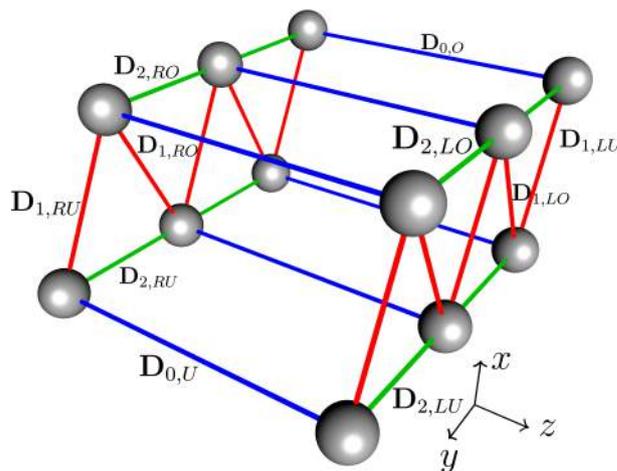


Abbildung 5.6: Schematische Darstellung der Spinleiterstruktur von BCPO. Die Sprossenverbindungen sind in blau eingezeichnet, die Nächst-Nachbar-Kopplungen rot und die Übernächst-Nachbar-Kopplungen sind grün gekennzeichnet. An den verschiedenen Bonds stehen bereits die Bezeichnungen der zugehörigen Dzyaloshinskii-Moriya Vektoren. Eine Einheitszelle besteht aus einer unteren und einer oberen Sprosse.

Die Struktur von BCPO besitzt die folgenden Symmetrien:

1. RS_y : Rotationssymmetrie um π um die y -Achse, platziert in der Mitte der Leiter und Verschiebung um eine halbe Einheitszelle
2. R_x : Rotation um π um die x -Achse, platziert in der Mitte einer Sprosse
3. S_{xy} : Spiegelung an der xy -Ebene, platziert in der Mitte der Leiter
4. S_{xz} : Spiegelung an der xz -Ebene, platziert auf einer Sprosse
5. SS_{yz} : Spiegelung an der yz -Ebene, platziert in der Mitte der Leiter und Verschiebung um eine halbe Einheitszelle

Die Konvention bezüglich der Anordnung der Spinoperatoren im Kreuzprodukt $\mathbf{D}(\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2)$ ist, dass die Spinoperatoren aufsteigend in ihrer y -Koordinate angeordnet werden, d.h. \mathbf{S}_2 hat eine größere y -Koordinate als \mathbf{S}_1 . Für die antisymmetrische Wechselwirkung auf der Sprosse werden die Spinoperatoren aufsteigend nach ihrer z -Koordinate sortiert. Im Folgenden soll nun für jeden Bond mit Hilfe der vorliegenden Symmetrien eine Aussage über das Verhalten der einzelnen \mathbf{D} getroffen werden. Um die Herangehensweise zu verdeutlichen, wird diese am Beispiel des Dzyaloshinskii-Moriya Vektors für die Sprossen ausführlich vorgestellt.

Aufgrund der existierenden Spiegelebene in der xz -Ebene, die auf einer Sprosse platziert ist, müssen die Vektoren $\mathbf{D}_{0,U}$ und $\mathbf{D}_{0,O}$ nach der dritten Regel von MORIYA, Kapitel 5.2.3, entlang der y -Achse zeigen. Hierbei beschreibt der zweite Index, ob es sich um die untere (U) oder die obere (O) Sprosse der Leiter handelt. Mit Hilfe der Symmetrie RS_y lässt sich das relative Vorzeichen zwischen $\mathbf{D}_{0,U}$ und $\mathbf{D}_{0,O}$ festlegen.

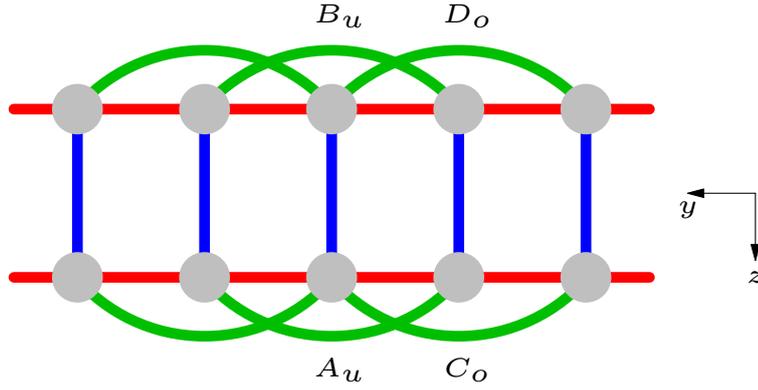


Abbildung 5.7: Draufsicht der Spinleiterstruktur von BCPO aus Abbildung 5.6. Die Sprossen sind aus dieser Sichtweise alternierend obere und untere. Die markierten Spins mit dem Index O stehen für Spins auf einer oberen Sprosse, Spins mit einem U als Index stehen für Spins auf einer unteren Sprosse.

Dazu wird auf den antisymmetrischen Wechselwirkungsterm

$$\mathbf{D}_{0,O} (\mathbf{S}_{D_o} \times \mathbf{S}_{C_o}) = D_{0,O}^y (S_{D_o}^z S_{C_o}^x - S_{D_o}^x S_{C_o}^z) \quad (5.3.14)$$

die Symmetrieoperation RS_y angewandt. Es gilt:

$$RS_y (D_{0,O}^y (S_{D_o}^z S_{C_o}^x - S_{D_o}^x S_{C_o}^z)) = D_{0,O}^y ((-S_{D_o}^z) (-S_{C_o}^x) - (-S_{D_o}^x) (-S_{C_o}^z)).$$

Bei einer Rotation um π um die y -Achse ändern sich die Vorzeichen der x - und z -Komponenten der Spinoperatoren. Der Dzyaloshinskii-Moriya Vektor $\mathbf{D}_{0,O}$ zeigt ausschließlich in y -Richtung und ändert deswegen sein Vorzeichen nicht. Die gestrichelten Indizes der Spinoperatoren sollen andeuten, dass die Spins bei dieser Symmetrietransformation ihre Position ändern. In diesem Fall nimmt der Spin an der Position D_o nach der Rotation und der Verschiebung um eine halbe Einheitszelle in y -Richtung die Position des Spins A_u ein, siehe Abbildung 5.7. Der Spin am Ort C_o sitzt nach Ende der Rotation am Ort B_u . Das bedeutet also, dass gilt:

$$D_{0,O}^y ((-S_{D_o}^z) (-S_{C_o}^x) - (-S_{D_o}^x) (-S_{C_o}^z)) = D_{0,O}^y (S_{A_u}^z S_{B_u}^x - S_{A_u}^x S_{B_u}^z). \quad (5.3.15)$$

Dieser Term muss aufgrund der Symmetrie der Spinleiterstruktur von BCPO dem antisymmetrischen Wechselwirkungsterm auf der Sprosse der Spins an den Positionen A_u und B_u entsprechen. Dieser hat die Form

$$\mathbf{D}_{0,U} (\mathbf{S}_{B_u} \times \mathbf{S}_{A_u}) = D_{0,U}^y (S_{B_u}^z S_{A_u}^x - S_{B_u}^x S_{A_u}^z). \quad (5.3.16)$$

Da dieser Ausdruck identisch zum Ausdruck aus 5.3.15 sein muss, gilt $D_{0,O}^y = -D_{0,U}^y$. Das bedeutet, dass der Dzyaloshinskii-Moriya Vektor der Sprossen \mathbf{D}_0 sein Vorzeichen

von Sprosse zu Sprosse wechselt.

Um das Verhalten der Vektoren \mathbf{D}_1 und \mathbf{D}_2 zu analysieren, muss nach demselben Schema vorgegangen werden. Für jeden Bond muss die antisymmetrische Wechselwirkung aufgestellt werden. Danach muss jede herrschende Symmetrie auf diesen Ausdruck angewandt werden. Durch Identifizieren des Bonds, auf den bei der Symmetrietransformation abgebildet wird, lässt sich eine Aussage über das Verhalten der einzelnen Komponenten des Vektors \mathbf{D} treffen. Außerdem kann die Parität der Vektoren festgestellt werden. Diese sagt aus, ob der Dzyaloshinskii-Moriya Vektor bei der Symmetrietransformation S_{xy} sein Vorzeichen ändert (in diesem Fall ist die Parität ungerade) oder nicht (gerade Parität). In der nachfolgenden Tabelle sind die Parität und das Verhalten der einzelnen Dzyaloshinskii-Moriya Vektoren aufgelistet.

D_{ij}^α	entlang der Holme	Parität
D_0^y	alternierend	ungerade
D_1^x	gleichbleibend	ungerade
D_1^y	alternierend	ungerade
D_2^x	gleichbleibend	ungerade
D_2^z	alternierend	gerade

Tabelle 5.2: Verhalten der \mathbf{D} -Vektoren entlang der Holme der Leiter und bezüglich einer Spiegelung in der Mitte einer Sprosse. Nicht aufgeführte Komponenten besitzen aufgrund von Symmetrieargumenten den Wert Null.

Bei der Komponente D_0^y bezieht sich die Parität nicht auf das Verhalten der Vektor-komponente selbst, sondern auf den dazugehörigen Hamiltonoperator. Das bedeutet, der Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{Sprosse}}^{\text{DM}} = \sum_i D_{0_i}^y (\mathbf{S}_i^{\text{R}} \times \mathbf{S}_i^{\text{L}})$ besitzt ungerade Parität. In dem nachfolgenden Kapitel soll darauf näher eingegangen werden.

Teil II

Ergebnisse der Arbeit

6 Berechnung der Dispersionen

In diesem Kapitel wird beschrieben, wie die Dispersion der Triplon-Moden von BCPO bestimmt wird und wie sie sich unter Berücksichtigung der antisymmetrischen und symmetrischen DM-Wechselwirkung mittels unserer Näherungsmethode verändert.

Der Fokus dieser Berechnung liegt auf bilinearen Termen, da diese möglicherweise bereits in linearer Ordnung in \mathbf{D} einen Beitrag zur Dispersion liefern. Als Basis nehmen wir die Ergebnisse einer deepCUT für eine einzelne frustrierte Spinleiter, siehe Unterkapitel 3.2. Als Generator wird der 1n-Generator, siehe Unterunterkapitel 4.2.2, verwendet. Die Rechnungen werden bis zur 13. Ordnungen durchgeführt. Der Einfluss der antisymmetrischen und der symmetrischen DM-Wechselwirkung auf die Dispersion wird mittels Störungstheorie im Rahmen einer Mean-Field-Näherung ermittelt. Vor dieser Berechnung muss jedoch zuerst entschieden werden, welche Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und des Γ -Tensors aufgrund von Symmetrieüberlegungen einen Beitrag zur Dispersion liefern können. Bevor wir den Einfluss der DM-Wechselwirkung auf die Dispersion der Anregungen analysieren, wird in dem nachfolgenden Unterkapitel der Effekt der Zwischen-Leiter-Kopplung auf die Dispersion einer isolierten Leiter betrachtet [37].

6.1 Berücksichtigung der Zwischen-Leiter-Kopplung

Wie bereits in Unterkapitel 3.4 erläutert wurde, besteht die Struktur des Quantenantiferromagneten BCPO aus gekoppelten frustrierten Spinleitern. Die Zwischen-Leiter-Kopplung muss bei der Berechnung der Dispersion von BCPO berücksichtigt werden. Als Startpunkt dient hierbei das effektive Modell isolierter Spinleitern, welches durch eine CUT gewonnen werden kann.¹ Das bedeutet, dass der Hamiltonoperator einer einzelnen isotropen Leiter $\mathcal{H}_{\text{Leiter}} = \sum_{k,\alpha} \omega_k^0 t_k^{\alpha,\dagger} t_k^\alpha$ bereits gelöst ist. Die Operatoren $t_k^{\alpha,\dagger}$ bzw. t_k^α erzeugen bzw. vernichten ein Hardcoreboson, also ein Triplon, mit Impuls k und Flavor $\alpha \in \{x, y, z\}$. Die Dispersion einer einzelnen Spinleiter wird mit ω_k^0 bezeichnet.

¹In diesem Kapitel wird abkürzend nur der Begriff Spinleiter verwendet. Selbstverständlich gelten die Näherungen und Rechnungen auch für gekoppelte, frustrierte Spinleitern.

Die CUT führt einen Basiswechsel durch und bildet Observablen analog zum Hamiltonoperator auf effektive Observablen ab, siehe Unterunterkapitel 4.4.3. Die Spinoperatoren $S_i^{\alpha,R}$ und $S_i^{\alpha,L}$ werden von der CUT auf effektive Spinoperatoren

$$S_{i,\text{eff}}^{\alpha,R} := \sum_{\delta=-n}^n a_\delta \left(t_{i+\delta}^{\alpha,\dagger} + t_{i+\delta}^\alpha \right) + \dots \quad (6.1.1)$$

abgebildet [37]. Die drei Punkte stehen für normalgeordnete quadratische und höhere Terme von Triplonoperatoren, die wir im nächsten Schritt vernachlässigen werden. Der Summenindex δ läuft von $-n$ bis n in ganzzahligen Schritten. Hierbei steht n für die Ordnung bis zu der die einzelne Spinleiter von der CUT gelöst wurde. Die effektiven Spinoperatoren auf einer Sprosse i sind nicht mehr lokal, sondern setzen sich aus einer Überlagerung von Triplonoperatoren auf den Sprossen $i-n$ bis $i+n$ zusammen. Die Koeffizienten a_δ geben jeweils die Aufenthaltamplitude des Triplonoperators auf der Sprosse $i + \delta$ an. Diese Koeffizienten werden ebenfalls mit einer CUT berechnet und nehmen mit steigendem δ ab. Anschaulich bedeutet dies, dass Beimischungen über eine große Anzahl von Sprosse hinweg mit einer geringeren Wahrscheinlichkeit $|a_\delta|^2$ vorkommen. Beschränken wir uns auf den linearen Anteil in Triplonoperatoren

$$S_{i,\text{eff}}^{\alpha,R} = \sum_{\delta} a_\delta \left(t_{i+\delta}^{\alpha,\dagger} + t_{i+\delta}^\alpha \right), \quad (6.1.2)$$

so gilt $S_{i,\text{eff}}^{\alpha,L} = -S_{i,\text{eff}}^{\alpha,R}$. Dies liegt an der Tatsache, dass ein Triplonoperator ungerade Parität besitzt, siehe Unterkapitel 2.2.

Von nun an behandeln wir die Triplonoperatoren als freie Bosonen im Rahmen einer Mean-Field-Theorie. Dies ist die zentrale Näherung in dieser Arbeit. Mit Hilfe einer Fouriertransformation

$$t_i^{\alpha,\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikr_i} t_k^{\alpha,\dagger} \quad (6.1.3)$$

$$t_i^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikr_i} t_k^\alpha, \quad (6.1.4)$$

wobei N für die Gesamtanzahl an Sprossen steht und r_i für den Gitterplatz der Sprosse, werden die effektiven Spinoperatoren in den Impulsraum transformiert. In linearer Beschreibung lässt sich $S_{i,\text{eff}}^{\alpha,R}$ nach einer Fouriertransformation zu

$$S(k)_{\text{eff}}^{\alpha,R} = a(k) \left(t_k^{\alpha,\dagger} + t_{-k}^\alpha \right) \quad (6.1.5)$$

umformen. Hierbei gilt

$$a(k) = \sum_{\delta} a_{\delta} e^{ik\delta} = \sum_{\delta} a_{\delta} \cos(k\delta). \quad (6.1.6)$$

Das Betragsquadrat von $a(k)$ entspricht unter den gemachten Näherungen dem statischen Strukturfaktor $S(k)$ [37]. Im zweiten Schritt wurde ausgenutzt, dass die Spinleiter die Relation $a_{\delta} = a_{-\delta}$ aufgrund der herrschenden Spiegelsymmetrie entlang einer Sprosse der Spinleiter erfüllt, siehe Abbildung 3.1. Der Hamiltonoperator aus Gleichung 3.3.8 beschreibt die Kopplung mehrerer Spinleitern und kann auf die Form

$$\mathcal{H}' = -J' \sum_{k,l,\alpha} d_{k,l} \left(t_{k,l}^{\alpha,\dagger} + t_{-k,-l}^{\alpha} \right) \left(t_{k,l}^{\alpha} + t_{-k,-l}^{\alpha,\dagger} \right) \quad \text{mit} \quad d_{k,l} = \cos(2\pi l) a^2(k) \quad (6.1.7)$$

gebracht werden. Dazu werden die Spinoperatoren durch die Darstellung der effektiven Spinoperatoren gemäß Gleichung 6.1.2 ersetzt. Die Operatoren werden anschließend fouriertransformiert. Die Variable l steht für den Wellenvektor senkrecht zur Spinleiter, gemessen in reziproken Gittereinheiten. Im Limes schwacher Kopplungen wird die Hardcoreeigenschaft der Triplonoperatoren des Hamiltonoperators $\mathcal{H}_{\text{Leiter}}$ im Rahmen einer Mean-Field-Theorie vernachlässigt. Deshalb ist es möglich den Hamiltonoperator des gesamten Systems, aus Gleichung 3.3.8 mittels einer Bogoliubov-Transformation zu diagonalisieren. Die renormierte Dispersion des Hamiltonoperators $\mathcal{H}_{\text{gesamt}}$ hat die Form

$$\omega_{k,l} = \sqrt{(\omega_k^0)^2 - 4J'd_{k,l}\omega_k^0}. \quad (6.1.8)$$

6.2 Transformation eines antisymmetrischen Wechselwirkungsterms

In diesem Kapitel wird der Einfluss der antisymmetrischen DM-Wechselwirkung auf die Dispersion von BCPO analysiert. Anhand einer Beispielrechnung wird die verwendete Methode veranschaulicht. Die Grundlagen wurden bereits in Kapitel 3.3 erwähnt. Um den Beitrag der DM-Wechselwirkung zur Dispersion zu berechnen, müssen zuerst die Hamiltonoperatoren für die verschiedenen Bonds (Sprossen, Nächst-Nachbar-Bonds und Übernächst-Nachbar-Bonds) nach folgendem Schema transformiert werden:

1. Der Hamiltonoperator muss in der Basis der Spinoperatoren $S_i^{\alpha,L/R}$ aufgestellt werden.

2. Die Spinoperatoren $S_i^{\alpha,L/R}$ werden mit Hilfe einer deepCUT auf linearer Operatorebene auf effektive Spinoperatoren

$$S_{i,\text{eff}}^{\alpha,R} = \sum_{\delta} a_{\delta} \left(t_{i+\delta}^{\alpha,\dagger} + t_{i+\delta}^{\alpha} \right) = -S_{i,\text{eff}}^{\alpha,L} \quad (6.2.9)$$

abgebildet, siehe Unterkapitel 6.1. Der aufgestellte Hamiltonoperator aus Schritt 1 wird also mit Hilfe dieser Abbildung in einen effektiven Hamiltonoperator, ausgedrückt durch bosonische Operatoren, überführt.

3. Die bosonischen Operatoren werden fouriertransformiert, siehe Gleichungen 6.1.3 und 6.1.4

Nach Durchführen dieser Schritte ist das Ergebnis ein effektiver Hamiltonoperator im Impulsraum k .

Diese Schritte sollen anhand eines Beispiels verdeutlicht werden. Dabei wird der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM}} = \sum_i \sum_{\tau \in \{L,R\}} D_{2_i}^{z,\tau} (\mathbf{S}_i^{\tau} \times \mathbf{S}_{i+2}^{\tau})_z \quad (6.2.10)$$

betrachtet. Der Index τ steht für den linken (L) und den rechten (R) Holm der Spinleiter, der Index i für die Sprosse. Dieser Hamiltonoperator stellt die z -Komponente der antisymmetrischen Wechselwirkung auf den Übernächst-Nachbar-Bonds dar. Die Komponente D_2^z besitzt gerade Parität und ein alternierendes Vorzeichen, siehe Tabelle 5.2. Das bedeutet, es gilt $D_{2_i}^{z,L} = D_{2_i}^{z,R} = D_2^z (-1)^i$. Der Hamiltonoperator kann also durch

$$\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM}} = D_2^z \sum_i (-1)^i \left(S_i^{x,L} S_{i+2}^{y,L} - S_i^{y,L} S_{i+2}^{x,L} + S_i^{x,R} S_{i+2}^{y,R} - S_i^{y,R} S_{i+2}^{x,R} \right) \quad (6.2.11)$$

dargestellt werden. Durch die deepCUT werden die Spinoperatoren auf effektive Spinoperator abgebildet. Dies hat zur Folge, dass der Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM}}$ in einen effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}} = 2D_2^z \sum_i (-1)^i \left(S_{i,\text{eff}}^{x,L} S_{i+2,\text{eff}}^{y,L} - S_{i,\text{eff}}^{y,L} S_{i+2,\text{eff}}^{x,L} \right) \quad (6.2.12a)$$

$$= 2D_2^z \sum_i (-1)^i S_{i,\text{eff}}^{x,L} \left(S_{i+2,\text{eff}}^{y,L} - S_{i-2,\text{eff}}^{y,L} \right) \quad (6.2.12b)$$

überführt wird. Ausgedrückt durch bosonische Operatoren

$$\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}} = 2D_2^z \sum_i \sum_{\delta,\delta'} (-1)^i a_\delta a_{\delta'} \left(t_{i+\delta}^{x,\dagger} + t_{i+\delta}^x \right) \left(t_{i+2+\delta'}^{y,\dagger} + t_{i+2+\delta'}^y - t_{i-2+\delta'}^{y,\dagger} - t_{i-2+\delta'}^y \right) \quad (6.2.13)$$

wird der Hamiltonoperator letztendlich mittels einer Fouriertransformation zu

$$\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}} = 4D_2^z i \sum_k a(k) a(k+\pi) \sin(2k) \left(t_k^{x,\dagger} \left(t_{-k-\pi}^{y,\dagger} + t_{k+\pi}^y \right) - \text{h.c.} \right) \quad (6.2.14)$$

umgeformt. Dabei wurde die Darstellung des Kronecker-Delta

$$\sum_i e^{i(k-k')r_i} = N \delta_{k,k'} \quad (6.2.15)$$

und

$$(-1)^i = e^{\pm i\pi r_i} \quad (6.2.16)$$

verwendet. Der lineare Beitrag der Vektorkomponente D_2^z sorgt also dafür, dass die x -Mode mit Impuls k an die y -Mode mit Impuls $k+\pi$ koppelt und dass die y -Mode mit Impuls k an die x -Mode mit Impuls $k+\pi$ koppelt, siehe Gleichung 6.2.14.

Diese Schritte müssen nun für jeden antisymmetrischen Beitrag der Form $\mathbf{D}_{ij} (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)$ durchgeführt werden. Dabei fällt auf, dass alle weiteren linearen Beiträge verschwinden. Der Grund dafür ist die Parität der \mathbf{D} -Komponenten. Diese ist bei allen Komponente bis auf D_2^z ungerade und sorgt dafür, dass deren Beiträge in unserer Näherung auf linearer Operatorbeschreibung verschwinden. Um dies zu zeigen, betrachten wir die x -Komponente der antisymmetrischen DM-Wechselwirkung auf den Übernächst-Nachbar-Bonds. Der dazugehörige Hamiltonoperator hat die Form

$$\mathcal{H}_{\text{NNN},x}^{\text{DM}} = \sum_i \sum_\tau D_{2_i}^{x,\tau} (\mathbf{S}_i^\tau \times \mathbf{S}_{i+2}^\tau)_x. \quad (6.2.17)$$

Die Komponente D_2^x besitzt ungerade Parität und wechselt ihr Vorzeichen entlang der Sprossen nicht, siehe Tabelle 5.2. Das bedeutet also für den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{NNN},x}^{\text{DM}} = D_2^{x,L} \sum_i \left(S_i^{y,L} S_{i+2}^{z,L} - S_i^{z,L} S_{i+2}^{y,L} \right) + D_2^{x,R} \sum_i \left(S_i^{y,R} S_{i+2}^{z,R} - S_i^{z,R} S_{i+2}^{y,R} \right) \quad (6.2.18a)$$

$$= D_2^{x,L} \sum_i \left(S_i^{y,L} S_{i+2}^{z,L} - S_i^{z,L} S_{i+2}^{y,L} \right) - D_2^{x,L} \sum_i \left(S_i^{y,R} S_{i+2}^{z,R} - S_i^{z,R} S_{i+2}^{y,R} \right). \quad (6.2.18b)$$

Werden die Spinoperatoren durch effektive Spinoperatoren nach Gleichung 6.2.9 ausgetauscht, stellt man fest, dass sich die Beiträge auf dem linken und rechten Holm der

Spinleiter aufheben. Das liegt an der Näherung für die effektiven Spinoperatoren, siehe Gleichung 6.2.9. Nach dieser Näherung gilt: $S_{i,\text{eff}}^{\alpha,L} S_{j,\text{eff}}^{\beta,L} = S_{i,\text{eff}}^{\alpha,R} S_{j,\text{eff}}^{\beta,R}$, mit $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$. Der Beitrag der antisymmetrischen DM-Wechselwirkung auf den Sprossen verschwindet ebenfalls. Dieser hat die Form ²

$$\mathcal{H}_{\text{Sprosse}}^{\text{DM}} = \sum_i D_{0_i}^y (\mathbf{S}_i^{\text{R}} \times \mathbf{S}_i^{\text{L}})_y = \sum_i D_{0_i}^y \left(S_i^{z,\text{R}} S_i^{x,\text{L}} - S_i^{x,\text{R}} S_i^{z,\text{L}} \right).$$

Der effektive Hamiltonoperator, bereits ausgedrückt durch die bosonischen Operatoren, hat die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Sprosse}}^{\text{DM,eff}} &= - \sum_i \sum_{\delta, \delta'} D_{0_i}^y a_\delta a_{\delta'} \left(\left(t_{i+\delta}^{z,\dagger} + t_{i+\delta}^z \right) \left(t_{i+\delta'}^{x,\dagger} + t_{i+\delta'}^x \right) - \left(t_{i+\delta}^{x,\dagger} + t_{i+\delta}^x \right) \left(t_{i+\delta'}^{z,\dagger} + t_{i+\delta'}^z \right) \right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Die Produkte aus den bosonischen Operatoren heben sich weg, da die Indizes δ und δ' denselben Wertebereich durchlaufen und bosonische Operatoren unterschiedlicher Moden vertauschen. Dieses Argument gilt natürlich nur unter der Annahme, dass die Hardcoreeigenschaft der Triplonoperatoren vernachlässigt wird.

6.3 Aufstellen der Dispersion

Ist der Hamiltonoperator \mathcal{H} der DM-Wechselwirkung durch bosonische Operatoren im Impulsraum ausgedrückt, wird sein Einfluss auf die Dispersion der isotropen frustrierten Spinleiter berechnet. Die verwendete Methode wird in diesem Kapitel anhand eines Beispiels erklärt. Der Grundgedanke dieser Methode ist, ein Gleichungssystem aus dem Kommutator

$$[\mathcal{H}, v] = w \tag{6.3.19}$$

für die Operatoren v und w aufzustellen und dieses anschließend zu lösen. Bei den Operatoren v und w handelt es sich um eine Linearkombination aus bosonischen Operatoren mit spezifischen Vorfaktoren v_i bzw. w_i . Die Operatorstruktur von v und w ist identisch, lediglich die Vorfaktoren unterscheiden sich. Um das Gleichungssystem auf Operatorebene aus 6.3.19 zu lösen, bilden wir es auf ein Matrixproblem der Form

$$\mathcal{M} \vec{v} = \vec{w} = \lambda \vec{v} \tag{6.3.20}$$

ab. Die Vektoren \vec{v} bzw. \vec{w} enthalten die Koeffizienten v_i bzw. w_i . Die Variable λ steht für die Eigenwerte der Matrix \mathcal{M} . Es wird also letztendlich ein Eigenwertproblem, siehe

²Bei der Anordnung der Spins im Kreuzprodukt orientieren wir uns an Abbildung 5.7.

Gleichung 6.3.20, gelöst, indem die Matrix \mathcal{M} diagonalisiert wird. Die berechneten Eigenwerte λ beinhalten die Dispersion des Hamiltonoperators \mathcal{H} .

Es ist wichtig einen minimalen und vollständigen Ansatz für v zu wählen, der zusätzlich nicht die Translationsinvarianz bricht.³ Das bedeutet die Operatorstruktur von v muss so konstruiert sein, dass beim Kommutieren mit dem Hamiltonoperator \mathcal{H} nur Operatorterm entstehen, die bereits in v bzw. w enthalten sind. Als Beispiel soll der Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}}$ aus Unterkapitel 6.2 gewählt werden. Als ersten Versuch die passende Operatorstruktur für v bzw. w zu finden, bietet sich

$$v = v_1 t_k^{x,\dagger} + v_2 t_{-k}^x \quad (6.3.21)$$

$$w = w_1 t_k^{x,\dagger} + w_2 t_{-k}^x$$

an. Da der Kommutator linear in seinen Argumenten ist, kann der Ansatz für v summandenweise mit $\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}}$ kommutiert werden. Das Berechnen der Kommutatoren

$$\left[\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}}, v_1 t_k^{x,\dagger} \right] = -4D_2^z i \sum_{k'} a(k') a(k' + \pi) \sin(2k') \left[t_{k'}^x \left(t_{-k'-\pi}^y + t_{k'+\pi}^{y,\dagger} \right), t_k^{x,\dagger} \right] \quad (6.3.22a)$$

$$= -4D_2^z i a(k) a(k + \pi) \sin(2k) \left(t_{-k-\pi}^y + t_{k+\pi}^{y,\dagger} \right) v_1 \quad (6.3.22b)$$

$$\left[\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}}, v_2 t_{-k}^x \right] = 4D_2^z i \sum_{k'} a(k') a(k' + \pi) \sin(2k') \left[t_{k'}^{x,\dagger} \left(t_{-k'-\pi}^{y,\dagger} + t_{k'+\pi}^y \right), t_{-k}^x \right] \quad (6.3.22c)$$

$$= 4D_2^z i a(k) a(k + \pi) \sin(2k) \left(t_{k+\pi}^{y,\dagger} + t_{-k-\pi}^y \right) v_2 \quad (6.3.22d)$$

zeigt, dass der Ansatz für v bzw. w nicht vollständig ist, da neue Operatorterm beim Kommutieren mit $\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}}$ entstehen, nämlich $t_{k+\pi}^{y,\dagger}$ und $t_{-k-\pi}^y$. Deshalb muss der Ansatz auf

$$v = v_1 t_k^{x,\dagger} + v_2 t_{k+\pi}^{y,\dagger} + v_3 t_{-k}^x + v_4 t_{-k-\pi}^y \quad (6.3.23)$$

$$w = w_1 t_k^{x,\dagger} + w_2 t_{k+\pi}^{y,\dagger} + w_3 t_{-k}^x + w_4 t_{-k-\pi}^y$$

erweitert werden. Aus Konventionsgründen stehen die Erzeuger in der Summation vor den Vernichtern. Es steht noch aus zu überprüfen, ob die beiden zusätzlich eingefügten Operatoren neue Operatorterm beim Kommutieren mit $\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}}$ erzeugen. Die Berech-

³Das Spinleitersystem BCPO ist translationsinvariant. Deswegen soll der Ansatz zum Bestimmen der Dispersion ebenfalls die Translationssymmetrie nicht brechen.

nungen der zwei Kommutatoren

$$\left[\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}}, v_2 t_{k+\pi}^{y,\dagger} \right] = 4D_2^z i a(k) a(k+\pi) \sin(2k) \left(t_k^{x,\dagger} + t_{-k}^x \right) v_2 \quad (6.3.24a)$$

$$\left[\mathcal{H}_{\text{NNN},z}^{\text{DM,eff}}, v_4 t_{-k-\pi}^y \right] = -4D_2^z i a(k) a(k+\pi) \sin(2k) \left(t_k^{x,\dagger} + t_{-k}^x \right) v_4 \quad (6.3.24b)$$

zeigen, dass der Ansatz aus Gleichung 6.3.23 vollständig ist. Nun müssen die Koeffizienten w_i in Abhängigkeit der Koeffizienten v_i ausgedrückt werden. In diesem Fall gelten die Zusammenhänge

$$w_1 = 4D_2^z i a(k) a(k+\pi) \sin(2k) (v_2 - v_4) \quad (6.3.25a)$$

$$w_2 = 4D_2^z i a(k) a(k+\pi) \sin(2k) (v_3 - v_1) \quad (6.3.25b)$$

$$w_3 = 4D_2^z i a(k) a(k+\pi) \sin(2k) (v_2 - v_4) \quad (6.3.25c)$$

$$w_4 = 4D_2^z i a(k) a(k+\pi) \sin(2k) (v_3 - v_1). \quad (6.3.25d)$$

Die Matrix $\mathcal{M}_{D_2^z}$, die das Gleichungssystem $\mathcal{M}_{D_2^z} \vec{v} = \vec{w}$ nach Gleichung 6.3.20 beschreibt, hat mit der Abkürzung $D_2^z(k) = 4D_2^z a(k) a(k+\pi) \sin(2k)$ die Form

$$\mathcal{M}_{D_2^z} = \begin{pmatrix} 0 & iD_2^z(k) & 0 & -iD_2^z(k) \\ -iD_2^z(k) & 0 & iD_2^z(k) & 0 \\ 0 & iD_2^z(k) & 0 & -iD_2^z(k) \\ -iD_2^z(k) & 0 & iD_2^z(k) & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.3.26)$$

Möchte man den linearen Einfluss von D_2^z auf die Dispersion der frustrierten Leiter ermitteln, muss auch für den Hamiltonoperator der frustrierten Leiter eine solche Matrix mit demselben Ansatz für v bzw. w aufgestellt werden. Danach müssen die beiden Matrizen addiert und deren Eigenwerte berechnet werden. Diese entsprechen der gesuchten Dispersion. Aufgrund des Ansatzes, der zu jedem bosonischen Operator t^\dagger auch dessen adjungierten Operator t enthält, treten alle Eigenwerte paarweise mit negativem und positivem Vorzeichen auf, da $[t^\dagger t, t^\dagger] = t^\dagger$ und $[t^\dagger t, t] = -t$ gilt.

Die wesentlichen Punkte dieser Methode sollen im Folgenden nochmals kurz zusammengefasst werden.

1. Es muss ein minimaler abgeschlossener Ansatz für die Operatorstruktur von v und w gefunden werden, der die Translationsinvarianz nicht bricht und Gleichung 6.3.19 erfüllt.

2. Der betrachtete Hamiltonoperator muss mit jedem Operator aus dem Ansatz für v aus Schritt 1 kommutiert werden.
3. Nach jedem Kommutieren werden die Matrixelemente \mathcal{M}_{ij} bestimmt, die den Zusammenhang zwischen den Koeffizienten w_i und v_j beschreiben.
4. Die Eigenwerte der Matrix \mathcal{M} werden bestimmt. Deren positive Eigenwerte beinhalten die Dispersionen der verschiedenen Anregungen des betrachteten Hamiltonoperators.

6.4 Lineare Beiträge zur Dispersion

Wie bereits in Unterkapitel 6.2 erklärt wurde, liefert nur die Komponente D_2^z einen Beitrag zur Dispersion in linearer Ordnung in \mathbf{D} . In diesem Abschnitt wollen wir analysieren, welchen Effekt die Komponente D_2^z auf die Dispersion der isotropen, frustrierten Spinleiter hat. Zuvor ist es nötig die Matrizen $\mathcal{M}_{\text{Leiter}}$ und \mathcal{M}' aufzustellen, die jeweils die resultierenden Zusammenhänge zwischen v und w aus den Kommutatoren $[\mathcal{H}_{\text{Leiter}}, v] = w$ und $[\mathcal{H}', v] = w$ darstellen. Die beiden Hamiltonoperatoren liegen bereits in der Impulsdarstellung der bosonischen Operatoren vor

$$\mathcal{H}_{\text{Leiter}} = \sum_{k,\alpha} \omega_0(k) t_k^{\alpha,\dagger} t_k^\alpha \quad (6.4.27)$$

$$\mathcal{H}' = -J' \sum_{k,\alpha} d_{k,l} \left(t_k^{\alpha,\dagger} + t_{-k}^\alpha \right) \left(t_k^\alpha + t_{-k}^{\alpha,\dagger} \right). \quad (6.4.28)$$

Der Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{Leiter}}$ wurde mit Hilfe einer deepCUT bis zur 13. Ordnung mit dem 1n-Generator gelöst und die Dispersion $\omega_0(k)$ bestimmt. Der Hamiltonoperator \mathcal{H}' , der die Kopplung der einzelnen frustrierten Spinleitern untereinander beschreibt, wurde bereits in Unterkapitel 6.1 hergeleitet. Jedoch unterdrücken wir hier die Summation über den Wellenvektor l , der senkrecht zur Leiter steht, da wir uns auf die Dispersion entlang der Leitern konzentrieren.

Die Hamiltonoperatoren $\mathcal{H}_{\text{Leiter}}$ und \mathcal{H}' müssen nun mit dem Ansatz für v , siehe Gleichung 6.3.23, kommutiert werden. Anschließend werden die Matrizen $\mathcal{M}_{\text{Leiter}}$ und \mathcal{M}' nach dem Prinzip aus Unterkapitel 6.3 aufgestellt. Auf eine ausführliche Rechnung ver-

zichten wir hier und geben lediglich das Endergebnis für die Matrizen an

$$\mathcal{M}_{\text{Leiter}} = \begin{pmatrix} \omega_0(k) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_0(k+\pi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\omega_0(k) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\omega_0(k+\pi) \end{pmatrix} \quad (6.4.29)$$

$$\mathcal{M}' = \begin{pmatrix} -2J'd_{k,l} & 0 & 2J'd_{k,l} & 0 \\ 0 & -2J'd_{k+\pi,l} & 0 & 2J'd_{k+\pi,l} \\ -2J'd_{k,l} & 0 & 2J'd_{k,l} & 0 \\ 0 & -2J'd_{k+\pi,l} & 0 & 2J'd_{k+\pi,l} \end{pmatrix}. \quad (6.4.30)$$

Die Matrizen $\mathcal{M}_{\text{Leiter}}$, \mathcal{M}' und $\mathcal{M}_{D_2^z}$ müssen nun addiert werden. Anschließend werden die Eigenwerte der entstehenden Gesamtmatrix berechnet. Da es sich hier um eine 4×4 -Matrix handelt, ist es möglich die Eigenwerte analytisch zu bestimmen. Diese haben die Form

$$\omega_x(k) = \pm \sqrt{\frac{1}{2}\Omega_1 \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Omega_2^2 + 16\omega_1\omega_2(D_2^z(k))^2}}. \quad (6.4.31)$$

Hierbei gelten die folgenden Ersetzungen:

$$\Omega_1 = \omega_1^2 + 2\omega_1d_1 + \omega_2^2 + 2\omega_2d_2 \quad (6.4.32a)$$

$$\Omega_2 = \omega_1^2 + 2\omega_1d_1 - \omega_2^2 - 2\omega_2d_2 \quad (6.4.32b)$$

$$\omega_1 = \omega_0(k) \quad (6.4.32c)$$

$$\omega_2 = \omega_0(k+\pi) \quad (6.4.32d)$$

$$d_1 = -2J' \cos(2\pi l) a^2(k) \quad (6.4.32e)$$

$$d_2 = -2J' \cos(2\pi l) a^2(k+\pi) \quad (6.4.32f)$$

$$D_2^z(k) = 4D_2^z a(k) a(k+\pi) \sin(2k). \quad (6.4.32g)$$

Insgesamt erhalten wir vier Eigenwerte, wovon zwei negativ und zwei positiv sind. Die beiden positiven Eigenwerte entsprechen den Dispersionsmoden. Es existieren zwei Dispersionsmoden, eine obere Dispersion und eine untere Dispersion. Die Begriffe obere und untere beziehen sich hierbei auf das zweite \pm in Formel 6.4.31. Mit obere ist das positive Vorzeichen gemeint und mit untere entsprechend das negative Vorzeichen. Diese zwei Dispersionsmoden entstehen durch die Komponente D_2^z . Im Fall $D_2^z = 0$ wäre das System isotrop und der gewählte Ansatz für v wäre nicht mehr der minimale Ansatz.⁴ Die berechneten Eigenwerte entsprechen der Dispersion der x -Mode, was bereits mit

⁴In diesem Fall wäre der minimale Ansatz für v bzw. w gegeben durch $v = v_1 t_k^{x,\dagger} + v_2 t_{-k}^x$. Die Eigenwerte der resultierenden 2×2 -Matrix sind durch $\omega(k) = \pm \sqrt{\omega_1^2 + 2\omega_1 d_1}$ gegeben und für jede Mode gleich.

dem Index bei $\omega_x(k)$ angedeutet wurde. Die Begründung dafür liegt im gewählten Ansatz für v . Dort wurde bei dem bosonischen Erzeuger $t_k^{x,\dagger}$ der Impuls k verwendet und bei dem bosonischen Erzeuger der y -Mode $t_{k+\pi}^{y,\dagger}$ der verschobene Impuls $k + \pi$. Werden die Impulse im Ansatz für v , siehe Gleichung 6.3.23, um π verschoben, tauschen die Moden. Das bedeutet, dass die Dispersion der y -Mode aus der Dispersion der x -Mode hervorgeht, wenn der Impuls k um π verschoben wird, d.h.

$$\omega_y(k) = \omega_x(k + \pi). \quad (6.4.33)$$

Bei der Analyse der D_2^z -Komponente beschränken wir uns auf die Dispersion der x -Mode.

6.4.1 Analyse der D_2^z -Komponente

In diesem Abschnitt werden wir den Effekt der D_2^z -Komponente auf die x -Mode analysieren. Diese Komponente sorgt dafür, dass die Dispersionen der x - und y -Mode nicht mehr unabhängig von einander sind. Ihr Effekt auf die x -Mode und y -Mode ist, dass die Dispersion der ungestörten frustrierten Spinleiter in eine obere und untere Mode aufspaltet. Durch die Alternierung der D_2^z -Komponenten halbiert sich die Brillouinzone. Am Rand $k = \frac{\pi}{2a}$, wobei a für die Gitterkonstante von BCPO steht, treffen die obere und die untere Mode aufeinander, siehe Formel 6.4.31. Es bietet sich daher an, die Moden zu entfalten und in der ersten Brillouinzone darzustellen. Den Verlauf der Moden in der zweiten reduzierten Brillouinzone erhält man durch eine Spiegelung an der Achse $k = \frac{\pi}{2a}$. Die untere Mode besitzt eine W-Form und die obere Mode eine V-Form. Die Energieskala der Dispersion ist die Sprossenkopplung J_0 , siehe Gleichung 3.2.5. Alle Kopplungen werden in Einheiten dieser Kopplung angegeben.

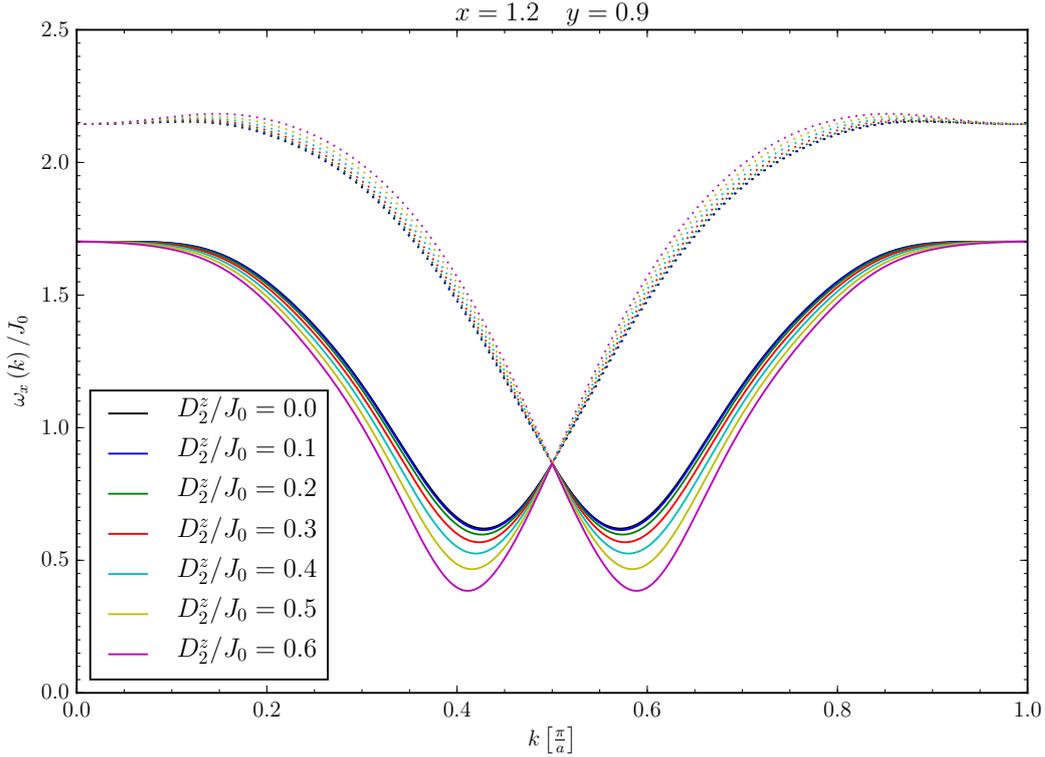


Abbildung 6.1: Darstellung der oberen (gepunktet) und der unteren Mode (durchgezogen) in Abhängigkeit der D_2^z -Komponente. Als Parameter für die isolierte frustrierte Spinleiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die Zwischen-Leiter-Kopplung J' ist auf Null gesetzt.

In Abbildung 6.1 ist zu erkennen, dass die Komponente D_2^z das Minimum beeinflusst. Mit steigendem D_2^z wird die Position des Minimums der unteren Mode bei $k > \frac{\pi}{2a}$ zu höheren Impulsen k verschoben und zusätzlich abgesenkt. Bemerkenswert ist ebenfalls der leichte Anstieg der oberen Mode bei niedrigen Impulsen.

Bis zu diesem Punkt wurde noch keine Aussage über die Dispersion der z -Mode gemacht. Der Grund dafür ist, dass die Komponente D_2^z nicht an die z -Mode koppelt.

6.4.2 Analyse der Zwischen-Leiter-Kopplung J'

In diesem Unterunterkapitel wird der Effekt der Zwischen-Leiter-Kopplung J' auf die Dispersion untersucht. Wie bereits in Unterkapitel 6.4 in einer Fußnote angemerkt wurde, sorgt die Berücksichtigung der Zwischen-Leiter-Kopplung nicht für eine Aufspaltung der Dispersion, da die Wechselwirkung zwischen den Leitern isotrop ist. Die veränderte Dispersion wurde bereits in Unterkapitel 6.1 hergeleitet. Sie hat die Form

$$\omega(k) = \pm \sqrt{(\omega_k^0)^2 - 4J' \cos(2\pi l) a^2(k) \omega_k^0}. \quad (6.4.34)$$

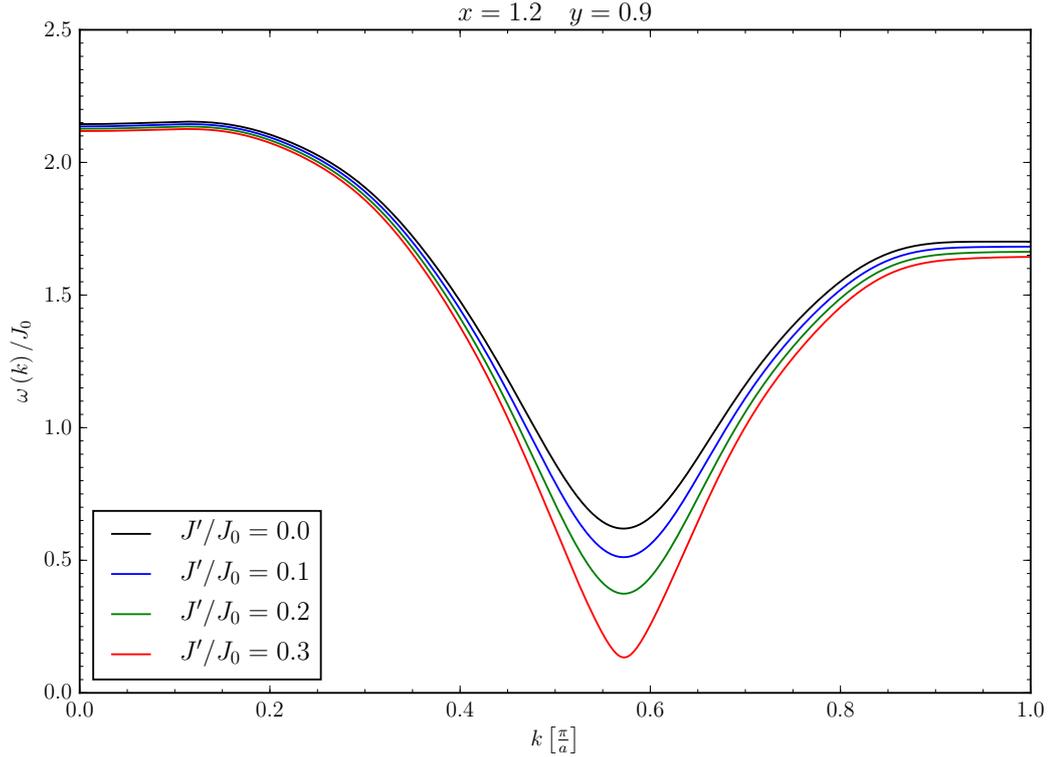


Abbildung 6.2: Darstellung der Dispersion $\omega(k)$ in Abhängigkeit der Zwischen-Leiter-Kopplung J' . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt.

Der Einfluss der Zwischen-Leiter-Kopplung J' ist deutlich zu erkennen. Sie sorgt dafür, dass die Dispersion um das Minimum abgesenkt wird. Die Position des Minimums bleibt jedoch unverändert. Verglichen mit Abbildung 6.1 ist klar erkennbar, dass der Absenkungseffekt der Zwischen-Leiter-Kopplung stärker als der der D_2^z -Komponente ist.

6.5 Quadratische Beiträge zur Dispersion

Lediglich die Komponente D_2^z kann aufgrund ihrer Parität im Rahmen unserer Näherungsmethode einen Beitrag zur Dispersion in linearer Ordnung liefern. In Kapitel 5 wurde bereits erläutert, dass die symmetrische anisotrope Wechselwirkung, vermittelt durch den Tensor Γ , nicht gegenüber der antisymmetrischen anisotropen Wechselwirkung vernachlässigt werden kann. In diesem Abschnitt werden die Beiträge der einzelnen Komponenten $\Gamma_{ij}^{\alpha\beta}$ diskutiert und deren Effekt auf die Dispersion analysiert.

Zuerst muss geklärt werden, welche Komponenten der symmetrischen Wechselwirkung einen Beitrag zur Dispersion liefern können. Ihre Abhängigkeit von den einzelnen **D**-

Komponenten wurde in Unterkapitel 5.1 hergeleitet

$$\Gamma_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{D_{ij}^\alpha D_{ij}^\beta}{2J_{ij}} - \frac{\delta^{\alpha\beta} \mathbf{D}_{ij}^2}{6J_{ij}}.$$

Mit Hilfe der Symmetrieanalyse aus Unterkapitel 5.3 konnten die Parität und das Verhalten des Vorzeichens der einzelnen \mathbf{D} -Komponenten festgelegt werden, siehe Tabelle 5.2. Unter Verwendung dieser Ergebnisse können die Parität und das Verhalten des Vorzeichens der einzelnen Γ -Komponenten festgelegt werden. Um den Einfluss der Γ -Terme

$\Gamma_{ij}^{\alpha\beta}$	entlang der Holme	Parität
Γ_0^{xx}	gleichbleibend	gerade
Γ_0^{yy}	gleichbleibend	gerade
Γ_0^{zz}	gleichbleibend	gerade
Γ_1^{xx}	gleichbleibend	gerade
Γ_1^{xy}	alternierend	gerade
Γ_1^{yy}	gleichbleibend	gerade
Γ_1^{zz}	gleichbleibend	gerade
Γ_2^{xx}	gleichbleibend	gerade
Γ_2^{xz}	alternierend	ungerade
Γ_2^{yy}	gleichbleibend	gerade
Γ_2^{zz}	gleichbleibend	gerade

Tabelle 6.1: Verhalten der Tensorkomponenten $\Gamma_{ij}^{\alpha\beta}$ entlang der Holme der Leiter und bezüglich einer Spiegelung in der Mitte einer Sprosse. Nicht aufgeführte Komponenten verschwinden oder sind bereits durch den äquivalenten Ausdruck $\Gamma_{ij}^{\beta\alpha}$ vertreten.

auf die Dispersion zu bestimmen, muss nach dem beschriebenen Schema aus Unterkapitel 6.2 vorgegangen werden. Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf das Aufstellen der Hamiltonoperatoren und geben direkt das Ergebnis für den effektiven Hamiltonoperator im Impulsraum an.

Zuerst wird die symmetrische DM-Wechselwirkung auf den Sprossen betrachtet. Hierbei haben nur die Beiträge $\Gamma_0^{\alpha\alpha}$ einen endlichen Wert. Sie haben alle dieselbe Parität und dasselbe Vorzeichenverhalten. Folglich reicht es, den Hamiltonoperator allgemein für die Mode α zu transformieren. Dabei ist zu beachten, dass die Werte der $\Gamma_0^{\alpha\alpha}$ -Komponenten je nach Mode unterschiedlich sind. Der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{Sprosse},\alpha\alpha}^\Gamma = \sum_i \Gamma_{0i}^{\alpha\alpha} S_i^{\alpha,L} S_i^{\alpha,R} \quad (6.5.35)$$

wird auf den effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{Sprosse},\alpha\alpha}^{\Gamma,\text{eff}} = -\Gamma_0^{\alpha\alpha} \sum_k a^2(k) \left(t_k^{\alpha,\dagger} t_{-k}^{\alpha,\dagger} + 2t_k^{\alpha,\dagger} t_k^\alpha + t_k^\alpha t_{-k}^\alpha \right) \quad (6.5.36)$$

abgebildet. Als Nächstes werden die Beiträge der symmetrischen DM-Wechselwirkung auf den Nächst-Nachbar-Bonds betrachtet. Wiederum wird der Hamiltonoperator allgemein für die Mode α transformiert. Der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{NN},\alpha\alpha}^\Gamma = \sum_i \sum_\tau \Gamma_{1i}^{\alpha\alpha,\tau} S_i^{\alpha,\tau} S_{i+1}^{\alpha,\tau} \quad (6.5.37)$$

wird in den effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{NN},\alpha\alpha}^{\Gamma,\text{eff}} = 2\Gamma_1^{\alpha\alpha} \sum_k a^2(k) \cos(k) \left(t_k^{\alpha,\dagger} t_{-k}^{\alpha,\dagger} + 2t_k^{\alpha,\dagger} t_k^\alpha + t_k^\alpha t_{-k}^\alpha \right) \quad (6.5.38)$$

überführt.

Der Beiträge der Komponenten Γ_1^{xy} und Γ_1^{yx} sind aufwändiger zu berechnen, da diese Komponenten ein alternierendes Vorzeichenverhalten aufweisen und die x - mit der y -Mode koppeln. Die Werte der beiden Komponenten sind identisch, jedoch unterscheiden sich die dazugehörigen Hamiltonoperatoren in der Operatorstruktur. Der Hamiltonoperator der Komponente Γ_1^{xy}

$$\mathcal{H}_{\text{NN},xy}^\Gamma = \sum_i \sum_\tau \Gamma_{1i}^{xy,\tau} S_i^{x,\tau} S_{i+1}^{y,\tau} \quad (6.5.39)$$

wird auf

$$\mathcal{H}_{\text{NN},xy}^{\Gamma,\text{eff}} = -2\Gamma_1^{xy} \sum_k a(k) a(k+\pi) \left(e^{ik} t_k^{x,\dagger} \left(t_{-k-\pi}^{y,\dagger} + t_{k+\pi}^y \right) + \text{h.c.} \right) \quad (6.5.40)$$

abgebildet. Der Hamiltonoperator der Komponente Γ_1^{yx}

$$\mathcal{H}_{\text{NN},yx}^\Gamma = \sum_i \sum_\tau \Gamma_{1i}^{yx,\tau} S_i^{y,\tau} S_{i+1}^{x,\tau} \quad (6.5.41)$$

führt auf den effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{NN},yx}^{\Gamma,\text{eff}} = 2\Gamma_1^{yx} \sum_k a(k) a(k+\pi) \left(e^{-ik} t_k^{x,\dagger} \left(t_{-k-\pi}^{y,\dagger} + t_{k+\pi}^y \right) + \text{h.c.} \right). \quad (6.5.42)$$

Werden die beiden effektiven Hamiltonoperatoren addiert, ergibt sich

$$\mathcal{H}_{\text{NN},xy}^{\Gamma,\text{eff}} + \mathcal{H}_{\text{NN},yx}^{\Gamma,\text{eff}} = -4\Gamma_1^{xy} i \sum_k a(k) a(k+\pi) \sin(k) \left(t_k^{x,\dagger} \left(t_{-k-\pi}^{y,\dagger} + t_{k+\pi}^y \right) - \text{h.c.} \right). \quad (6.5.43)$$

Abschließend werden die Beiträge der symmetrischen Wechselwirkung auf den Übernächst-Nachbar-Bonds untersucht. Wie bei den anderen Bonds genügt es auch hier, den diagonalen Beitrag allgemein für die Mode α zu berechnen. Der Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{NNN},\alpha\alpha}^{\Gamma} = \sum_i \sum_{\tau} \Gamma_{2i}^{\alpha,\tau} S_i^{\alpha,\tau} S_{i+2}^{\alpha,\tau} \quad (6.5.44)$$

nimmt in den effektiven Triplonoperatoren die Gestalt

$$\Rightarrow \mathcal{H}_{\text{NNN},\alpha\alpha}^{\Gamma,\text{eff}} = 2\Gamma_2^{\alpha\alpha} \sum_k a^2(k) \cos(2k) \left(t_k^{\alpha,\dagger} t_{-k}^{\alpha} + 2t_k^{\alpha,\dagger} t_k^{\alpha} + t_k^{\alpha} t_{-k}^{\alpha} \right) \quad (6.5.45)$$

an. Der Beitrag von Γ_2^{xz} bzw. Γ_2^{zx} verschwindet, da diese Komponenten eine ungerade Parität besitzen.⁵

Der nächste Schritt besteht nun darin, alle transformierten Hamiltonoperatoren mit dem Ansatz aus Gleichung 6.3.23 zu kommutieren. Anschließend muss für jeden Hamiltonoperator die Matrix \mathcal{M} nach dem Prinzip aus Unterkapitel 6.3 aufgestellt werden. Diese werden zu den Matrizen aus Unterkapitel 6.4 addiert. In dieser Arbeit geben wir lediglich die Summe aller aufgestellter Matrizen an

$$\mathcal{M}_{\text{Gesamt}} = \begin{pmatrix} \omega_1 + A(k) & -iB(k) & -A(k) & iB(k) \\ iB(k) & \omega_2 + C(k) & -iB(k) & -C(k) \\ A(k) & -iB(k) & -\omega_1 - A(k) & iB(k) \\ iB(k) & C(k) & -iB(k) & -\omega_2 - C(k) \end{pmatrix}. \quad (6.5.46)$$

Hierbei wurden folgende Bezeichnungen eingeführt

$$A(k) = d_1 + \Gamma_0^{xx}(k) + \Gamma_1^{xx}(k) + \Gamma_2^{xx}(k) \quad (6.5.47a)$$

$$B(k) = \Gamma_1^{xy}(k) - D_2^z(k) \quad (6.5.47b)$$

$$C(k) = d_2 + \Gamma_0^{yy}(k) + \Gamma_1^{yy}(k) + \Gamma_2^{yy}(k). \quad (6.5.47c)$$

⁵Auf eine explizite Rechnung verzichten wir an dieser Stelle und verweisen auf das analoge Beispiel für die Komponente D_2^x aus Unterkapitel 6.2.

Die verwendeten Abkürzungen bei den Koeffizienten $A(k)$, $B(k)$ und $C(k)$ sind hier aufgeführt ⁶

$$\Gamma_0^{xx}(k) = -2\Gamma_0^{xx} a^2(k) \quad (6.5.48a)$$

$$\Gamma_1^{xx}(k) = 4\Gamma_1^{xx} a^2(k) \cos(k) \quad (6.5.48b)$$

$$\Gamma_2^{xx}(k) = 4\Gamma_2^{xx} a^2(k) \cos(2k) \quad (6.5.48c)$$

$$\Gamma_1^{xy}(k) = 4\Gamma_1^{xy} a(k) a(k + \pi) \sin(k) \quad (6.5.48d)$$

$$\Gamma_0^{yy}(k) = -2\Gamma_0^{yy} a^2(k + \pi) \quad (6.5.48e)$$

$$\Gamma_1^{yy}(k) = -4\Gamma_1^{yy} a^2(k + \pi) \cos(k) \quad (6.5.48f)$$

$$\Gamma_2^{yy}(k) = 4\Gamma_2^{yy} a^2(k + \pi) \cos(2k). \quad (6.5.48g)$$

Um abschließend die Dispersion für die x -Mode und damit auch die der y -Mode zu berechnen, müssen die Eigenwerte der Matrix $\mathcal{M}_{\text{Gesamt}}$ bestimmt werden. Wie bereits in Unterkapitel 6.4 erläutert wurde, besitzen zwei der vier Eigenwerte genau den negativen Wert von den anderen zwei. Die Eigenwerte sind

$$\omega_x(k) = \pm \sqrt{\frac{1}{2}\Omega_1(k) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Omega_2^2(k) + 16\omega_1\omega_2(B(k))^2}}. \quad (6.5.49)$$

mit

$$\Omega_1(k) = \omega_1^2 + 2\omega_1 A(k) + \omega_2^2 + 2\omega_2 C(k) \quad (6.5.50a)$$

$$\Omega_2(k) = \omega_1^2 + 2\omega_1 A(k) - \omega_2^2 - 2\omega_2 C(k). \quad (6.5.50b)$$

Die Dispersion der y -Mode ergibt sich wiederum durch eine Verschiebung der x -Mode um π

$$\omega_y(k) = \omega_x(k + \pi). \quad (6.5.51)$$

Es ist nun nötig, die Effekte der einzelnen Γ -Terme auf die Dispersion zu untersuchen. Dabei beschränken wir uns wiederum nur auf die Analyse der Dispersion $\omega_x(k)$.

⁶Die Abkürzungen ω_1 , ω_2 , d_1 , d_2 und $D_2^z(k)$ entsprechen denen aus Gleichungen 6.4.32.

6.5.1 Analyse der Beiträge Γ_0^{xx} und Γ_0^{yy}

Die Komponente D_0^y liefert durch ihre Γ -Terme einen Beitrag zur Dispersion. Betrachtet man nur den Beitrag von Γ_0^{xx} und Γ_0^{yy} , so existiert keine Kopplung zwischen der x - und y -Mode. Beide Moden werden also getrennt voneinander betrachtet. Der Ansatz für v aus Gleichung 6.3.23 ist nicht mehr minimal. Um die Dispersionen der x - und y -Mode unter dem Einfluss von Γ_0^{xx} und Γ_0^{yy} zu berechnen, wird der Ansatz

$$v_\alpha = v_{1,\alpha} t_k^{\alpha,\dagger} + v_{2,\alpha} t_{-k}^\alpha \quad (6.5.52)$$

mit $\alpha \in \{x, y\}$ für jede Mode einzeln verwendet. Werden für die Hamiltonoperatoren $\mathcal{H}_{\text{Leiter}}$ und $\mathcal{H}_{\text{Sprosse},xx}^{\Gamma,\text{eff}}$ bzw. $\mathcal{H}_{\text{Sprosse},yy}^{\Gamma,\text{eff}}$ die Matrizen für das Gleichungssystem $[\mathcal{H}, v_\alpha] = w_\alpha$ aufgestellt und addiert, ergibt sich

$$\mathcal{M}_{\text{Leiter,Sprosse},\alpha\alpha} = \begin{pmatrix} \omega_1 + \Gamma_0^{\alpha\alpha}(k) & -\Gamma_0^{\alpha\alpha}(k) \\ \Gamma_0^{\alpha\alpha}(k) & -\omega_1 - \Gamma_0^{\alpha\alpha}(k) \end{pmatrix}. \quad (6.5.53)$$

Hierbei gelten die Abkürzungen

$$\omega_1 = \omega_0(k) \quad (6.5.54a)$$

$$\Gamma_0^{\alpha\alpha}(k) = -2\Gamma_0^{\alpha\alpha} a^2(k). \quad (6.5.54b)$$

Die Eigenwerte der Matrix sind

$$\omega_\alpha(k) = \pm \sqrt{\omega_1^2 + 2\omega_1 \Gamma_0^{\alpha\alpha}(k)}. \quad (6.5.55)$$

Beide $\Gamma_0^{\alpha\alpha}$ -Komponenten besitzen gerade Parität, was zur Folge hat, dass die Brillouinzone nicht reduziert wird.

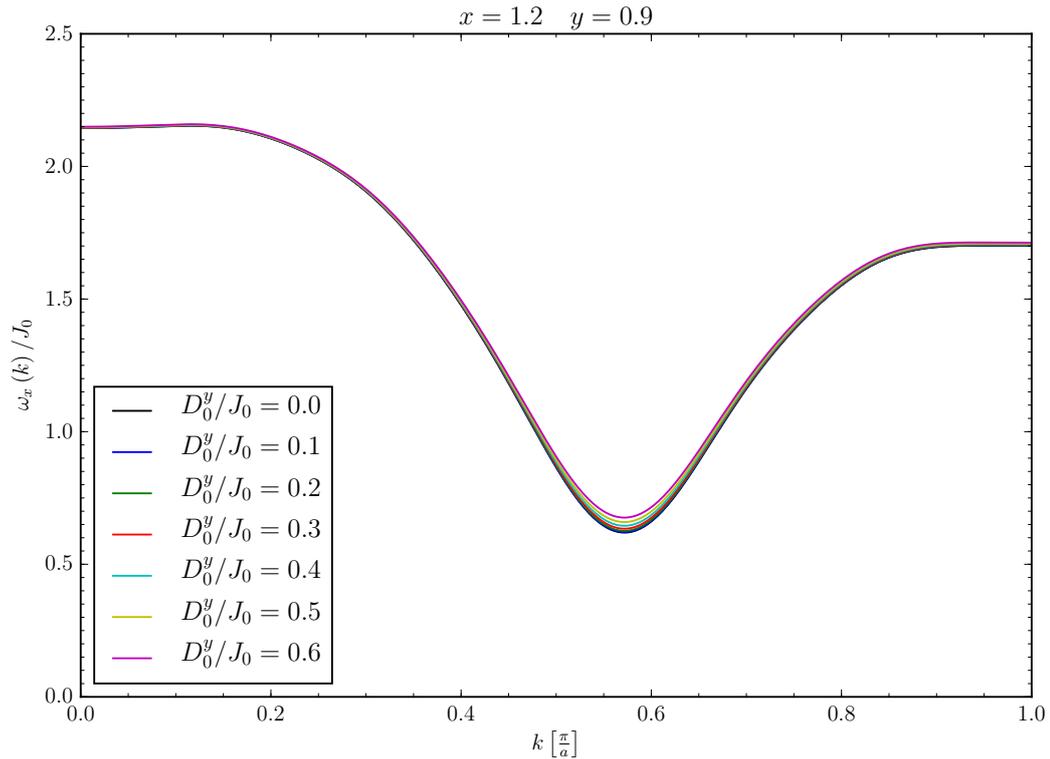


Abbildung 6.3: Darstellung der x -Mode in Abhängigkeit der Komponente D_0^y . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.

Der Effekt der Komponente D_0^y auf die x -Mode ist ein Anheben der Dispersion in der gesamten Brillouinzone. Diese Beobachtung kann mit Hilfe der Formel für Γ , siehe Gleichung 5.1.13, erklärt werden. Der Wert für Γ_0^{xx} ist negativ und sorgt dafür, dass der Term $\Gamma_0^{xx}(k)$, siehe Gleichung 6.5.54b, insgesamt ein positives Vorzeichen besitzt. Deswegen wird die Dispersion angehoben. An dieser Stelle ist zu Betonen, dass in diesem Fall die Dispersion der x - und z -Mode identisch sind. Dies liegt an den gleichen Werten für Γ_0^{xx} und Γ_0^{zz} , siehe Formel 5.1.13, da nur die Komponente D_0^y einen Wert ungleich Null besitzt.

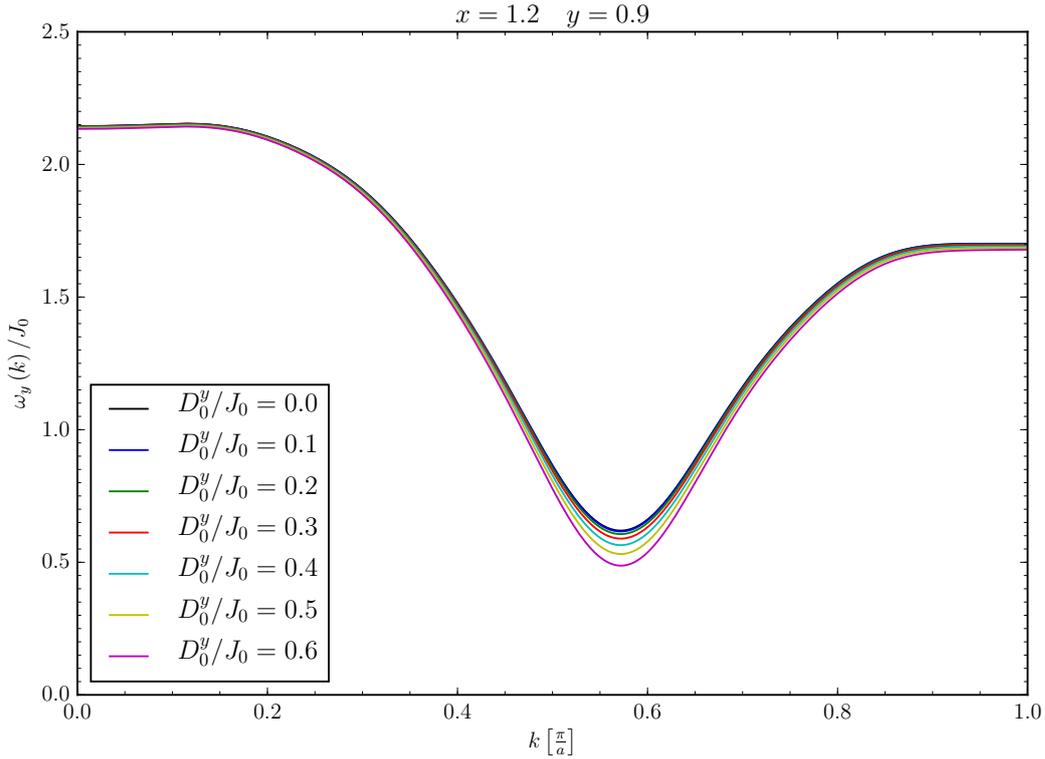


Abbildung 6.4: Darstellung der y -Mode in Abhängigkeit der Komponente D_0^y . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.

Der Effekt der Komponente D_0^y auf die y -Mode ist ein Absenken der Dispersion in dem gesamten Bereich der Brillouinzone. Dies liegt wiederum an dem Vorzeichen von Γ_0^{yy} , welches positiv ist, siehe Gleichung 5.1.13. So ist das Vorzeichen von $\Gamma_0^{yy}(k)$, siehe Gleichung 6.5.54b, negativ. Die Dispersion wird demnach abgesenkt.

Eine Änderung des Vorzeichens von D_0^y hat keinen Effekt auf die Dispersion der x - und y -Mode, siehe Formel 5.1.13. Außerdem ist an den Abbildungen 6.3 und 6.4 zu erkennen, dass das Verhältnis $\frac{D_0^y}{J_0}$ groß, d.h. $\frac{D_0^y}{J_0} \approx 0.5$, gewählt werden muss, um einen sichtbaren Effekt auf die Dispersion zu erreichen. Verglichen mit der Komponente D_2^z , siehe Abbildung 6.1, ist der Effekt von D_0^y deutlich geringer. Dies lässt sich damit begründen, dass D_0^y nur quadratisch in den $\Gamma_0^{\alpha\alpha}$ -Termen die Dispersion beeinflusst.

6.5.2 Analyse der Beiträge Γ_1^{xx} , Γ_1^{yy} und Γ_1^{xy}

Die Komponenten D_1^x und D_1^y tragen ebenfalls erst in zweiter Ordnung in \mathbf{D} durch die Γ_1 -Terme zur Dispersion bei. Zuerst wird in diesem Abschnitt der Einfluss der Komponente Γ_1^{xy} auf die x - und y -Mode untersucht. Diese Komponente sorgt für eine Kopplung unter den Moden mit Impulsen k und $k + \pi$. Um die möglichen Effekte der Komponenten Γ_1^{xx} und Γ_1^{yy} auszuschalten, werde diese Komponenten auf Null gesetzt. Für die Komponenten D_1^x und D_1^y werden zur Einfachheit dieselben Werte gewählt.

Die Alternierung der Γ_1^{xy} -Komponente sorgt dafür, dass die Brillouinzone halbiert wird. Wir zeigen jedoch die beiden Moden in der ersten Brillouinzone, um einen besseren Vergleich mit den vorherigen Abbildungen herstellen zu können.

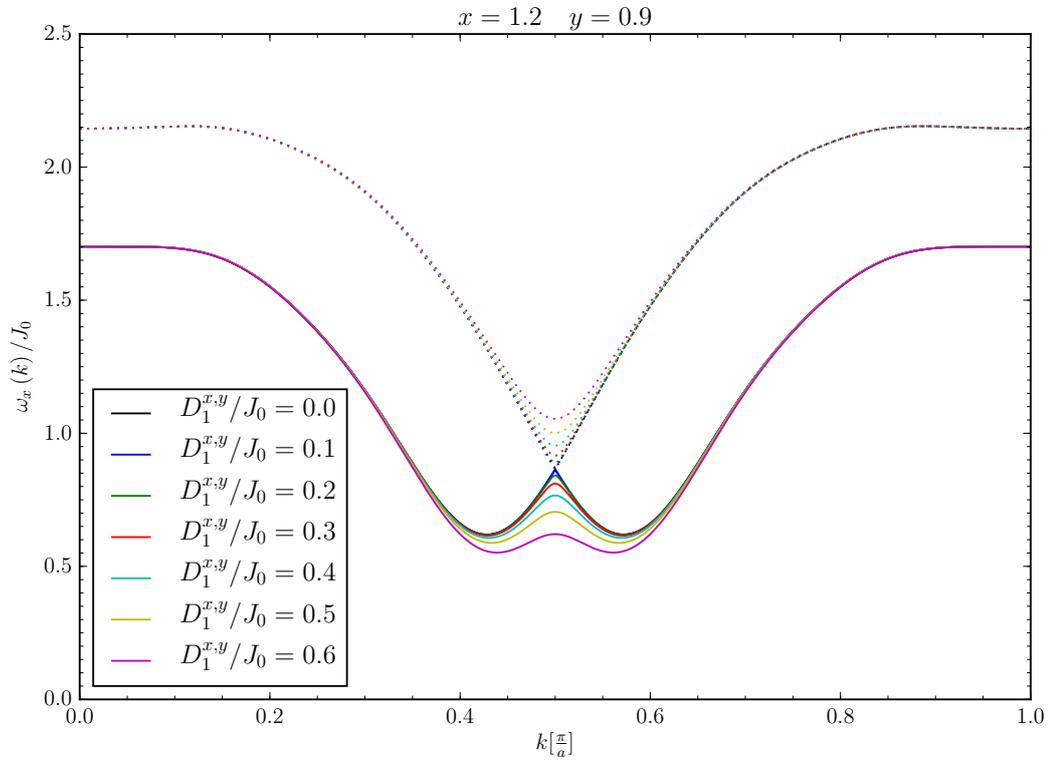


Abbildung 6.5: Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Moden in Abhängigkeit der Komponente Γ_1^{xy} bei identischen Werten von D_1^x und D_1^y . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.

Der Effekt des Terms Γ_1^{xy} ist klar zu erkennen. Die Dispersion wird um den Bereich $k = \frac{\pi}{2a}$ abgesenkt. Mit steigendem Wert von D_1^x und D_1^y wird die Form der ungestörten Dispersion immer weiter abgeflacht. Besonders zu betonen ist, dass der Term Γ_1^{xy} an

dem Punkt $k = \frac{\pi}{2a}$ für eine Aufspaltung der beiden Moden sorgt. Die Komponenten Γ_1^{xx} und Γ_1^{yy} tragen an diesem Punkt nicht zur Aufspaltung bei, da sie in der Dispersion mit einem $\cos(k)$ multipliziert werden, siehe Gleichungen 6.5.48b und 6.5.48f. Der Term Γ_1^{xy} wird in der Dispersion mit einem $\sin(k)$ multipliziert und gibt deshalb bei $k = \frac{\pi}{2a}$ einen Beitrag. Für verschwindende D_2^z -Komponenten ist das Vorzeichen des Term Γ_1^{xy} irrelevant, da dieser in der Dispersion quadriert wird. Andererseits ist das relative Vorzeichen zwischen den Termen Γ_1^{xy} und D_2^z von Bedeutung und hat einen maßgeblichen Einfluss auf die Form der Dispersion, wie wir im weiteren Verlauf dieser Arbeit sehen werden.

Es soll nun der Einfluss der D_1^x -Komponente untersucht werden. Dazu wird der Wert $D_1^y = 0.2J_0$ festgesetzt, um den Effekt von D_1^x deutlicher zu erkennen.

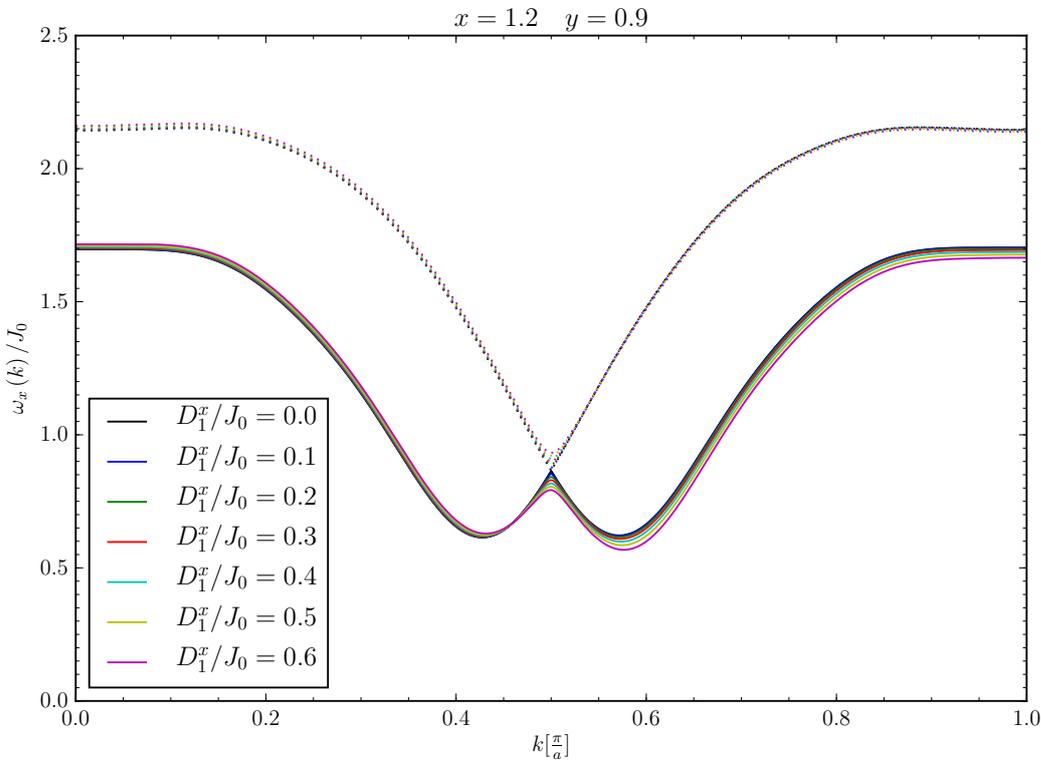


Abbildung 6.6: Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Moden in Abhängigkeit der Komponente D_1^x bei festem Wert $D_1^y = 0.2J_0$. Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.

Die Komponente D_1^x allein beeinflusst lediglich die Terme Γ_1^{xx} und Γ_1^{yy} , siehe Gleichung 5.1.13. Aufgrund der unterschiedlichen Gewichtung dieser Terme in der Dispersion resultiert die Variation der Komponente D_1^x in einer asymmetrischen Verformung der unteren Mode. Das Minimum bei $k > \frac{\pi}{2a}$ wird geringfügig abgesenkt. Im Bereich kleinerer Impulse $k < \frac{\pi}{2a}$ wird die Dispersion um ein geringes Ausmaß angehoben. Diese Beobachtung

kann dadurch erklärt werden, dass die D_1^x -Komponente die Dispersion ausschließlich quadratisch durch die Terme Γ_1^{xx} und Γ_1^{yy} beeinflusst. Außerdem werden die Terme mit einem anderen Faktor gewichtet, siehe Gleichungen 6.5.48b und 6.5.48f. Ein Vorzeichenwechsel von D_1^x würde keine Veränderung mit sich bringen. Die obere Mode zeigt keine sichtbaren Veränderungen auf.

Zum Abschluss soll nun der Einfluss der D_1^y -Komponente analysiert werden. Dazu wird jetzt der Wert $D_1^x = 0.2J_0$ festgesetzt und D_1^y variiert.

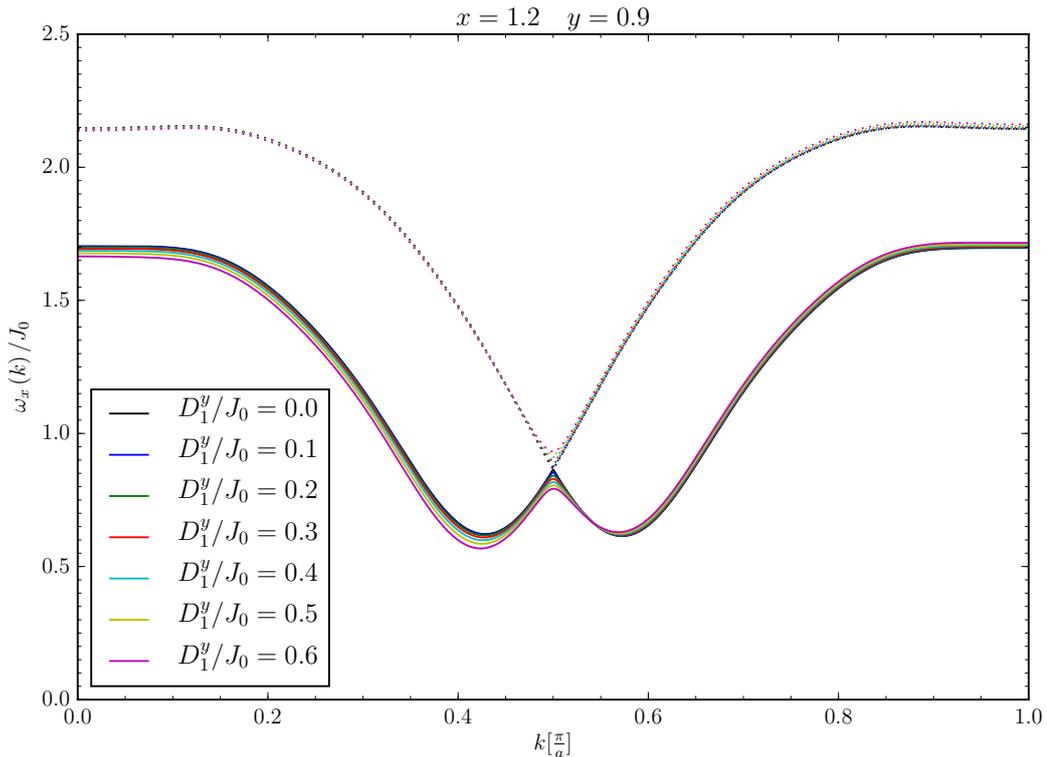


Abbildung 6.7: Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Moden in Abhängigkeit der Komponente D_1^y bei festem Wert $D_1^x = 0.2J_0$. Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.

Die D_1^y -Komponente hat einen Effekt durch die Terme Γ_1^{xx} und Γ_1^{yy} auf die Dispersion. Abbildung 6.7 sieht Abbildung 6.6 sehr ähnlich. Bei genauerer Betrachtung stellt sich heraus, dass die Abbildungen bei einer Spiegelung an der Achse $k = \frac{\pi}{2a}$ ineinander übergehen. Diese Beobachtung lässt sich mit Hilfe von Formel 5.1.13 erklären. Werden die Werte der Komponenten D_1^x und D_1^y getauscht, so tauschen auch die Terme Γ_1^{xx} und Γ_1^{yy} ihren Wert. Dies sorgt dafür, dass die untere Mode im Bereich um das Minimum bei $k > \frac{\pi}{2a}$ in Abbildung 6.7 nun angehoben wird und im Bereich von kleineren Impulswerten $k < \frac{\pi}{2a}$ abgesenkt wird. Das Ändern des Vorzeichens von D_1^y hat ebenfalls keine

Auswirkungen.

6.5.3 Analyse der Beiträge Γ_2^{xx} und Γ_2^{yy}

Die Komponente D_2^x beeinflusst die Dispersion erst durch die $\Gamma_2^{\alpha\alpha}$ -Terme. Sollen nur die Beiträge von Γ_2^{xx} und Γ_2^{yy} diskutiert werden, so sind die x - und y -Mode voneinander entkoppelt. Das bedeutet, dass analog zu Kapitel 6.5.1 vorgegangen werden muss, um den Einfluss der $\Gamma_2^{\alpha\alpha}$ -Terme auf die Dispersion der x - und y -Mode zu berechnen. Der einzige Unterschied zu der Rechnung aus Kapitel 6.5.1 ist, dass $\Gamma_0^{\alpha\alpha}(k)$, siehe Gleichung 6.5.54b, durch $\Gamma_2^{\alpha\alpha}(k)$ mit

$$\Gamma_2^{\alpha\alpha}(k) = 4\Gamma_2^{\alpha\alpha} a^2(k) \cos(2k) \quad (6.5.56)$$

für $\alpha \in \{x, y\}$ ersetzt werden muss. Die Eigenwerte der resultierenden Matrix sind demnach durch

$$\omega_\alpha(k) = \pm \sqrt{\omega_1^2 + 2\omega_1 \Gamma_2^{\alpha\alpha}(k)} \quad (6.5.57)$$

mit $\omega_1 = \omega_0(k)$ gegeben.

Die Γ_2^{xx} und Γ_2^{yy} besitzen gerade Parität, was dazu führt, dass die Brillouinzone nicht reduziert wird.

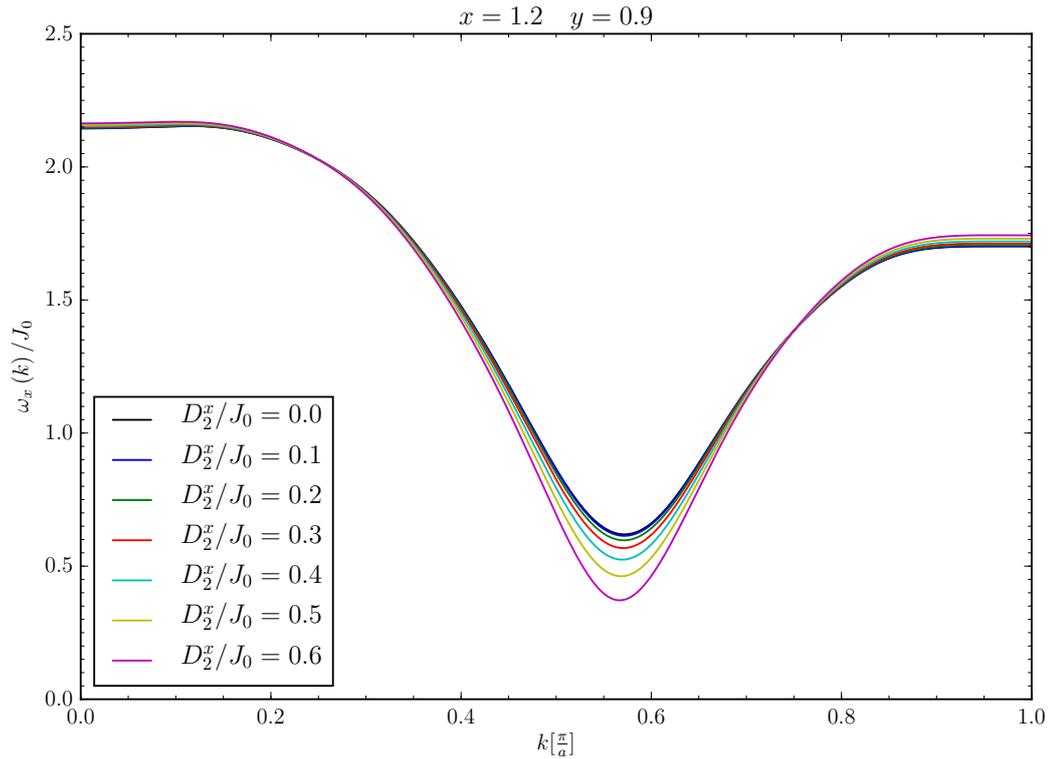


Abbildung 6.8: Darstellung der x -Mode in Abhängigkeit der Komponente D_2^x . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.

Wie Abbildung 6.8 zeigt, sorgt die D_2^x -Komponente für eine Absenkung im Bereich des Minimums. An den Rändern der Brillouinzone wird die Dispersion leicht angehoben. Der Wechsel zwischen Absenken und Anheben der Dispersion ist durch das Vorzeichen von $\cos(2k)$ bedingt. Im Bereich des Minimums ist der Wert für $\cos(2k)$ negativ. Der Wert für Γ_2^{xx} ist für $D_2^z = 0$ immer positiv, siehe Formel 5.1.13. Deswegen wird die Dispersion der x -Mode im Bereich des Minimums abgesenkt. Ein Wechsel des Vorzeichens von D_2^x bringt keine Veränderung mit sich.

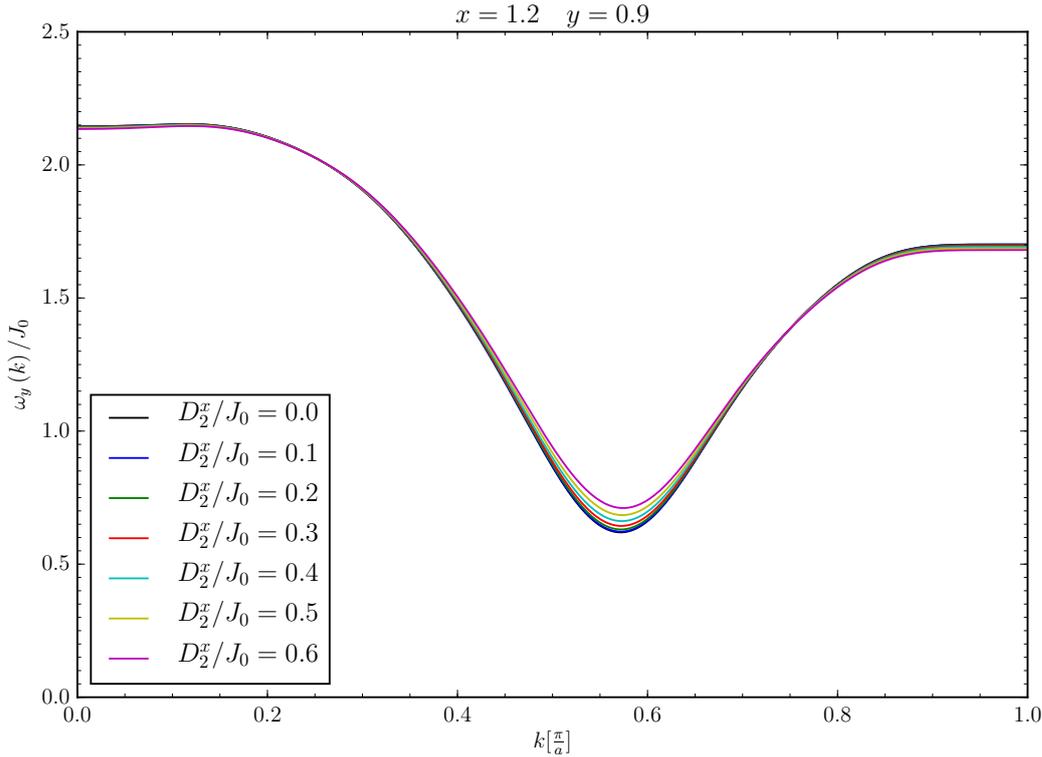


Abbildung 6.9: Darstellung der y -Mode in Abhängigkeit der Komponente D_2^x . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.

Der Effekt der Komponente D_2^x auf die y -Mode ist ein Anheben der Dispersion im Bereich des Minimums, wie in Abbildung 6.9 verdeutlicht wird. Dies liegt an dem Vorzeichen des Terms Γ_2^{yy} . Dieser besitzt nach Gleichung 5.1.13 einen negativen Wert. Damit wird in den Bereichen, wo die x -Mode von Γ_2^{xx} angehoben wird, die y -Mode von dem Γ_2^{yy} -Term abgesenkt und umgekehrt. Die Effekte sind von Γ_2^{yy} sind jedoch geringer als die von Γ_2^{xx} . Dies liegt an dem betragsmäßig kleineren Wert von Γ_2^{yy} , siehe Gleichung 5.1.13. Ein Wechsel des Vorzeichens von D_2^x ändert den Effekt auf die y -Mode nicht. Hier soll betont werden, dass in dem Fall $D_2^z = 0$ die y -Mode und die z -Mode identisch sind, da dann $\Gamma_2^{yy} = \Gamma_2^{zz}$, siehe Formel 5.1.13, gilt.

Im letzten Abschnitt dieses Kapitels soll der Einfluss der Komponente D_2^z untersucht werden. Ihr linearer Effekt wurde bereits in Kapitel 6.4.1 analysiert. Hier wollen wir nur den Einfluss von D_2^z über die Γ -Terme auf die Dispersion der x - und y -Mode betrachten. Dabei fällt auf, dass die Komponenten Γ_2^{xx} und Γ_2^{yy} bei verschwindender D_2^x -Komponente identisch sind, siehe Formel 5.1.13. Das bedeutet also, dass die Dispersionen der x - und y -Mode entartet sind, wenn nur die der quadratische Beitrag von D_2^z betrachtet wird.

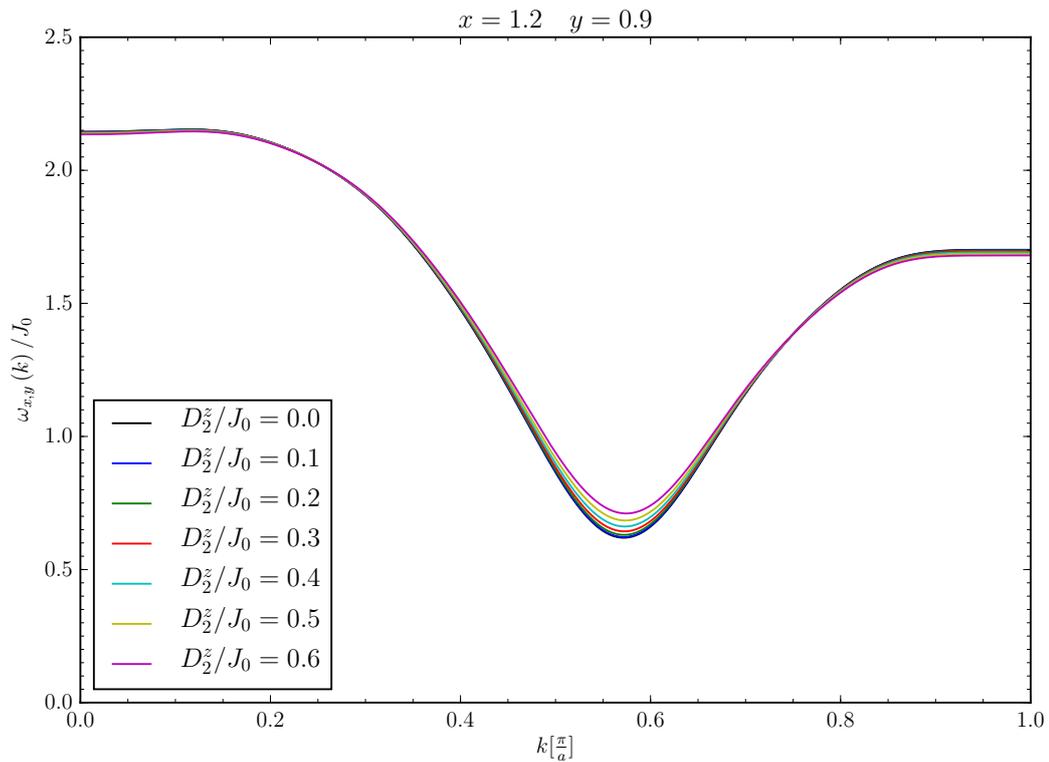


Abbildung 6.10: Darstellung der x - und y -Mode in Abhängigkeit der Komponenten D_2^z . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt. Der lineare Beitrag von D_2^z wird ebenfalls vernachlässigt.

Bei der Betrachtung von Abbildung 6.10 fällt auf, dass sie identisch zu Abbildung 6.9 ist. Dies ist auch direkt offensichtlich, da bei der Komponente Γ_2^{yy} die Komponenten D_2^x und D_2^z genau gleich gestellt sind. Auch hier wird der Bereich um das Minimum leicht angehoben.

6.5.4 Zusammenfassung

Nachdem alle Terme, die einen Einfluss auf die Dispersion der x -Mode und y -Mode besitzen, einzeln analysiert wurden, werden die zentralen Ergebnisse in diesem Abschnitt kurz zusammengefasst.

D_0^y : Beeinflusst über Γ_0^{xx} und Γ_0^{yy} die Dispersion
 \Rightarrow Sorgt nicht für eine Kopplung zwischen den Moden und auch nicht für eine Kopplung zwischen den Impulsen k und $k + \pi$
 \Rightarrow Erhöhung der x -Mode in der gesamten Brillouinzone
 \Rightarrow Absenkung der y -Mode in der gesamten Brillouinzone

D_1^x und D_1^y : Produkt der beiden Komponenten liefert einen endlichen Beitrag für Γ_1^{xy}
 \Rightarrow Koppelt die x -Mode mit Impuls k an die y -Mode mit Impuls $k + \pi$ und umgekehrt
 \Rightarrow Sorgt für eine Aufspaltung in einer obere und untere Mode
 \Rightarrow Sorgt für ein Abflachen der unteren Mode bei $k = \frac{\pi}{2a}$

D_1^x : Wirkt über Γ_1^{xx} und Γ_1^{yy} auf die Dispersion
 \Rightarrow Sorgt isoliert nicht für eine Kopplung zwischen verschiedenen Moden und Impulsen
 \Rightarrow Asymmetrische Verschiebung um $k = \frac{\pi}{2a}$
 \Rightarrow Absenkung im Bereich $k > \frac{\pi}{2a}$ der unteren x -Mode

D_1^y : Besitzt über Γ_1^{xx} und Γ_1^{yy} Einfluss auf die Dispersion
 \Rightarrow Sorgt isoliert nicht für eine Kopplung zwischen verschiedenen Moden und Impulsen
 \Rightarrow Asymmetrische Verschiebung um $k = \frac{\pi}{2a}$
 \Rightarrow Absenkung im Bereich $k < \frac{\pi}{2a}$ der unteren x -Mode
 \Rightarrow Entspricht dem Effekt der Komponente D_1^x nur an $k = \frac{\pi}{2a}$ gespiegelt

D_2^x : Wirkt über die Terme Γ_2^{xx} und Γ_2^{yy} auf die Dispersion
 \Rightarrow Sorgt nicht für eine Kopplung zwischen verschiedenen Moden und Impulsen
 \Rightarrow Senkt die x -Mode um den Bereich des Minimums ab
 \Rightarrow Erhöht die y -Mode um den Bereich des Minimums

D_2^z : Hat Einfluss auf die Dispersion in linearer Ordnung und durch die Terme Γ_2^{xx} und Γ_2^{yy}
 \Rightarrow Der lineare Beitrag koppelt die x -Mode mit Impuls k an die y -Mode mit Impuls $k + \pi$ und umgekehrt

- ⇒ Der lineare Beitrag verschiebt das Minimum der Dispersion bei $k > \frac{\pi}{2a}$ zu höheren k -Werten und senkt um diesen Bereich ab
- ⇒ Die quadratischen Beiträge sorgen nicht für eine Kopplung zwischen verschiedenen Moden und auch nicht für eine Kopplung zwischen verschiedenen Impulsen
- ⇒ Die quadratischen Beiträge sorgen nicht für eine Aufspaltung zwischen x - und y -Mode
- ⇒ Hebt die x -Mode und y -Mode um den Bereich des Minimums an

J' : Hat einen Effekt in linearer Ordnung

- ⇒ Sorgt nicht für eine Kopplung zwischen den Moden und auch nicht für eine Kopplung zwischen den Impulsen k und $k + \pi$
- ⇒ Stellt eine isotrope Kopplung dar
- ⇒ Sorgt für eine Absenkung der Dispersion, insbesondere um den Bereich des Minimums, ändert aber dessen Position nicht

6.6 Einfluss der DM-Wechselwirkung auf die z -Mode

In dem vorherigen Unterkapitel wurde nur der Einfluss der anisotropen DM-Wechselwirkung auf die x - und damit auch auf die y -Mode untersucht. Wie bereits in Unterunterkapitel 6.4.1 erwähnt wurde, wird die Dispersion der z -Mode nicht durch lineare \mathbf{D} -Beiträge beeinflusst. Die Zwischen-Leiter-Kopplung ist isotrop und hat somit einen Effekt auf die Dispersion der z -Mode. Ihr Einfluss wurde bereits in Unterkapitel 6.4.2 untersucht. Durch Berücksichtigung der symmetrischen anisotropen DM-Wechselwirkung bleibt die Dispersion der z -Mode noch immer isoliert von den anderen Moden. Das bedeutet, dass nur die diagonalen Terme $\Gamma_{ij}^{\alpha\alpha}$ einen Einfluss auf die z -Mode haben. Die dazugehörigen Hamiltonoperatoren wurden bereits im Unterkapitel 6.5 allgemein für die Mode α hergeleitet. Um die Dispersion zu bestimmen, wird als Ansatz für v die Operatorstruktur

$$v_z = v_1 t_k^{z,\dagger} + v_2 t_{-k}^z \quad (6.6.58)$$

verwendet. Dieser Ansatz ist aufgrund einer fehlenden Kopplung an eine andere Mode vollständig. Werden für die Hamiltonoperatoren $\mathcal{H}_{\text{Leiter}}$, \mathcal{H}' , $\mathcal{H}_{\text{Sprosse},zz}^{\Gamma,\text{eff}}$, $\mathcal{H}_{\text{NN},zz}^{\Gamma,\text{eff}}$ und $\mathcal{H}_{\text{NNN},zz}^{\Gamma,\text{eff}}$ die dazugehörigen Matrizen für die Gleichungssysteme $[\mathcal{H}, v_z] = w_z$ aufgestellt und addiert, ergibt sich

$$\mathcal{M}_{\text{Gesamt},z} = \begin{pmatrix} \omega_1 + D(k) & -D(k) \\ D(k) & -\omega_1 - D(k) \end{pmatrix}. \quad (6.6.59)$$

Hierbei wurden die Abkürzungen

$$D(k) = d_1 + \Gamma_0^{zz}(k) + \Gamma_1^{zz}(k) + \Gamma_2^{zz}(k) \quad (6.6.60a)$$

$$d_1 = -2J' \cos(2\pi l) a^2(k) \quad (6.6.60b)$$

$$\Gamma_0^{zz}(k) = -2\Gamma_0^{zz} a^2(k) \quad (6.6.60c)$$

$$\Gamma_1^{zz}(k) = 4\Gamma_1^{zz} a^2(k) \cos(k) \quad (6.6.60d)$$

$$\Gamma_2^{zz}(k) = 4\Gamma_2^{zz} a^2(k) \cos(2k) \quad (6.6.60e)$$

eingeführt. Die beiden Eigenwerte der Matrix sind

$$\omega_z(k) = \pm \sqrt{\omega_1^2 + 2\omega_1 D(k)}. \quad (6.6.61)$$

Auf eine ausführliche Analyse der Dispersion der z -Mode verzichten wir hier. Wir werden in dem folgenden Kapitel sehen, dass diese Form der Dispersion nicht geeignet ist, die experimentell gemessenen Daten zu beschreiben.

7 Vergleich mit experimentellen Daten

Die verwendeten experimentellen Daten des Anregungsspektrums von BCPO wurden aus Messungen inelastischer Neutronenstreuung extrahiert. Die Messungen wurden vom SEQUOIA Spektrometer und dem Forschungszentrum NIST durchgeführt [6]. PLUMB *et al.* haben 2014 versucht, diese Daten mit Hilfe einer quadratischen Bondoperatortheorie zu reproduzieren [6].

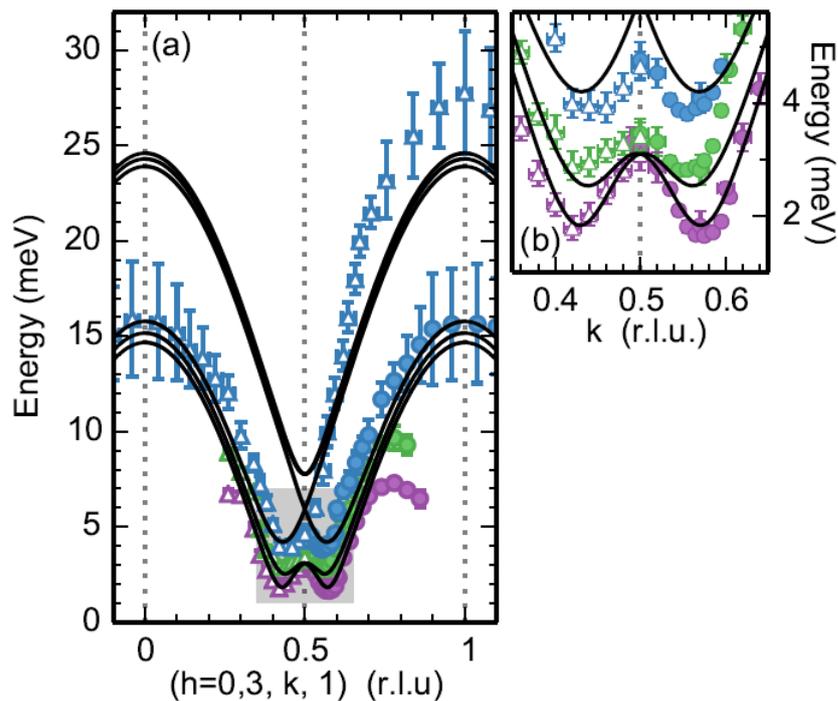


Abbildung 7.1: Verlauf der berechneten Dispersion von PLUMB *et al.*. Die gefüllten Kreise stammen aus Messungen für $h = 0$, die offenen Dreiecke aus Messungen für $h = 3$. Die Abbildung wurde entnommen [6]. Die lila Messpunkte werden mit Mode 1 bezeichnet, die grünen mit Mode 2 und die blauen mit Mode 3.

Sie bestimmten die Parameter zu

$$J_0 = 8 \text{ meV} \quad (7.0.1a)$$

$$x = 1 \quad (7.0.1b)$$

$$y = 1 \quad (7.0.1c)$$

$$J' = 1.6 \text{ meV} \quad (7.0.1d)$$

$$D_1^x = 0.6J_0 \quad (7.0.1e)$$

$$D_1^y = 0.45J_0. \quad (7.0.1f)$$

Die gewählten Werte für die \mathbf{D} -Vektoren sind ungewöhnlich groß vor dem Hintergrund, dass ihr Ursprung in der Spin-Bahn-Kopplung liegt. Unsere Hypothese, siehe Kapitel 1 ist, dass die \mathbf{D} -Komponenten einen Wert von $0.1J_0$ bis $0.2J_0$ annehmen sollten. Die gewählten Werte von $D_1^y = 0.45J_0$ und $D_1^x = 0.6J_0$ sind dagegen sehr viel größer und decken sich nicht mit unseren Erwartungen. Außerdem ist es sehr bemerkenswert, dass lediglich die Komponenten von \mathbf{D}_1 für die Dispersion genutzt und die restlichen drei \mathbf{D} -Komponenten auf Null gesetzt wurden.

In Abbildung 7.1 ist zu sehen, dass die berechneten Funktionen, die zu Mode 1 und Mode 2 im Bereich des Minimums passen, im Punkt $k = \frac{\pi}{2}$ entartet sind, was in der Messung nicht zu erkennen ist. Der abfallende Verlauf von Mode 1 und 2 im Bereich zwischen $k = \frac{\pi}{2}$ und $k = \pi$ kann von den Funktionen nicht beschrieben werden. Im Gegensatz dazu gelang es PLUMB *et al.* das Verhältnis zwischen den hohen Energien (ca. 27 meV) und niedrigen Energien (ca. 5meV), siehe Mode 3, annähernd zu reproduzieren, sowie den Verlauf von Mode 1 und 2 im Bereich des Minimums.

Um unsere berechneten Dispersionen für die einzelnen Moden mit den experimentellen Daten zu vergleichen, verwenden wir im ersten Schritt den Parametersatz von PLUMB *et al.* aus Gleichungen 7.0.1.

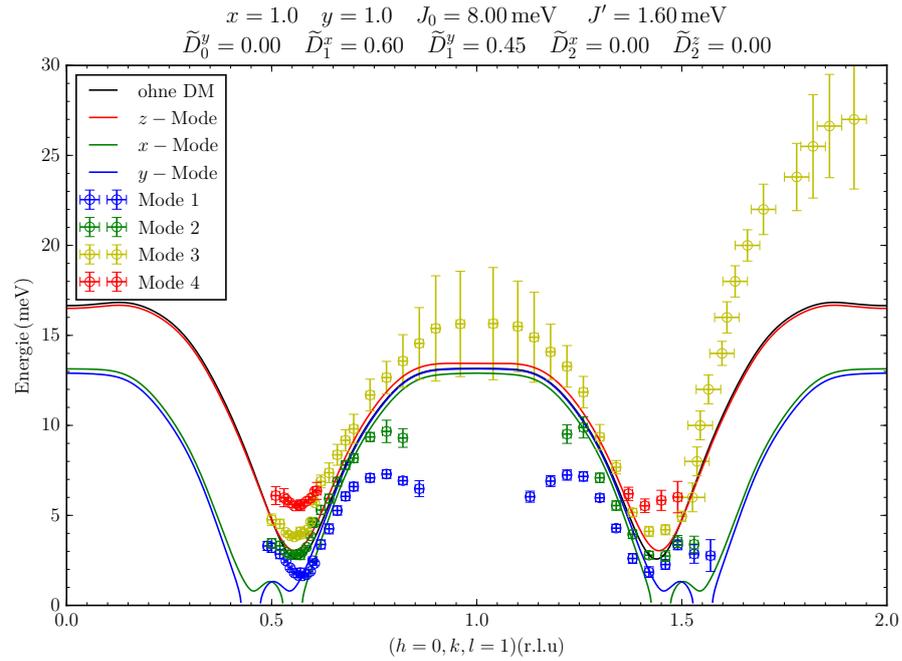


Abbildung 7.2: Darstellung der x -, y - und z -Mode mit den verwendeten Daten von PLUMB *et al.* aus Gleichungen 7.0.1

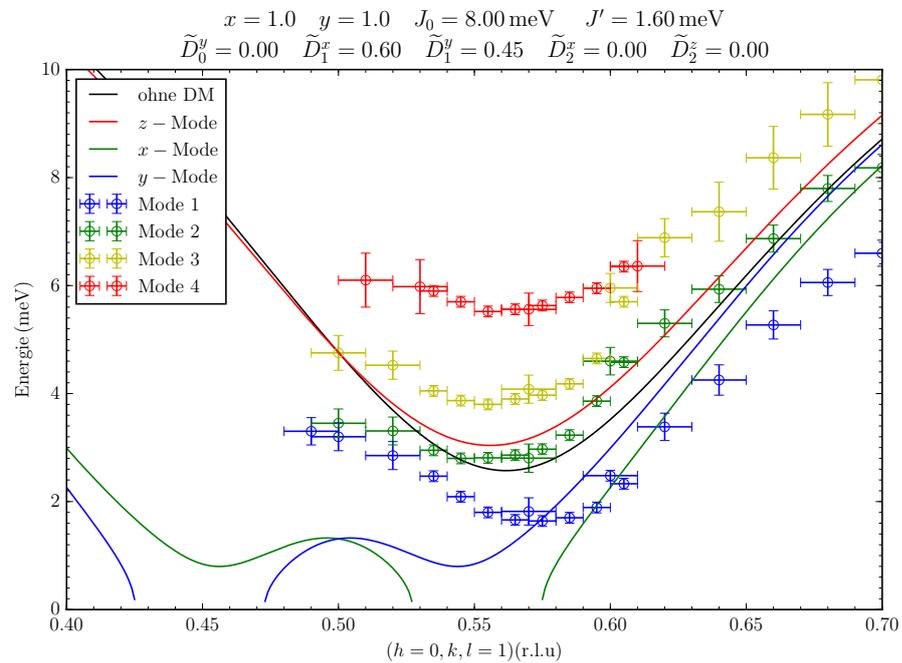


Abbildung 7.3: Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.2 um den Bereich des Minimums.

In Abbildungen 7.2 und 7.3 ist deutlich zu erkennen, dass unsere berechneten Dispersionen mit den Parametern von PLUMB *et al.* keine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten liefert. Die genutzten Parameter sorgen dafür, dass die Dispersionen der x - und y -Mode negative Werte annehmen. Dies liegt an den sehr großen Werten für D_1^x und D_1^y und sorgt dafür, dass unter dem Wurzelausdruck in Formel 6.4.31 negative Werte entstehen.

Im Gegensatz zu PLUMB *et al.* können unsere Funktionen das Verhältnis zwischen den hohen und niedrigen Energien von Mode 3 nicht beschreiben. Desweiteren ist es mit Hilfe unsere Dispersionen nicht möglich, den abknickenden Verlauf von Mode 1 und 2 im Bereich von $k \approx 0.75\pi$ zu reproduzieren.

Losgelöst von diesem Parametersatz ist es das Ziel in diesem Kapitel die experimentellen Messdaten mit Hilfe unserer hergeleiteten Dispersionen für die x -, y -, und z -Mode zu beschreiben. Dies wollen wir erreichen, indem wir uns auf einen Parameter für $x = \frac{J_1}{J_0}$ $y = \frac{J_2}{J_0}$ festlegen und anschließend die Werte für die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 so wählen, dass wir eine bestmögliche Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erreichen. Wie schon in Kapitel 1 erwähnt wurde, erwarten wir, dass die Werte der \mathbf{D} -Vektoren einen Wert von $0.1J_0$ bis $0.2J_0$ annehmen.

Wir starten mit den Parametern $x = 1.2$ und $y = 0.9$ für die Dispersion der einzelnen frustrierten Spinleiter. Die Zwischen-Leiter-Kopplung setzen wir auf $J' = 1.5$ meV fest. In früheren internen Analysen von DRESCHER und KRULL stellte sich heraus, dass diese Parameter für die Beschreibung der Dispersion von BCPO geeignet sind.¹

Abbildungen 7.4 und 7.5 zeigen die Dispersionen der x -, y - und z -Mode mit den Parameterwerten für die \mathbf{D} -Vektoren und der Energieskala J_0 , die die gemessenen Daten am besten beschreiben. Die angegebenen Werte der \mathbf{D} -Komponenten werden in Einheiten der jeweiligen Kopplung ausgedrückt, d.h. es gilt $\tilde{D}_i^\alpha = \frac{D_i^\alpha}{J_i}$ mit $i \in \{0, 1, 2\}$. Um den Effekt der DM-Wechselwirkung zu verdeutlichen, wird in jeder nachfolgenden Abbildung die Dispersion ohne Einfluss der DM-Wechselwirkung, gekennzeichnet durch „ohne DM“, mitabgebildet. Der Einfluss der Zwischen-Leiter-Kopplung wird dabei berücksichtigt. Die Dispersion wurde entlang der Spinleitern in y -Richtung, vergleiche Abbildung 5.6, gemessen. Der Wellenvektor in dieser Richtung wird mit k bezeichnet. Die beiden anderen Wellenvektoren h und l stehen senkrecht zur Leiter und wurde auf $h = 0$ und $l = 1$ in den Messungen festgesetzt.

¹DRESCHER und KRULL konzentrierten sich bei ihren Analysen nur auf die grobe Form von Mode 3. Die geeigneten Parameter wurde per mündlicher Mitteilung übermittelt.

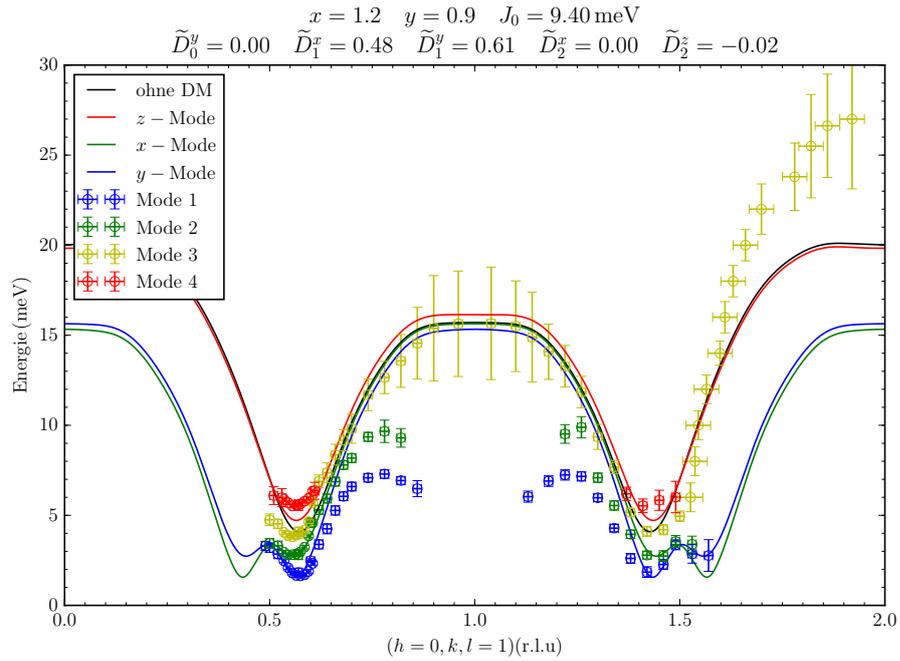


Abbildung 7.4: Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.

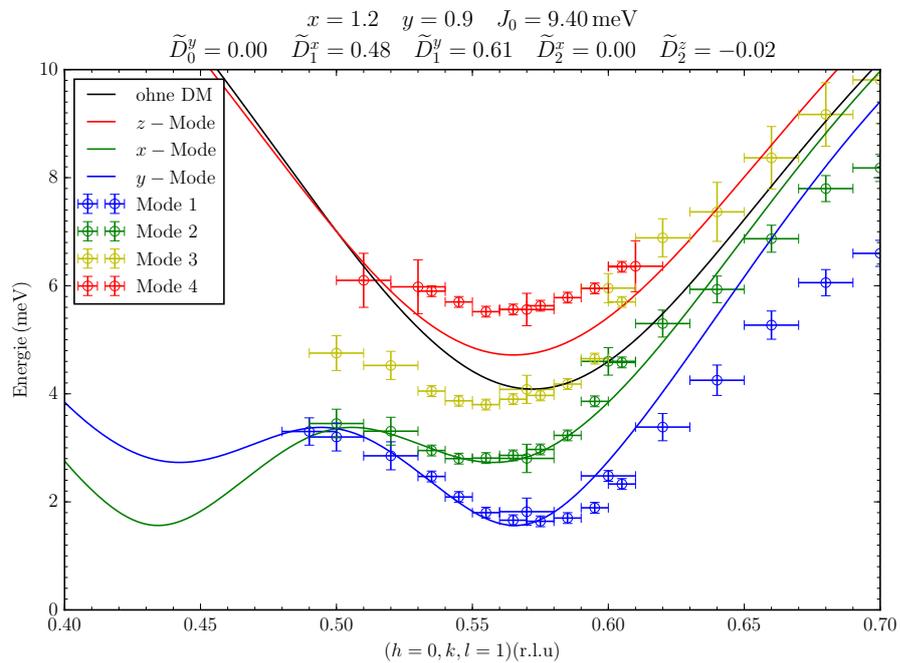


Abbildung 7.5: Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.4 um den Bereich des Minimums.

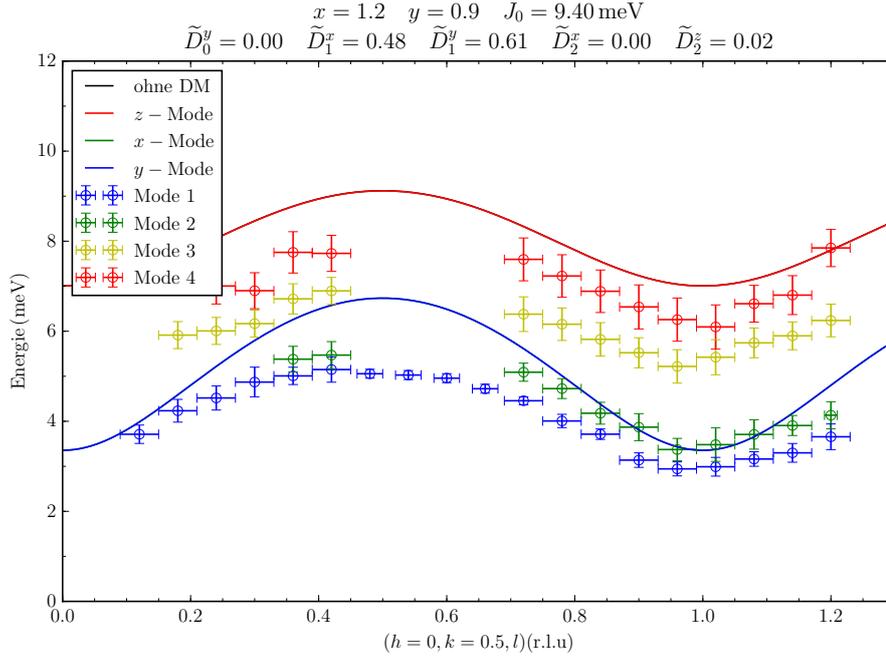


Abbildung 7.6: Darstellung der Dispersion senkrecht zur Leiter in l -Richtung mit den angepassten Parametern aus Abbildungen 7.4 und 7.5

Neben der Dispersion entlang der Spinleiter in k -Richtung präsentieren wir in Abbildung 7.6 die Messdaten, die bei der Dispersion senkrecht zur Spinleiter in l -Richtung aufgenommen wurden. Mit Hilfe dieser Daten kann eine Aussage über die Größenordnung der Zwischen-Leiter-Kopplung J' getroffen werden. Sie ist verantwortlich für das Verhältnis zwischen dem Maximum und Minimum der einzelnen Moden. Ein kleinerer Wert für J' sorgt für einen insgesamt flacheren Verlauf der Dispersion. Es fällt auf, dass in Abbildung 7.6 nur die z - und y -Mode zu sehen sind. Die gewählten Parameter sorgen dafür, dass sich die Dispersion der z -Mode erst in der dritten Nachkommastelle von der ungestörten Dispersion unterscheidet. Die Skala von Abbildung 7.6 ist zu groß um diese Unterschiede offensichtlich zu erkennen. Die x - und y -Mode sind für diese Parameterwahl entartet. Dies lässt sich mit Hilfe von Formel 6.5.49 erkennen. Da die Parameter D_0^y und D_2^x auf Null gesetzt wurden, sind die Dispersionen der x - und y -Mode senkrecht zur Spinleiter bei festem $k = \frac{\pi}{2}$ identisch.

Für Mode 3 und 4 stellt der Wert für die Zwischen-Leiter-Kopplung $J'=1.5 \text{ meV}$ eine gute Wahl dar. Für Mode 1 und 2 scheint dieser Wert jedoch etwas zu groß zu sein. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit haben wir den Wert der Zwischen-Leiter-Kopplung nicht weiter untersucht und ihn auf $J'=1.5 \text{ meV}$ gesetzt.

Wir wollen nun mehrere Aspekte bezüglich der Abbildungen 7.4 und 7.5 diskutieren.

Modenanzahl

Die erste Auffälligkeit bezüglich der experimentellen Daten ist, dass insgesamt vier Moden im Experiment gemessen wurden. PLUMB *et al.* zeigten jedoch nur drei der vier Moden, siehe Abbildung 7.1. Bezogen auf Abbildung 7.4 und 7.5 wurde Mode 4 nicht untersucht. Mit unserer Näherung ist es ebenfalls nur möglich drei Moden (x, y, z) zu beschreiben.

Wahl der Parameter \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y

Die beiden Abbildungen zeigen, dass die berechneten Dispersionen für die x - und y -Moden, den Bereich der Minima von Moden 1 und 2 beschreiben können. Um diesen Abschnitt der Dispersion mit Hilfe von Formel 6.5.49 erfassen zu können, werden sehr große Werte für die Komponenten \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y benötigt. Sie haben die relativen Werte $\tilde{D}_1^x = 0.48$ und $\tilde{D}_1^y = 0.61$. Der Grund für diese Parameterwahl ist der Effekt der Komponente Γ_1^{xy} . In Unterunterkapitel 6.5.2 zeigte sich der Effekt dieses Terms in einer symmetrischen Absenkung der Dispersion und einer Abflachung ihrer Form. Der Wert der ungestörten Dispersion² liegt am Punkt $k = \frac{\pi}{2}$ bei 7.00 meV. Mode 1 und 2 liegen bei diesem k -Wert bei 3.20 meV bzw. 3.45 meV. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren müssen folglich dafür sorgen, dass die Dispersionen an diesem Punkt um 3.8 meV bzw. 3.55 meV abgesenkt werden. Für einen entsprechend großen Wert von Γ_1^{xy} müssen die Komponenten \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y hohe Werte annehmen. Der Unterschied zwischen den einzelnen Komponenten des \mathbf{D}_1 -Vektors wird durch den unterschiedlichen Verlauf von Mode 1 und Mode 2 unterstützt. In diesem Fit wurde \tilde{D}_1^y größer gewählt als \tilde{D}_1^x , was zu einem asymmetrischen Verlauf der x - und y -Dispersion bezüglich der Achse $k = \frac{\pi}{2}$ führt, siehe Unterunterkapitel 6.5.2. Die Dispersion der x -Mode wird um den Bereich des Minimums angehoben und die y -Mode im Gegensatz dazu abgesenkt. Es ist zu beachten, dass es mit unserer Methode möglich ist, dass die x - und y -Mode tauschen, indem die Werte für \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y vertauscht werden.

Wahl des Parameters \tilde{D}_2^z

Der Parameter \tilde{D}_2^z wurde nur sehr klein und negativ gewählt. Sein Auftreten sorgt, wie in Unterunterkapitel 6.4.1 und 6.5.3 aufgezeigt wurde, in linearer Ordnung für eine Absenkung und Verschiebung des Minimums zu höheren k -Werten und in quadratischer Ordnung für ein Anheben der Dispersion um den Bereich $k = \frac{\pi}{2}$. Es wurde ebenfalls

²Hierbei bezieht sich ungestört auf die Tatsache, dass in dieser Dispersion keine Effekte der DM-Wechselwirkung berücksichtigt sind. Die Zwischen-Leiter-Kopplung wird hingegen bei dieser Formulierung beachtet.

erwähnt, dass das Vorzeichen der Komponente D_2^z keine Veränderung für die Dispersion bringt, da ihr Wert quadratisch eingeht. An diesem Punkt wurde jedoch nicht berücksichtigt, dass bei endlichem \tilde{D}_1^x und endlichem \tilde{D}_1^y das relative Vorzeichen zwischen den Komponenten Γ_1^{xy} und D_2^z von Bedeutung ist. In der Formel für die Dispersion der x -Mode, siehe Gleichung 6.5.49, ist zu sehen, dass zwischen den beiden Termen ein negatives Vorzeichen steht. Dieses sorgt dafür, dass sich die Effekte beider Terme im Bereich des Minimums gegenseitig abschwächen. Im Fall einer Verstärkung muss das relative Vorzeichen zwischen diesen Termen verschwinden, indem einer der beiden Terme negativ ist. Für ein besseres Verständnis dieses Zusammenhangs zeigt Abbildung 7.7 die Dispersionen für einen positiven Wert von D_2^z .

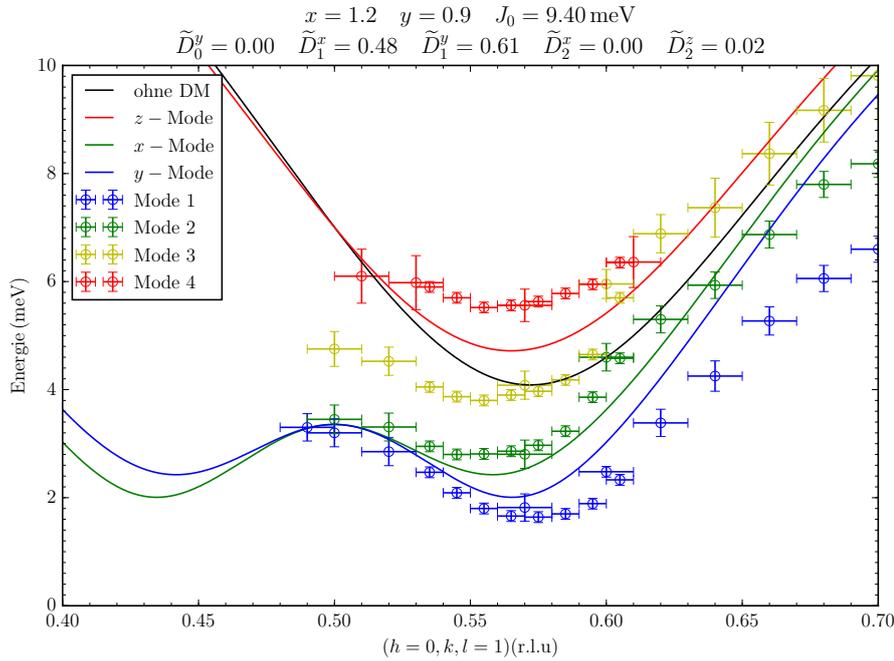


Abbildung 7.7: Vergrößerter Ausschnitt aus der Dispersion für positives \tilde{D}_2^z zum Vergleich mit Abbildung 7.5.

Es ist deutlich zu erkennen, dass das positive Vorzeichen der Komponente D_2^z für eine schlechtere Übereinstimmung der berechneten Mode mit den Messdaten sorgt.

Form der z -Mode

Eine große Unstimmigkeit zwischen den Messdaten und der berechneten Dispersion besteht für die z -Mode. Der berechnete Kurvenverlauf passt zu keinem der gemessenen Datensätze. Der Verlauf von Mode 3 weist auf eine W-Form der Dispersion hin. Die Form der Dispersion der z -Mode ähnelt jedoch noch immer der Form der ungestörten Dispersion. Sie unterscheidet sich in ihrer Struktur, siehe Gleichung 6.6.61, nicht von der ungestörten Dispersion, siehe Gleichung 6.1.8. Sie wird lediglich durch die Effekte

der Terme Γ_0^{zz} , Γ_1^{zz} und Γ_2^{zz} in dem Bereich des Minimums angehoben.

Abknicken der Moden 1 und 2

Es ist außerdem zu bemerken, dass die Messungen für Mode 1 und Mode 2 im Bereich von $k = 0.75\pi$ einen abknickenden Verlauf darstellen. Die berechneten Kurven der x - und y -Mode können dieser Verlauf nicht erfassen. Die Datenpunkte zeigen einen abfallenden Verlauf der Dispersion in diesem Bereich auf. Die berechneten Kurven weisen jedoch eine Parabelform in diesem Bereich auf. Wir vermuten, dass in diesem Bereich die Dispersion auf das Zweiteilchenkontinuum trifft. Ist dies der Fall müssen weitere Effekte, z.B. der Zerfall von Triplonen, berücksichtigt werden, siehe Unterkapitel 9.2.

Verhältnis zwischen hohen und niedrigen Energien

Zudem ist zu betonen, dass die z -Mode ihr Maximum bei ca. 19 meV annimmt. Die experimentell gemessenen Werte liegen jedoch weit darüber hinaus bei ca. 27 meV. Um das Verhältnis zwischen den niedrigen Energien im Bereich von ca. 5 meV und den hohen Energien bei ca. 27 meV theoretisch besser erfassen zu können, bietet es sich an höhere Werte von $x = \frac{J_1}{J_0}$ zu betrachten. Eine Erhöhung von x sorgt in der ungestörten Dispersion für ein größeres Verhältnis zwischen den niedrigen und hohen Energien. Wir nehmen deswegen als nächsten festen Parametersatz die Werte $x = 1.3$ und $y = 0.9$. Die Zwischen-Leiter-Kopplung legen wir weiterhin auf 1.5 meV fest.

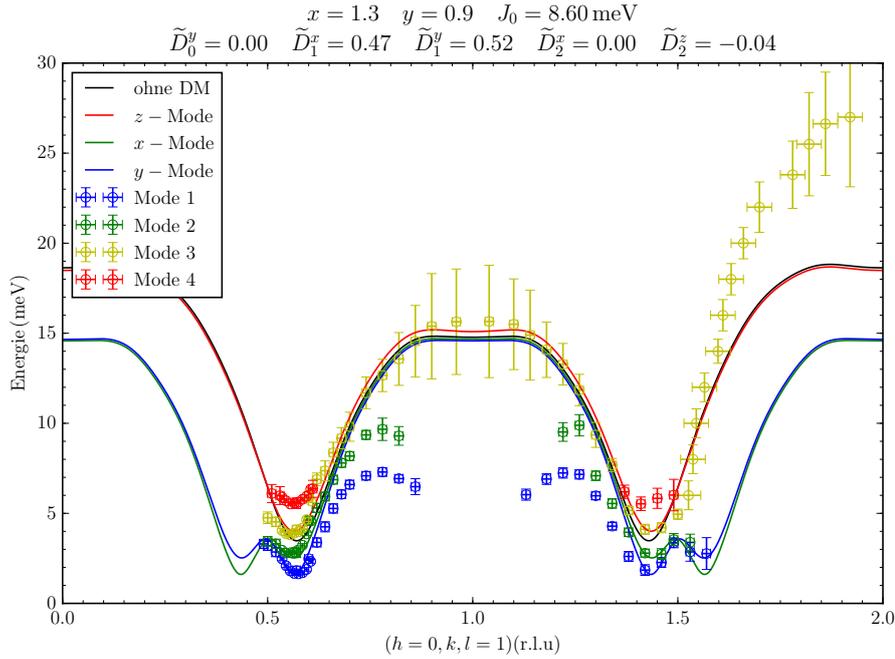


Abbildung 7.8: Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.

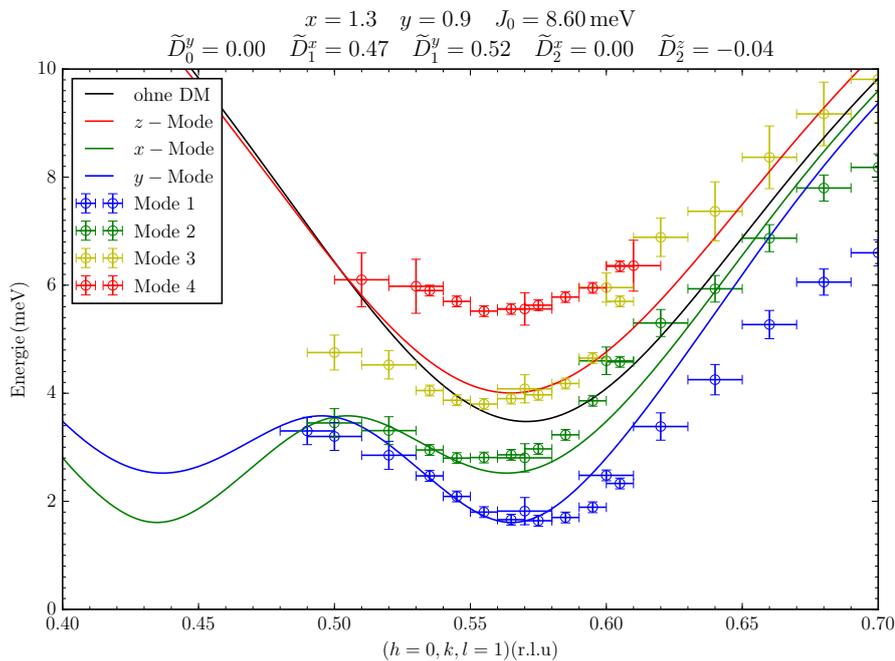


Abbildung 7.9: Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.8.

Im nachfolgenden Abschnitt wollen wir die angepassten Dispersionen für $x = 1.2$, siehe Abbildungen 7.4 und 7.5, mit den angepassten Dispersionen für $x = 1.3$, siehe Abbildun-

gen 7.8 und 7.9, miteinander vergleichen. Unsere Erwartung ist, dass mit einer Erhöhung des Parameters x das Verhältnis zwischen den hohen und niedrigen Energie besser beschreiben zu können.

Vergleicht man Abbildung 7.4 ($x=1.2$) mit Abbildung 7.8 ($x=1.3$) so fällt auf, dass eine Erhöhung des Parameters x nicht den gewünschten Effekt erzielt.³ Einer Vergrößerung des Parameters x sorgt nämlich auch für eine Veränderung der Form der Dispersion in der Nähe des Minimums. Der Bereich um das Minimum ist weniger breit und der Anstieg nach dem Minimum wird steiler. Dieses Verhalten hat als Folge, dass die **D**-Komponenten neu angepasst werden müssen. Verglichen mit Abbildung 7.5 sorgen die gewählten Parameter aus Abbildung 7.9 für eine schlechtere Übereinstimmung mit den experimentellen Messdaten. Der Bereich um das Minimum von Mode 1 und 2 wird weniger gut von der x - und y -Mode erfasst. Die Werte der **D**-Komponenten befinden sich in demselben Bereich wie Abbildung 7.4.

Als Fazit können wir festhalten, dass die Parameter $x = 1.3$, $y = 0.9$ und $J' = 1.5$ meV weniger gut geeignet sind die experimentellen Messdaten zu beschreiben als die Parameter $x = 1.2$, $y = 0.9$ und $J' = 1.5$ meV.

Weiterhin ist es unser Ziel einer Verbesserung des Verhältnisses zwischen den hohen und niedrigen Energien zu erzielen. Deswegen verwenden wir als nächsten Parametersatz für die ungestörte Dispersion $x = 1.4$ und $y = 0.9$. Die Zwischen-Leiter-Kopplung setzen wir weiterhin auf $J' = 1.5$ meV fest.

³Hier muss natürlich beachtet werden, dass in Abbildungen 7.4 und 7.8 die Sprosskopplungen nicht identisch sind. Das bedeutet, die Kurven besitzen nicht dieselbe Skalierung.

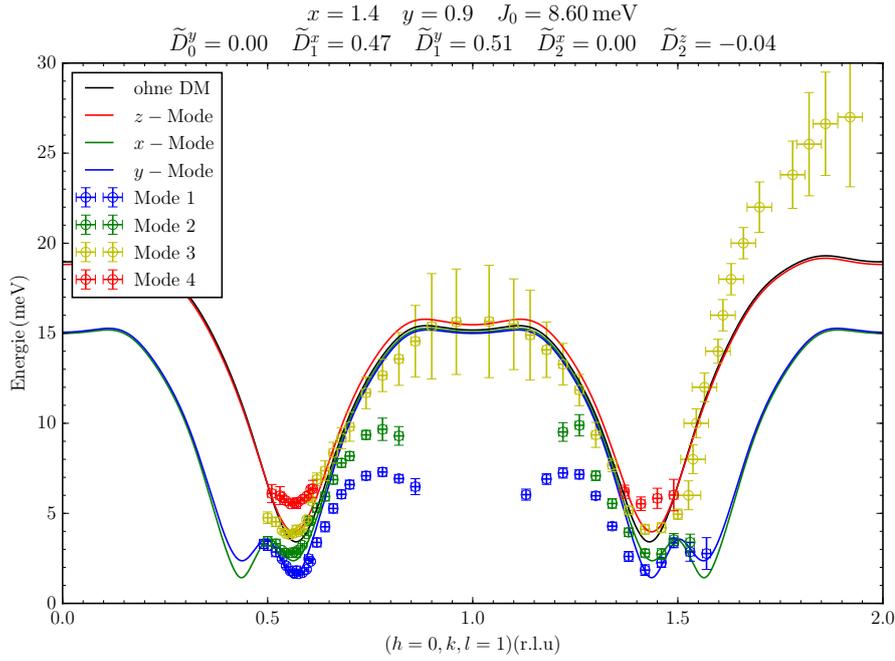


Abbildung 7.10: Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.

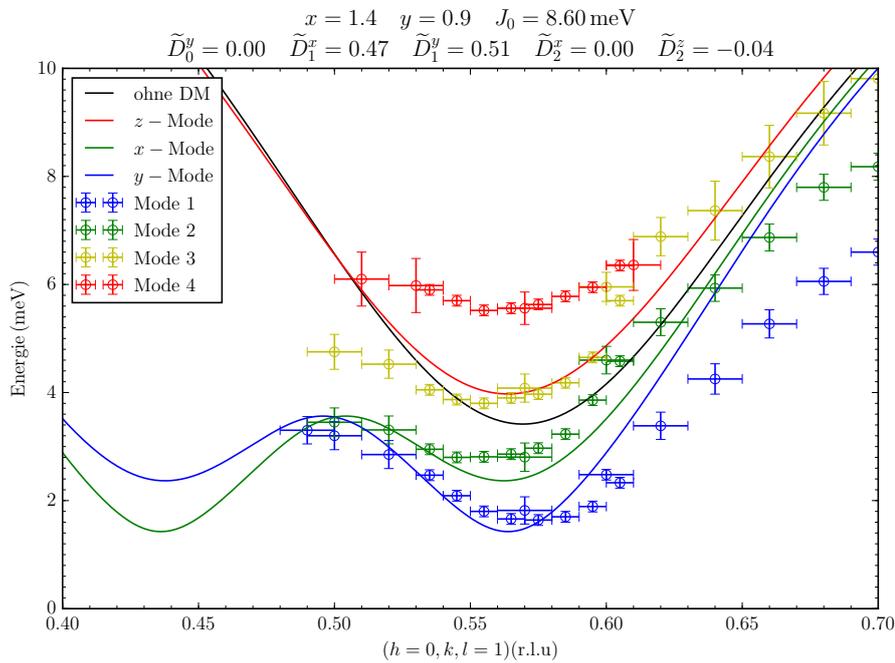


Abbildung 7.11: Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.10 um den Bereich des Minimums.

Im nachfolgenden Abschnitt wollen wir diskutieren, inwiefern eine Vergrößerung des

Parameters x für eine Verbesserung des Verhältnisses zwischen hohen und niedrigen Energien sorgt. Außerdem wird auf den Kurvenverlauf der Dispersionen im Allgemeinen eingegangen.

Eine weitere Vergrößerung des x -Wertes zeigt keine Verbesserung bezüglich des Verhältnisses zwischen hohen und niedrigen Energien. Desweiteren fällt an den Abbildungen 7.10 und 7.11 fällt auf, dass sich der Kurvenverlauf im Bereich der Minima von Mode 1 und 2 verglichen mit den beiden vorherigen Parametersätzen verschlechtert hat. Der Wertebereich der \mathbf{D} -Vektoren hat sich nicht geändert.

Es ist in Abbildung 7.10 zu erkennen, dass sich im Bereich von $k = \pi$ Ausbeulungen bilden, die nicht mit Hilfe der \mathbf{D} -Vektoren zu kompensieren sind. Bei ansteigendem x werden diese Verformungen immer stärker. Es ist also nicht von weiterem Nutzen den Wert für x zu erhöhen. Bis zu diesem Punkt passen die Kurvenverläufe aus Abbildungen 7.4 und 7.5 mit $x = 1.2$ und $y = 0.9$ am besten zu den Messpunkten.

Da eine weitere Erhöhung des Parameters x nicht zu dem gewünschten Ergebnis führte, versuchen wir die Position der Minima der Mode 1 und 2 besser als in Abbildung 7.5 mit $x = 1.2$ und $y = 0.9$ erfassen zu können. Dazu ist es nützlich die ungestörte Dispersion mit einem kleineren Wert für $y = \frac{J_2}{J_1}$ zu betrachten. Eine Verkleinerung des y -Wertes sorgt nämlich für eine Verschiebung des Minimums zu höheren Impulsen. Um das Verhältnis zwischen den hohen und niedrigen Energien besser zu erfassen, wird die Sprossenkopplung J_0 erhöht. Die Zwischen-Leiter-Kopplung wird wieder auf $J' = 1.5$ meV festgesetzt. Die beiden nachfolgenden Abbildungen zeigen die angepassten Kurvenverläufe für diese Änderungen.

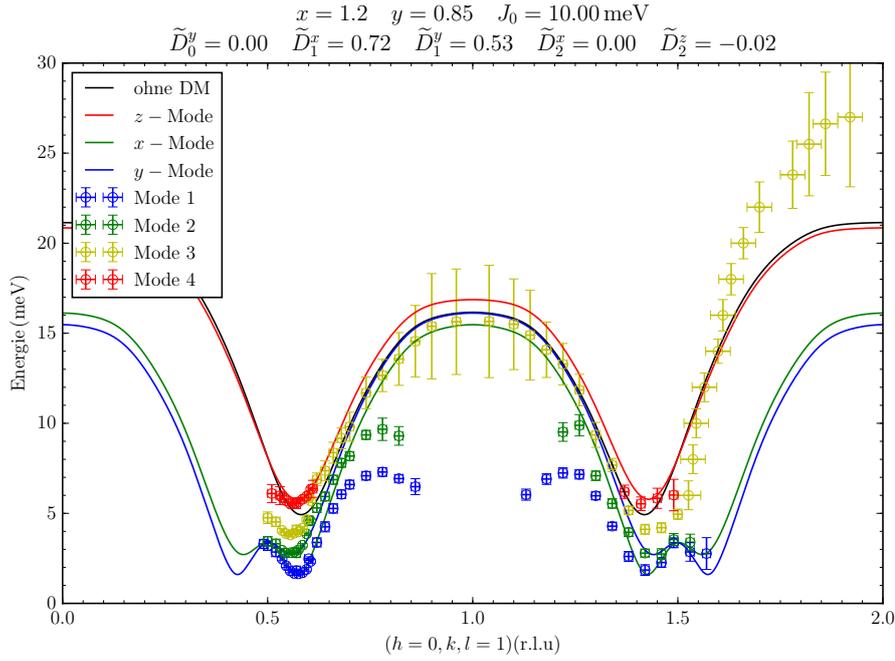


Abbildung 7.12: Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.

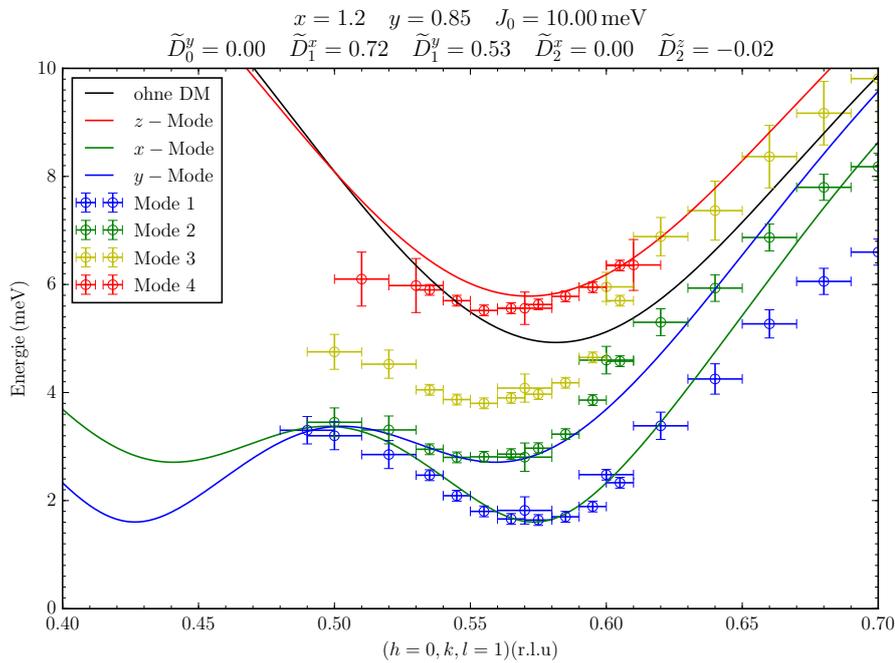


Abbildung 7.13: Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.12 um den Bereich des Minimums.

Im nachfolgenden Abschnitt diskutieren wir den veränderten Kurvenverlauf und die Pa-

parameterwerte der **D**-Vektoren für die Parameter $x = 1.2$ und $y = 0.85$.

Eine Verbesserung des Verhältnisses zwischen den hohen und niedrigen Energien ist durch die gewählte Sprossenkopplung $J_0 = 10 \text{ meV}$ gegeben. Jedoch passt die Form der berechneten Dispersion der z -Mode weiterhin nicht zu der Form, die von Mode 3 suggeriert wird.

Die Position des Minimums von Mode 1 wird verglichen mit Abbildung 7.5 ($y=0.9$) besser erfasst. Das Augenmerk der Abbildungen 7.12 und 7.13 liegt jedoch auf den sehr groß gewählten relativen Werten für \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y . Bei allen bis jetzt analysierten Wertepaaren von x und y ist es uns nicht gelungen die Werte der **D**₁-Komponenten unter $0.4J_1$ zu senken. Weitere Analysen anderer Wertepaare für x und y scheinen bezüglich dieses Aspekts nicht zielführend zu sein.

Eine weitere Beobachtung, die bei allen bisherigen Abbildungen auffällt, ist die Entartung der x - und y -Dispersion am Punkt $k = \frac{\pi}{2}$. Unabhängig von den gewählten Parametern treffen die beiden Kurven in diesem Punkt aufeinander. Die Messdaten legen jedoch eine Aufspaltung in diesem Punkt von 0.25 meV nahe. Die Entartung der x - und y -Mode bei $k = \frac{\pi}{2}$ ist rechnerisch mit Gleichung 6.5.49 zu zeigen. Die Dispersion der y -Mode entspricht der der x -Mode jedoch um π verschoben. Das bedeutet, dass

$$\omega_x\left(\frac{\pi}{2}\right) = \omega_y\left(\frac{\pi}{2}\right) = \omega_x\left(\frac{3\pi}{2}\right) \quad (7.0.2)$$

gelten muss. Es reicht also aus zu untersuchen, ob $\omega_x\left(\frac{\pi}{2}\right) = \omega_x\left(\frac{3\pi}{2}\right)$ erfüllt ist. Wir betrachten zuerst die eingeführten Abkürzungen $A(k)$, $B(k)$ und $C(k)$ aus Gleichungen 6.5.47 an den Punkten $k = \frac{\pi}{2}$ und $k = \frac{3\pi}{2}$. In allen Koeffizienten kommt die Größe $a(k)$ bzw. $a(k + \pi)$ vor. Mit Hilfe der Herleitung von $a(k)$, siehe Gleichung 6.1.6, lässt sich

die Identität $a\left(\frac{\pi}{2}\right) = a\left(\frac{3\pi}{2}\right)$ einfach zeigen:

$$\begin{aligned}
 a\left(\frac{3\pi}{2}\right) &= \sum_{\delta} a_{\delta} \cos\left(\frac{3\pi}{2}\delta\right) \\
 &= \sum_{\delta} a_{\delta} \cos\left(\frac{\pi}{2}\delta + \pi\delta\right) \\
 &= \sum_{\delta} a_{\delta} \left(\cos\left(\frac{\pi}{2}\delta\right) \cos(\pi\delta) - \sin\left(\frac{\pi}{2}\delta\right) \underbrace{\sin(\pi\delta)}_{=0, \text{ da } \delta \in \mathbb{N}} \right) \\
 &= \sum_{\delta} a_{\delta} \cos\left(\frac{\pi}{2}\delta\right) \\
 &= a\left(\frac{\pi}{2}\right).
 \end{aligned}$$

Für die Dispersion der ungestörten frustrierten Leiter, $\omega_0(k)$, gilt dieser Zusammenhang ebenfalls, da auch diese Größe aus einer Cosinusreihe wie $a(k)$ zusammengesetzt ist. Mit Hilfe dieser Beziehungen ist es direkt einsichtig, dass gilt:

$$\begin{aligned}
 \omega_0\left(\frac{\pi}{2}\right) &= \omega_0\left(\frac{3\pi}{2}\right) \\
 A\left(\frac{\pi}{2}\right) &= A\left(\frac{3\pi}{2}\right) \\
 B\left(\frac{\pi}{2}\right) &= B\left(\frac{3\pi}{2}\right) \\
 C\left(\frac{\pi}{2}\right) &= C\left(\frac{3\pi}{2}\right).
 \end{aligned}$$

Das bedeutet letztendlich, dass $\omega_x\left(\frac{\pi}{2}\right) = \omega_y\left(\frac{\pi}{2}\right)$ gilt. Die x - und y -Mode bleiben also in dem Punkt $k = \frac{\pi}{2}$ entartet unabhängig von den Werten der \mathbf{D} -Vektoren.

Unser Ziel in diesem Kapitel war es, die experimentellen Messdaten mit Hilfe unserer hergeleiteten Dispersionen zu beschreiben. Dabei erwarteten wir, dass die Werte der \mathbf{D} -Komponenten einen Wert zwischen $0.1J_0$ und $0.2J_0$ annehmen.

Dieses Ziel konnten wir in diesem Kapitel nicht erreichen. Wir konnten das Verhältnis zwischen den hohen und niedrigen Energien nicht geeignet beschreiben. Im Gegensatz dazu ist es uns gelungen den Bereich um das Minimum der Moden 1 und 2 zu beschreiben. Dabei war es jedoch nötig Parameterwerte von ca. $\mathbf{D}_1 \approx 0.6J_1$ zu verwenden.

Ein weitere große Unstimmigkeit zwischen den experimentellen Daten und den berechneten Dispersionen stellt die Form der z -Mode dar. Ihr Kurvenverlauf passt momentan zu

keinem Verlauf der gemessenen Moden. Um dies zu verbessern, wäre es notwendig eine Wechselwirkung einzuführen, die die z -Mode mit Impuls k an eine andere Mode oder an sich selbst mit Impuls $k + \pi$ koppelt. Wie wir bereits gesehen haben, sorgt diese Art von Kopplung dafür, dass sich die Dispersion zu einer unteren, W-förmigen und einer oberen, V-förmigen Mode aufspaltet. So ist es möglich, dass die Dispersion der z -Mode eine W-Form annimmt.

8 Alternierende J_2 -Kopplung

In diesem Kapitel führen wir zusätzlich zu der antisymmetrischen und symmetrischen DM-Wechselwirkung eine Alternierung in der Übernächst-Nachbar-Kopplung J_2 ein. Wir erwarten, dass diese zusätzlich eingeführte Wechselwirkung dafür sorgt, dass die Dispersion der z -Mode eine W-Form annimmt und so besser mit den experimentellen Daten übereinstimmt. Zusätzlich dazu vermuten wir, dass eine Alternierung der J_2 -Kopplung von ca. 10-15% dafür sorgt, dass wir mit Hilfe kleinerer Werte für \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y , d.h. $\tilde{D}_1^x, \tilde{D}_1^y < 0.6$, die Messdaten theoretisch erfassen können.

Diese zusätzliche Wechselwirkung ist isotrop und vermittelt eine Wechselwirkung zwischen den Impulsen k und $k + \pi$ derselben Mode. Dies sorgt dafür, dass die Dispersion aller Moden in eine obere und eine untere Mode aufgespalten wird.

8.1 Berücksichtigung der alternierenden J_2 -Kopplung

In diesem Unterkapitel wollen wir den Effekt einer alternierenden J_2 -Kopplung isoliert von der DM-Wechselwirkung untersuchen. Im Hamiltonoperator drückt sich diese Änderung der Übernächst-Nachbar-Kopplung durch

$$\mathcal{H}_{J_2} = J_2 \sum_{i,\tau} \delta (-1)^i \mathbf{S}_i^\tau \mathbf{S}_{i+2}^\tau \quad (8.1.1)$$

aus. Die Variable δ steht hierbei für den Anteil um den die Kopplung J_2 alterniert und wird im weiteren Verlauf verkürzt als Alternierung bezeichnet. Der Hamiltonoperator \mathcal{H}_{J_2} ist isotrop. Aus den vorherigen Analysen wissen wir, dass eine alternierende Wechselwirkung auf den Holmen zu einer Kopplung zwischen den Impulsen k und $k + \pi$ führt. Da die Alternierung spinisotrop ist, sorgt diese für eine Kopplung zwischen den Impulsen k und $k + \pi$ derselben Mode. Dies sorgt dafür, dass die Dispersion aller Moden in eine obere und eine untere Mode aufgespalten wird.

In Kapitel 3.4 wurde bereits das Kopplungsschema der Übernächst-Nachbar-Kopplung nach TSIRLIN vorgestellt. Die Struktur der Übernächst-Nachbar-Kopplungen, skizzierte

in Abbildung 3.4, besitzt ungerade Parität. Aus den vorherigen Analysen wissen wir, dass Terme mit ungerader Parität im Rahmen unserer Näherung keinen Beitrag zur Dispersion liefern. Damit die Alternierung in unserer Näherung einen Betrag liefert, legen wir fest, dass sie gerade Parität besitzt.

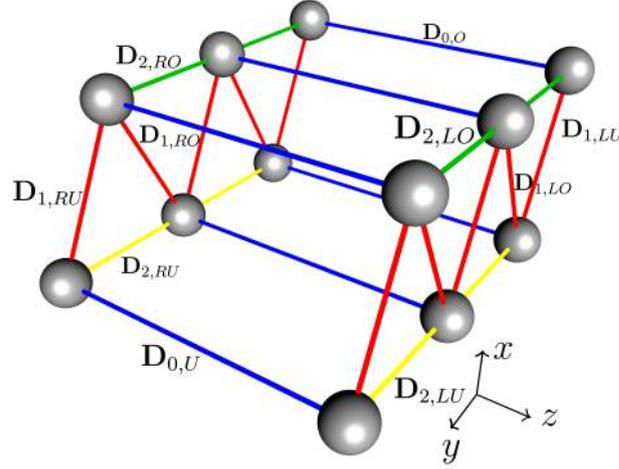


Abbildung 8.1: Schematische Darstellung der Spinleiterstruktur von BCPO bei alternierender Übernächst-Nachbar-Kopplung. Die Sprossenkopplungen sind in blau eingezeichnet, die Nächst-Nachbar-Kopplungen rot und die alternierenden Übernächst-Nachbar-Kopplungen sind grün und gelb gekennzeichnet. An den verschiedenen Bonds stehen bereits die Bezeichnungen der zugehörigen Dzyaloshinskii-Moriya Vektoren.

Um den Einfluss dieser Wechselwirkung auf die Dispersion zu bestimmen, muss wie in Unterkapitel 6.2 beschrieben wurde vorgegangen werden. Der erste Schritt ist, den Hamiltonoperator \mathcal{H}_{J_2} mit Hilfe der effektiven Spinoperatoren auf den effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{J_2}^{\text{eff}} = J_2 \sum_{i,\tau} \delta(-1)^i \mathbf{S}_{i,\text{eff}}^\tau \mathbf{S}_{i+2,\text{eff}}^\tau \quad (8.1.2)$$

abzubilden. Werden die effektiven Spinoperatoren durch die bosonischen Operatoren ausgedrückt, ergibt sich

$$\mathcal{H}_{J_2}^{\text{eff}} = 2J_2\delta \sum_{i,\alpha} \sum_{\delta,\delta'} a_\delta a_{\delta'} \left(t_{i+\delta}^{\alpha,\dagger} + t_{i+\delta}^\alpha \right) \left(t_{i+\delta'}^{\alpha,\dagger} + t_{i+\delta'}^\alpha \right), \quad (8.1.3)$$

mit $\alpha \in \{x, y, z\}$. Mittels Fouriertransformation wird der Hamiltonoperator auf die Form

$$\mathcal{H}_{J_2}^{\text{eff}} = 2J_2\delta \sum_{k,\alpha} a(k) a(k+\pi) \cos(2k) \left(t_k^{\alpha,\dagger} t_{-k-\pi}^{\alpha,\dagger} + 2t_k^{\alpha,\dagger} t_{k+\pi}^\alpha + t_k^\alpha t_{-k-\pi}^\alpha \right) \quad (8.1.4)$$

gebracht. An dem Hamiltonoperator erkennt man, dass die Mode α mit Impuls k an

die Mode α mit $k + \pi$ koppelt. Um den Einfluss der alternierenden J_2 -Kopplung auf die Dispersion zu berechnen, muss ein passender Ansatz für v gewählt werden, damit Gleichung 6.3.19 von \mathcal{H}_{J_2} erfüllt wird. In diesem Fall ist der Ansatz

$$v_{J_2} = v_1 t_k^{\alpha, \dagger} + v_2 t_{k+\pi}^{\alpha, \dagger} + v_3 t_{-k}^{\alpha} + v_4 t_{-k-\pi}^{\alpha} \quad (8.1.5)$$

in der Lage ein geschlossenes Gleichungssystem zwischen v_{J_2} und w_{J_2} aus $[\mathcal{H}_{J_2}, v_{J_2}] = w_{J_2}$ aufzustellen. Wir zeigen hier lediglich das Endergebnis dieser Rechnung auf:

$$\mathcal{M}_{J_2} = \begin{pmatrix} 0 & J_2(k) & 0 & -J_2(k) \\ J_2(k) & 0 & -J_2(k) & 0 \\ 0 & J_2(k) & 0 & -J_2(k) \\ J_2(k) & 0 & -J_2(k) & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.1.6)$$

Hierbei wurde die Abkürzung

$$J_2(k) = 4J_2 \delta a(k) a(k + \pi) \cos(2k) \quad (8.1.7)$$

eingeführt.

Zuerst möchten wir den Effekt der alternierenden J_2 -Kopplung auf die Dispersion der ungestörten Leiter untersuchen. Dazu müssen die Matrizen $\mathcal{M}_{\text{Leiter}}$, siehe Gleichung 6.4.29, und \mathcal{M}_{J_2} addiert und anschließend ihre Eigenwerte berechnet werden. Die Matrix $\mathcal{M}_{\text{Leiter}}$ wurde in Kapitel 6.2 für einen anderen Ansatz für v aufgestellt. Aufgrund der Isotropie des Hamiltonoperators $\mathcal{H}_{\text{Leiter}}$ ändert sich diese Darstellung bei dem Ansatz v_{J_2} nicht. Die Eigenwerte haben die Form

$$\omega_{\alpha}(k) = \pm \sqrt{\frac{1}{2}(\omega_1^2 + \omega_2^2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + 16\omega_1\omega_2(J_2(k))^2}}. \quad (8.1.8)$$

Hierbei gilt wieder

$$\omega_1 = \omega_0(k) \quad (8.1.9a)$$

$$\omega_2 = \omega_0(k + \pi). \quad (8.1.9b)$$

Die Alternierung der J_2 -Kopplung sorgt für ein Aufspalten der Dispersion jeder Mode in eine obere und eine untere. Da der Term $J_2(k)$ bei $k = \frac{\pi}{2}$ einen endlichen Wert besitzt, spalten die Moden an diesem Punkt auf.

Bei einer alternierenden J_1 -Kopplung wäre dies nicht der Fall, da die Alternierung dann multipliziert mit einem $\cos(k)$ in der Dispersion vorkäme. Ihr Beitrag verschwindet bei

$k = \frac{\pi}{2}$ und kann so an diesem Punkt nicht für eine Aufspaltung sorgen.

8.1.1 Analyse der Alternierung δ

In diesem Abschnitt werden wir den Effekt, den die alternierende J_2 -Kopplung auf die Dispersion ausübt, untersuchen. Der Parameter δ sorgt dafür, dass jede Mode α mit Impuls k mit sich selbst und mit Impuls $k + \pi$ wechselwirkt. Dies hat zur Folge, dass die Dispersion der ungestörten Leiter in eine obere und eine untere Mode aufspaltet. Da die eingeführte Alternierung isotrop ist, sind beide Zweige dreifach entartet.

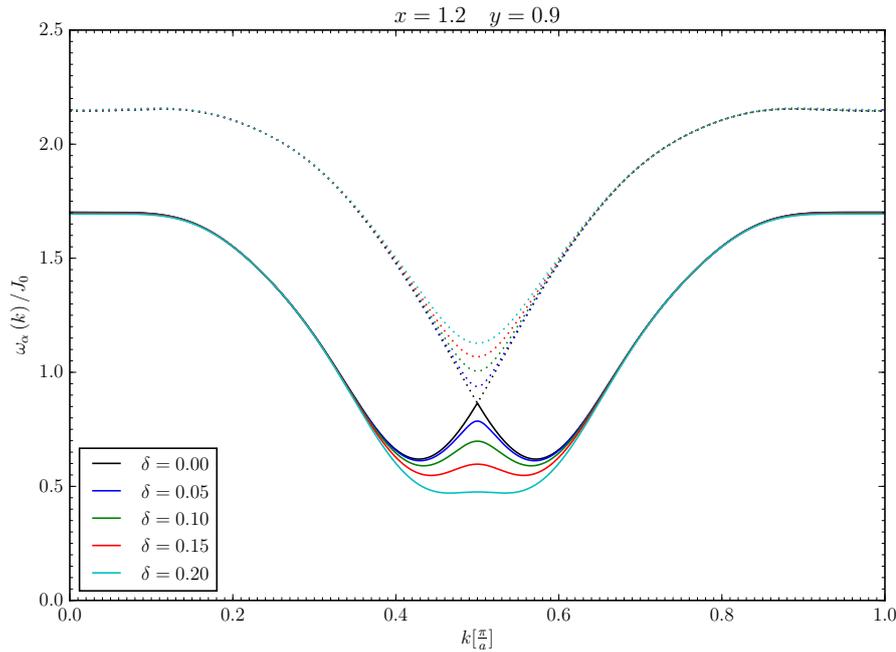


Abbildung 8.2: Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Mode der Dispersion $\omega_\alpha(k)$ in Abhängigkeit der Alternierung δ . Als Parameter für die isolierte frustrierte Spinleiter werden $x=1.2$ und $y=0.9$ gewählt.

Aufgrund der gebrochenen Translationssymmetrie durch die Alternierung δ wird die Brillouinzone halbiert. Um jedoch die Moden besser mit den vorherigen Abbildungen vergleichen zu können, wird die erste Brillouinzone gezeigt. Dabei ergibt sich der Modenverlauf in der zweiten reduzierten Brillouinzone durch Spiegelung an der Achse $k = \frac{\pi}{2a}$. In Abbildung 8.2 ist deutlich zu erkennen, dass ein endlicher δ -Wert zu einer Aufspaltung beider Moden am Rand der reduzierten Brillouinzone führt. Mit steigendem δ wächst die Lücke zwischen den Moden bei $k = \frac{\pi}{2a}$ und die Form der Moden flacht ab. Weitere Veränderungen sind nicht zu erkennen.

8.2 Symmetrien in BCPO mit alternierender J_2 -Kopplung

Mit der Einführung einer Alternierung der Übernächst-Nachbar-Kopplung sind zwei der fünf Symmetrien, siehe Unterkapitel 5.3, nicht mehr gegeben. Dies ist zum einen RS_y und zum anderen SS_{yz} . Bei diesen Symmetrien wird eine Verknüpfung zwischen dem unteren und oberen Anteil der Leiter hergestellt. Bezogen auf Abbildung 8.1 bedeutet dies, dass bei diesen Symmetrien die grünen Kopplungen auf die gelben Kopplungen abgebildet werden. Diese sind jedoch nicht mehr identisch und damit sind die genannten Symmetrien nicht mehr erhalten. Das bedeutet, dass die Symmetrieüberlegungen bezüglich der \mathbf{D} -Vektoren, die in Unterkapitel 5.3 aufgeführt wurden, von neuem durchgeführt werden müssen. Die nachfolgende Tabelle fasst die resultierenden Ergebnisse der Symmetrieanalyse zusammen.

D_{ij}^α	entlang der Holme	Parität
D_0^y	-	ungerade
D_1^x	gleichbleibend	ungerade
D_1^y	alternierend	ungerade
D_1^z	gleichbleibend	gerade
D_2^x	-	ungerade
D_2^z	-	gerade

Tabelle 8.1: Verhalten der \mathbf{D} -Vektoren entlang der Holme der Leiter und bezüglich einer Spiegelung in der Mitte einer Sprosse bei alternierender J_2 -Kopplung. Nicht aufgeführte Komponenten verschwinden. Der Strich (-) bedeutet, dass keine Aussage über das Verhalten der Vektorkomponente mit Hilfe der bestehenden Symmetrien gemacht werden kann.

Aufgrund der gebrochenen Symmetrien ist es nicht mehr möglich eine Aussage über das Vorzeichenverhalten der Komponenten D_0^y , D_2^x und D_2^z zu treffen. Die Alternierung δ sorgt dafür, dass wir keine Verknüpfungen zwischen den Vektoren \mathbf{D}_0 und \mathbf{D}_2 mit jeweils Index U und O , siehe Abbildung 8.1, herstellen können. Das Vorzeichenverhalten der Komponenten D_1^x und D_1^y ändert sich nicht, siehe Tabelle 5.2.

Über die Parität aller Komponenten kann hingegen weiterhin eine Aussage getroffen werden. Dies liegt an der noch immer existierenden Symmetrie S_{xy} . Diese sorgt dafür, dass weiterhin Verknüpfungen für den \mathbf{D} -Vektoren mit Index L und Index R hergestellt werden können. So kann die Parität der einzelnen \mathbf{D} -Komponenten festgelegt werden. Die Parität der Komponente D_0^y bezieht sich auch in diesem Abschnitt nicht auf die Komponente selbst, sondern auf ihren Operatoranteil im dazugehörigen Hamiltonopera-

tor.

Bei der Durchführung der Symmetrieüberlegungen fällt auf, dass nun die Komponente D_1^z nicht mehr verschwindet. Desweiteren ist es interessant, dass diese Komponente gerade Parität besitzt. Diese Eigenschaft hat zur Folge, dass die Komponente D_1^z einen Beitrag zur Dispersion in linearer Ordnung liefern kann.

Wir wollen annehmen, dass die Alternierung δ ca. 10-15 % beträgt. Das bedeutet, dass der Wert der Komponente D_1^z , die nur aufgrund der Alternierung nicht verschwindet, auch ca. 10-15 % von den Werten der Komponenten D_1^x und D_1^y ausmachen sollte. Die geringe Alternierung soll die Symmetrie der frustrierten Spinleiter nicht in dem Ausmaß ändern, dass sich das Vorzeichenverhalten und die Parität der einzelnen \mathbf{D} -Vektoren im Vergleich zu Kapitel 5.3 ändern. Das bedeutet konkret, dass wir auch weiterhin für die Komponenten D_0^y , D_2^x und D_2^z dasselbe Vorzeichenverhalten wie in Tabelle 5.2 annehmen.

Es ist ebenfalls wichtig die Parität der Γ -Komponenten von neuem zu analysieren. Bei dieser Untersuchung fällt auf, dass sich das Vorzeichenverhalten und die Parität der Γ -Terme aus Tabelle 6.1 nicht ändern. Die einzigen zusätzlich nicht verschwindenden Γ -Terme sind Γ_1^{xz} und Γ_1^{yz} . Jedoch besitzen diese Terme ungerade Parität und tragen so zur Dispersion in unserer Näherung nicht bei. Aufgrund der zusätzlich existierenden Komponente D_1^z ändern sich die Werte der Komponenten $\Gamma_1^{\alpha\alpha}$, siehe Gleichung 5.1.13.

Das Ergebnis der Symmetrieanalyse ist also, dass die Komponente D_1^z nun nicht mehr verschwindet und einen Beitrag in linearer Ordnung in \mathbf{D} liefert. Es existieren keine zusätzlichen Γ -Terme, die in Ordnung \mathbf{D}^2 einen Beitrag zur Dispersion liefern könnten. Lediglich der Wert der Komponenten $\Gamma_1^{\alpha\alpha}$ ändert sich.

8.3 Transformation des linearen Beitrags von D_1^z

Um den Einfluss der Komponente D_1^z auf die Dispersion zu untersuchen, muss zuerst der dazugehörige Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{NN},z}^{\text{DM}} = \sum_{i,\tau} D_{1_i}^{z,\tau} (\mathbf{S}_i^\tau \times \mathbf{S}_{i+1}^\tau)_z \quad (8.3.10)$$

gemäß Unterkapitel 6.2 transformiert werden. Durch Ersetzen der Spinoperatoren durch effektive Spinoperatoren wird der Hamiltonoperator auf den effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{NN},z}^{\text{DM,eff}} = \sum_{i,\tau} D_{1_i}^{z,\tau} (\mathbf{S}_{i,\text{eff}}^\tau \times \mathbf{S}_{i+1,\text{eff}}^\tau)_z \quad (8.3.11a)$$

$$= 2D_1^z \sum_i S_{i,\text{eff}}^{x,L} \left(S_{i+1,\text{eff}}^{y,L} - S_{i-1,\text{eff}}^{y,L} \right) \quad (8.3.11b)$$

abgebildet. Werden die effektiven Spinoperatoren durch die bosonischen Operatoren ausgedrückt und diese anschließend fouriertransformiert, ergibt sich

$$\mathcal{H}_{\text{NN},z}^{\text{DM,eff}} = 4D_1^z i \sum_k a^2(k) \sin(k) \left(t_k^{x,\dagger} \left(t_{-k}^{y,\dagger} + t_k^y \right) - \text{h.c.} \right). \quad (8.3.12)$$

Dieser Hamiltonoperator sorgt dafür, dass die x -Mode mit Impuls k an die y -Mode mit Impuls k koppelt. Wollen wir den Effekt D_1^z auf die Dispersion der frustrierten Spinleiter betrachten, müssen wir einen Ansatz für $v_{D_1^z}$ wählen, der $[\mathcal{H}_{\text{NN},z}^{\text{DM,eff}}, v_{D_1^z}] = w_{D_1^z}$ erfüllt. Ein passender Ansatz ist durch

$$v_{D_1^z} = v_1 t_k^{x,\dagger} + v_2 t_k^{y,\dagger} + v_3 t_{-k}^x + v_4 t_{-k}^y \quad (8.3.13)$$

gegeben. Die Matrix $\mathcal{M}_{D_1^z}$, die den Zusammenhang zwischen $v_{D_1^z}$ und $w_{D_1^z}$ aus $[\mathcal{H}_{\text{NN},z}^{\text{DM,eff}}, v_{D_1^z}] = w_{D_1^z}$ beschreibt, hat die Form

$$\mathcal{M}_{D_1^z} = \begin{pmatrix} 0 & iD_1^z(k) & 0 & -iD_1^z(k) \\ -iD_1^z(k) & 0 & iD_1^z(k) & 0 \\ 0 & iD_1^z(k) & 0 & -iD_1^z(k) \\ -iD_1^z(k) & 0 & iD_1^z(k) & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.3.14)$$

Hierbei wurde die Abkürzung

$$D_1^z(k) = 4D_1^z a^2(k) \sin(k) \quad (8.3.15)$$

eingeführt.

Um nun den Einfluss der Komponente D_1^z auf die Dispersion der ungestörte Dispersion zu analysieren, muss auch für den Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{Leiter}}$ die Matrix $\mathcal{M}_{\text{Leiter}}$ mit dem Ansatz für $v_{D_1^z}$ aufgestellt werden. Die beiden Matrizen ergeben addiert

$$\mathcal{M}_{\text{Gesamt}, D_1^z} = \begin{pmatrix} \omega_0(k) & iD_1^z(k) & 0 & -iD_1^z(k) \\ -iD_1^z(k) & \omega_0(k) & iD_1^z(k) & 0 \\ 0 & iD_1^z(k) & -\omega_0(k) & -iD_1^z(k) \\ -iD_1^z(k) & 0 & iD_1^z(k) & -\omega_0(k) \end{pmatrix}. \quad (8.3.16)$$

Die Eigenwerte dieser Matrix haben die Form:

$$\omega_{1,2}(k) = \pm \sqrt{(\omega_0(k))^2 \pm 2\omega_0(k) D_1^z(k)}. \quad (8.3.17)$$

Die Dispersion der ungestörten Leiter spaltet durch die Komponente D_1^z auf. Es ist wichtig zu beachten, dass bei dem betrachteten Fall die x - und y -Moden entartet sind. Dies liegt an der Isotropie der ungestörten Leiter. Wenn die Dispersion der x - und y -Mode identisch ist, so sorgt eine Kopplung zwischen der x - und y -Mode bei gleichem Impuls k nicht für eine Aufhebung der Entartung beider Moden. Deswegen bleibt die Dispersion der beiden Moden weiterhin entartet, auch wenn die Komponente D_1^z einen endlichen Wert besitzt. Diese Tatsache erkennt man auch an dem gewählten Ansatz für $v_{D_1^z}$ aus Gleichung 8.3.13. Dort besitzen die Operatoren der x und y -Mode denselben Impuls k bzw. $-k$. Bei dem Ansatz für v aus Gleichung 6.3.23 waren die Impulse der Operatoren der x - und y -Mode um π verschoben und damit am Ende auch deren Dispersionen. An Formel 8.3.17 ist zu erkennen, dass ein Vorzeichenwechsel von D_1^z zur Folge hat, dass die untere und die obere Moden vertauschen.

8.3.1 Analyse der D_1^z -Komponente

In diesem Abschnitt untersuchen wir den Effekt der D_1^z -Komponente auf die ungestörte Spinleiter. Die Komponente hebt die Entartung der x - und y -Mode nicht auf. Die Dispersion der ungestörten Spinleiter wird in eine obere und eine untere Mode aufgespalten.

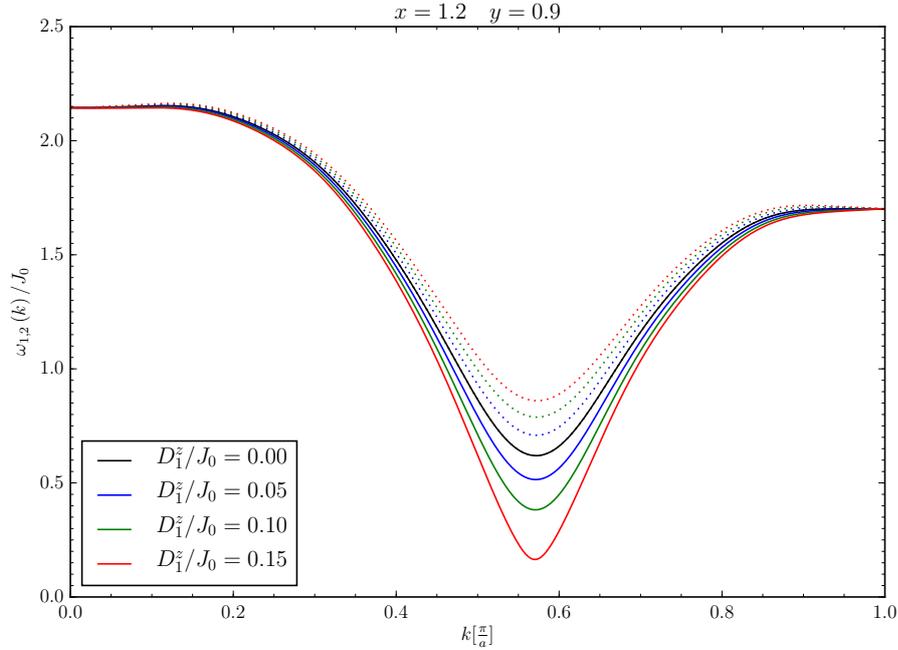


Abbildung 8.3: Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Mode $\omega_{1,2}(k)$ in Abhängigkeit der Komponente D_1^z . Als Parameter für die isolierte frustrierte Spinleiter werden $x=1.2$ und $y=0.9$ gewählt.

Die Abbildung zeigt, dass die obere bzw. untere Mode bei steigender D_1^z -Komponente angehoben bzw. abgesenkt wird. Die grobe Form der Dispersion wird beibehalten. Die obere Mode flacht mit steigendem Wert von D_1^z weiter ab. Die untere Mode wird im dem Bereich des Minimums stark abgesenkt.

8.4 Einfluss der Alternierung δ auf die x - und y -Mode

In Kapitel 6 gab es keine Komponente, die für eine Kopplung zwischen der x - und y -Mode bei gleichem Impuls k sorgt. Soll der Beitrag von D_1^z in die Berechnung der Dispersion miteinfließen, ist eine Erweiterung für den Ansatz für v nötig, mit dem die Matrizen \mathcal{M} aufgestellt werden, die den Zusammenhang zwischen v und w aus dem Kommutator $[\mathcal{H}, v] = w$ beschreiben. Der Ansatz für v aus Gleichung 6.3.23 ist bei der

Berücksichtigung der Komponente D_1^z nicht mehr vollständig. Er erzeugt beim Berechnen des Kommutators $[\mathcal{H}_{D_1^z}, v]$ neue Operatortermine, die nicht in v enthalten sind, z.B. $t_k^{y,\dagger}$. Das bedeutet, dass eine Erweiterung des Ansatzes für v nötig ist. Der Ansatz für v ist in diesem Fall gegeben durch

$$v = v_1 t_k^{x,\dagger} + v_2 t_{k+\pi}^{x,\dagger} + v_3 t_{-k}^x + v_4 t_{-k-\pi}^x \\ + v_5 t_k^{y,\dagger} + v_6 t_{k+\pi}^{y,\dagger} + v_7 t_{-k}^y + v_8 t_{-k-\pi}^y \quad (8.4.18)$$

gegeben. Das bedeutet, dass sich das ursprüngliche 4x4-Problem nun auf ein 8x8-Problem erweitert. Um letztendlich alle Beiträge der DM-Wechselwirkung aus Kapitel 6 und aus diesem Kapitel zu berücksichtigen, ist es nötig für jeden Hamiltonoperator \mathcal{H} eine Matrix aufzustellen, die das Gleichungssystem zwischen v und w aus $[\mathcal{H}, v] = w$ beschreibt. Die im vorherigen Kapitel aufgestellten Matrizen müssen nun auf den erweiterten Ansatz von v aus Gleichung 8.4.18 umgeschrieben und addiert werden. Die Struktur der Matrix, die durch Addition aller Matrizen entsteht, ist durch

$$\mathcal{M}_{\text{Gesamt},xy} = \begin{pmatrix} \mathcal{M}_{xx} & \mathcal{M}_{xy} \\ \mathcal{M}_{yx} & \mathcal{M}_{yy} \end{pmatrix} \quad (8.4.19)$$

gegeben. Die Einträge \mathcal{M}_{xx} , \mathcal{M}_{yy} , \mathcal{M}_{xy} und \mathcal{M}_{yx} stehen jeweils für 4x4-Matrizen, die die jeweiligen Kopplungen zwischen den Moden beinhalten. Die Matrix \mathcal{M}_{xx} ist gegeben durch

$$\mathcal{M}_{xx} = \begin{pmatrix} \omega_1 + A(k) & J_2(k) & -A(k) & -J_2(k) \\ J_2(k) & \omega_2 + A(k + \pi) & -J_2(k) & -A(k + \pi) \\ A(k) & J_2(k) & -\omega_1 - A(k) & -J_2(k) \\ J_2(k) & A(k + \pi) & -J_2(k) & -\omega_2 - A(k + \pi) \end{pmatrix}. \quad (8.4.20)$$

Der Koeffizient $A(k)$ ist in Gleichung 6.5.47a definiert. Die Ersetzungen für ω_1 , ω_2 und $J_2(k)$ sind in Gleichungen 6.4.32c, 6.4.32d und 8.1.7 zu finden.

Die Matrix \mathcal{M}_{yy} hat die Form

$$\mathcal{M}_{yy} = \begin{pmatrix} \omega_1 + E(k) & J_2(k) & -E(k) & -J_2(k) \\ J_2(k) & \omega_2 + E(k + \pi) & -J_2(k) & -E(k + \pi) \\ E(k) & J_2(k) & -\omega_1 - E(k) & -J_2(k) \\ J_2(k) & E(k + \pi) & -J_2(k) & -\omega_2 - E(k + \pi) \end{pmatrix}. \quad (8.4.21)$$

Der Koeffizienten $E(k)$ und $E(k + \pi)$ sind durch

$$E(k) = d_1 + \Gamma_0^{yy}(k + \pi) + \Gamma_1^{yy}(k + \pi) + \Gamma_2^{yy}(k + \pi) \quad (8.4.22a)$$

$$E(k + \pi) = d_2 + \Gamma_0^{yy}(k) + \Gamma_1^{yy}(k) + \Gamma_2^{yy}(k) \quad (8.4.22b)$$

definiert. Die Ersetzungen lassen sich in den Gleichungen 6.4.32e, 6.4.32f und 6.5.48e bis 6.5.48g nachschauen.

Die Matrix \mathcal{M}_{xy} ist gegeben durch

$$\mathcal{M}_{xy} = \begin{pmatrix} iD_1^z(k) & F_{-,+}(k) & -iD_1^z(k) & F_{+,-}(k) \\ F_{+,+}(k) & iD_1^z(k + \pi) & F_{-,-}(k) & -iD_2^z(k + \pi) \\ iD_1^z(k) & F_{-,+}(k) & -iD_1^z(k) & F_{+,-}(k) \\ F_{+,+}(k) & iD_1^z(k + \pi) & F_{-,-}(k) & -iD_2^z(k + \pi) \end{pmatrix} \quad (8.4.23)$$

Hierbei haben wir den Koeffizienten

$$F_{\pm,\pm}(k) = \pm i\Gamma_1^{xy}(k) \pm iD_2^z(k) \quad (8.4.24)$$

eingeführt. Die Koeffizienten $D_2^z(k)$, $D_1^z(k)$ und $\Gamma_1^{xy}(k)$ sind in Gleichungen 6.4.32g, 8.3.15 und 6.5.48d definiert.

Die Form der Matrix \mathcal{M}_{yx} ist durch

$$\mathcal{M}_{yx} = \begin{pmatrix} -iD_1^z(k) & F_{-,-}(k) & iD_1^z(k) & F_{+,+}(k) \\ F_{+,-}(k) & -iD_1^z(k + \pi) & F_{-,+}(k) & iD_1^z(k + \pi) \\ -iD_1^z(k) & F_{-,-}(k) & iD_1^z(k) & F_{+,+}(k) \\ F_{+,-}(k) & -iD_1^z(k + \pi) & F_{-,+}(k) & iD_1^z(k + \pi) \end{pmatrix} \quad (8.4.25)$$

gegeben.

Die Eigenwerte der 8x8-Matrix $\mathcal{M}_{\text{Gesamt},xy}$ können nicht mehr analytisch bestimmt werden, sondern müssen numerisch berechnet werden. Insgesamt erhält man viermal zwei Eigenwerte $\pm\omega(k)$. Die Eigenwerte werden absteigend nach ihrem Wert nummeriert.

8.5 Einfluss der Alternierung δ auf die z -Mode

Die Komponente D_1^z sorgt für eine Kopplung der x - und y -Mode bei gleichem Impuls k . Die z -Mode bleibt also durch eine Einführung der Alternierung δ weiterhin von den anderen Moden isoliert. Jedoch hat der Hamiltonoperator \mathcal{H}_{J_2} auf die z -Mode den Effekt, dass die z -Mode mit sich selbst bei den Impulsen k und $k + \pi$ wechselwirkt. Das hat zur Folge, dass die Berechnung der Dispersion der z -Mode nicht mehr mit dem Ansatz aus

Gleichung 6.6.58 gültig ist. Der Ansatz muss auf

$$v_{J_2,z} = v_1 t_k^{z,\dagger} + v_2 t_{k+\pi}^{z,\dagger} + v_3 t_{-k}^z + v_4 t_{-k-\pi}^z \quad (8.5.26)$$

erweitert werden. Für die Hamiltonoperatoren $\mathcal{H}_{\text{Leiter}}$, \mathcal{H}' , $\mathcal{H}_{\text{Sprosse,zz}}^{\Gamma,\text{eff}}$, $\mathcal{H}_{\text{NN,zz}}^{\Gamma,\text{eff}}$, $\mathcal{H}_{\text{NNN,zz}}^{\Gamma,\text{eff}}$ und \mathcal{H}_{J_2} müssen nun die dazugehörigen 4x4-Matrizen für die Gleichungssysteme $[\mathcal{H}, v_{J_2,z}] = w_{J_2,z}$ aufgestellt und addiert werden. Wir präsentieren an dieser Stelle lediglich das Ergebnis

$$\mathcal{M}_{\text{Ges},z,J_2} = \begin{pmatrix} \omega_1 + D(k) & J_2(k) & -D(k) & -J_2(k) \\ J_2(k) & \omega_2 + D(k + \pi) & -J_2(k) & -D(k + \pi) \\ D(k) & J_2(k) & -\omega_1 - D(k) & -J_2(k) \\ J_2(k) & D(k + \pi) & -J_2(k) & -\omega_2 - D(k + \pi) \end{pmatrix}. \quad (8.5.27)$$

Die aufgeführten Koeffizienten sind in Gleichungen 6.6.60, 8.1.7 und 8.1.9 zu finden.

Die beiden positiven Eigenwerte sagen aus, dass die z -Mode aufgrund der alternierenden J_2 -Kopplung in eine untere und eine obere Mode aufspaltet, so wie die x - und y -Mode in Unterkapitel 6.5. Die Eigenwerte sind

$$\omega_z(k) = \sqrt{\frac{1}{2}\Omega_3 \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Omega_4^2 + 16\omega_1\omega_2(J_2(k))^2}}.$$

mit

$$\Omega_3 = \omega_1^2 + 2\omega_1 D(k) + \omega_2^2 + 2\omega_2 D(k + \pi) \quad (8.5.28a)$$

$$\Omega_4 = \omega_1^2 + 2\omega_1 D(k) - \omega_2^2 - 2\omega_2 D(k + \pi). \quad (8.5.28b)$$

Auf eine ausführliche Analyse der einzelnen Terme verzichten wir an dieser Stelle und versuchen nun die experimentellen Messdaten mit Hilfe der Dispersionen dieses Modells mit niedrigeren \mathbf{D} -Werten zu beschreiben.

8.6 Vergleich mit experimentellen Daten

In diesem Kapitel werden wir unsere neu berechneten Dispersionen für die x -, y - und z -Mode verwenden, um die Werte der \mathbf{D} -Vektoren, der Alternierung δ und die Energieskala J_0 zu finden, mit denen die bestmögliche Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment vorliegt. Unser Ziel ist es mit Hilfe einer Alternierung von ca. 10-15 % den Komponenten D_1^x und D_1^y kleinere Werte als $0.4J_1$ zuzuordnen.

Für den ersten Versuch die Dispersionen der einzelnen Moden an die experimentellen Daten anzupassen, werden wieder die Parameter $x = 1.2$ und $y = 0.9$ für die frustrierte Spinleiter verwendet. Die Zwischen-Leiter-Kopplung setzen wir wieder auf $J' = 1.50$ meV fest. Die Abbildungen 8.4 und 8.5 zeigen die obere und die untere Dispersion der z -Mode und die vier positiven Eigenwerte der x - und y -Mode. Die gewählten Werte für die \mathbf{D} -Komponenten und die Sprossenkopplung J_0 sind bei den Abbildung angegeben. In den nachfolgenden Abbildungen werden die oberen Moden gepunktet und die unteren Moden durchgezogen dargestellt.

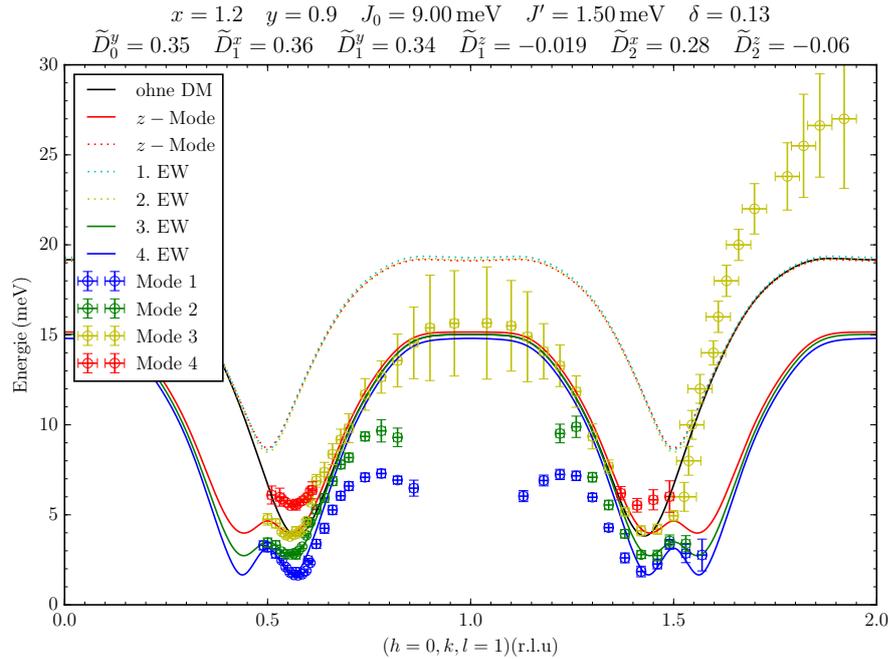


Abbildung 8.4: Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.

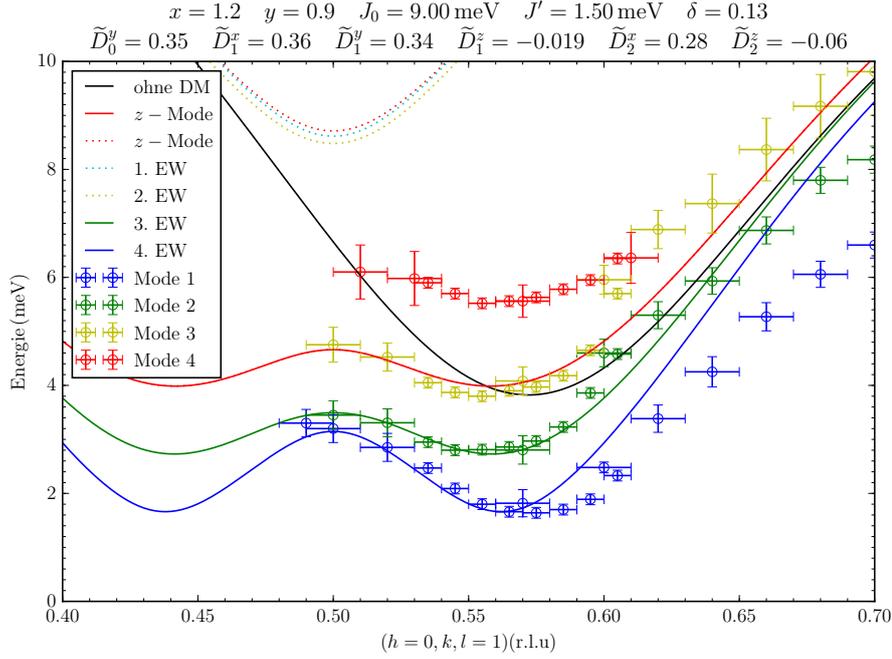


Abbildung 8.5: Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 8.4.

Wie in Kapitel 7 fallen bei den Kurvenverläufen mehrere Punkte auf.

Modenanzahl

Wie in den vorherigen Analysen gibt es keine Mode, die Mode 4 beschreiben kann. Aus unseren Berechnungen ergeben sich insgesamt sechs Moden. Zwei dieser Moden gehören zur z -Mode und vier zur x - und y -Mode. Diese sechs Moden teilen sich in drei obere und drei untere Zweige auf. Es ist deutlich zu erkennen, dass die drei unteren Moden eine gute Übereinstimmung mit den Moden 1, 2 und 3 im Bereich des Minimums erreichen. Die oberen Moden liegen deutlich oberhalb der Datenpunkte und sind nicht geeignet diese zu beschreiben.

Wahl des Parameters δ

Der gewählte Wert für die Alternierung der J_2 -Kopplung wurde so festgelegt, dass die z -Mode auf dem Messpunkt von Mode 3 bei $k = \frac{\pi}{2}$ liegt. Es wurde zusätzlich darauf geachtet, dass δ nicht beliebig groß gewählt wird, da sonst die bestehende W-Form der Dispersion zu sehr abflacht, siehe Abbildung 8.2.

Wahl der Parameter \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y

Die Werte der relativen Komponenten \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y sind verglichen mit den Parametern in Abbildung 7.4 deutlich gesunken. Ohne die Einführung der J_2 -Alternierung wurden den Komponenten die Werte $\tilde{D}_1^x = 0.48$ und $\tilde{D}_1^y = 0.61$ zugeordnet. Mit Alternierung

δ sind die Werte auf $\tilde{D}_1^x = 0.36$ und $\tilde{D}_1^y = 0.34$ gesunken. Die kleineren Werte der \mathbf{D}_1 -Komponenten sind mit der Alternierung δ zu erklären. Mit Hilfe des Parameter δ können alle Moden am Punkt $k = \frac{\pi}{2}$ abgesenkt werden. Es wird darauf geachtet, δ so einzustellen, dass alle Moden ungefähr auf Mode 3 bei $k = \frac{\pi}{2}$ liegen, also bei 4.75 meV. Die restlichen \mathbf{D} -Komponenten sorgen dafür, dass die x - und y -Mode bei $k = \frac{\pi}{2}$ auf die Werte 3.20 meV und 3.45 meV abgesenkt werden.

Aufspaltung zwischen den beiden untersten Moden

Bei der Anpassung der Kurven fällt auf, dass bereits geringe Änderungen von \tilde{D}_1^z im Bereich der dritten Nachkommastelle eine enorme Auswirkung auf die Dispersion haben, siehe Unterkapitel 8.3.1. Die Komponente sorgt dafür, dass die x - und y -Mode an der Stelle $k = \frac{\pi}{2}$ aufspalten. Der gewählte Wert für \tilde{D}_1^z ist negativ und beträgt ca. 5% von den relativen Werten für \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y . Unsere Erwartung war, dass der Wert von D_1^z ca. 10-15% von \tilde{D}_1^x bzw. \tilde{D}_1^y ausmacht. Damit ist der Wert für \tilde{D}_1^z kleiner als wir erwartet hatten.

In Unterkapitel 8.3.1 wurde erwähnt, dass ein negativer Wert von \tilde{D}_1^z zu einer zu starken Erhöhung der unteren Mode führt. Die Komponente \tilde{D}_1^z ist jedoch alleine nicht für die Aufspaltung zwischen der x - und y -Mode verantwortlich. Die Einführung des Parameter δ hat zur Folge, dass die Terme, die bei $k = \frac{\pi}{2}$ nicht verschwinden, nun auch für eine Aufspaltung der x - und y -Mode sorgen. Das bedeutet, dass nun die Komponenten D_0^y und D_2^x mit in unsere Analyse einbezogen werden. Diese geben einen Beitrag bei $k = \frac{\pi}{2}$, siehe Gleichungen 6.5.48, und sorgen nun an diesem Punkt für eine Aufspaltung zwischen der x - und y -Mode.

Wahl des Parameters \tilde{D}_2^z

Der Parameter D_2^z wurde auch hier negativ gewählt, wie schon im Kapitel 7, um eine bessere Übereinstimmung am Minimum zu erreichen.

Form der z -Mode

In Abbildung 8.5 ist zu erkennen, dass der Bereich um das Minimum nun von allen Moden erfasst werden kann. Für die z -Mode passt ebenfalls der Verhalten um den Bereich $k = \pi$.

Abknicken der Moden 1 und 2

Das Problem bezüglich des Abfalls der Mode 1 und Mode 2 im Bereich $k = 0.75\pi$ bis $k = \pi$ besteht weiterhin. Die Form der Dispersionen passt in diesem Bereich nicht zu den Messdaten und lässt sich mit Hilfe der \mathbf{D} -Vektoren in diesem Bereich nicht ändern. Unsere Vermutung ist, dass in diesem Bereich das Zweiteilchenkontinuum auf die Di-

spersion trifft, wie bereits in Kapitel 7 erwähnt wurde.

Verhältnis zwischen hohen und niedrigen Energien

Die Schwierigkeit die niedrigen Energien am Minimum und die hohen Energie bei ca. 27 meV zu erfassen, besteht weiterhin. Durch Einführen der Alternierung δ wurden die hohen Energien der z -Mode von ursprünglich 19 meV auf 15 meV abgesenkt. In diesem Punkt stellt die Einführung der Alternierung δ eine Verschlechterung dar.

Um eine Verbesserung des Verhältnisses zwischen hohen und niedrigen Energien bei der z -Mode zu erlangen, nehmen wir wie in den vorherigen Analysen auch hier eine Vergrößerung des Parameters x vor und legen für diese Dispersion die passenden Werte für die **D**-Vektoren, die Alternierung δ und die Energieskala J_0 fest.

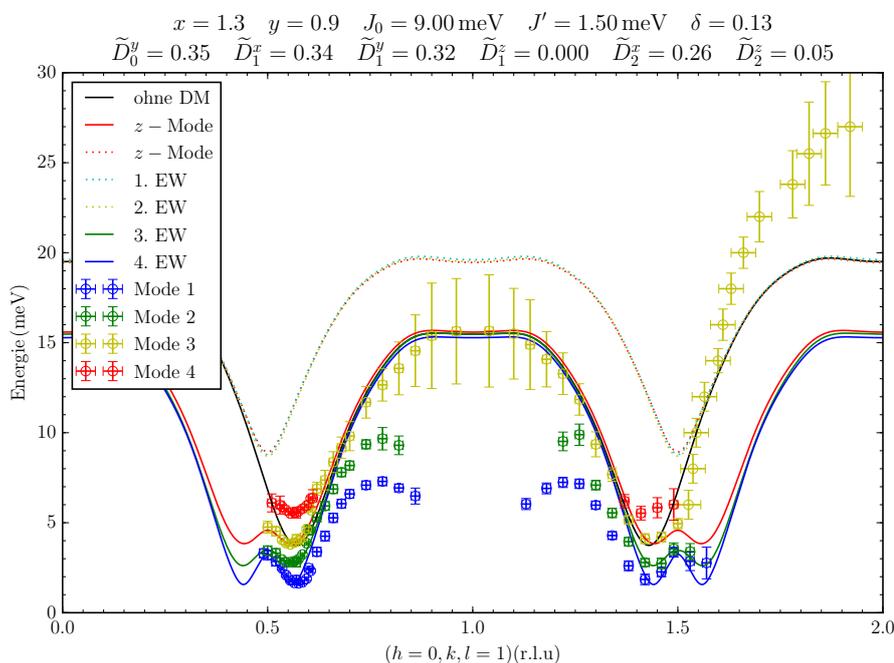


Abbildung 8.6: Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der **D**-Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.

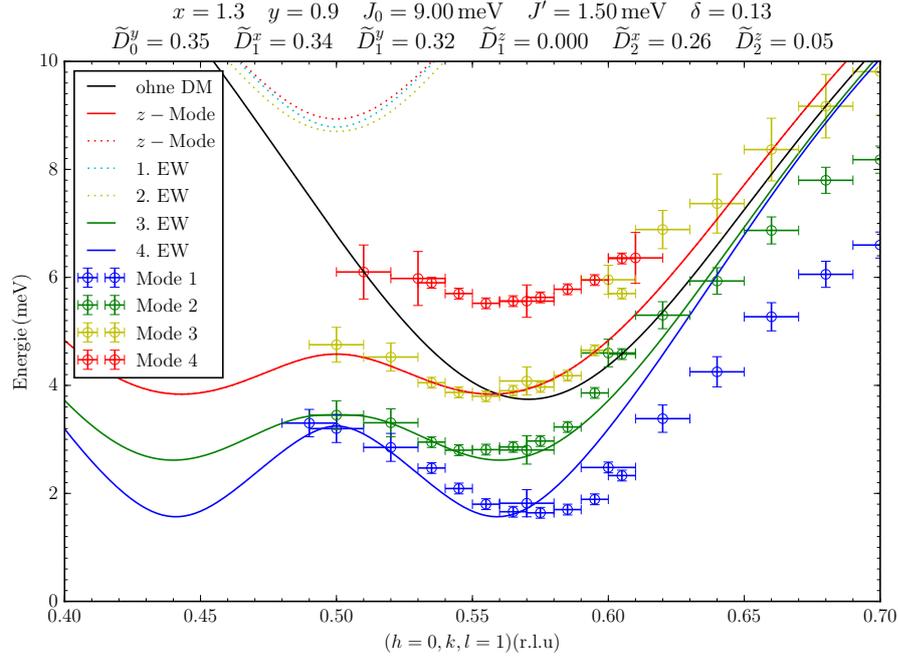


Abbildung 8.7: Vergrößerte Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 8.6.

Vergleicht man Abbildung 8.6 ($x = 1.3$) mit Abbildung 8.4 ($x = 1.2$) so fällt auf, dass die Erhöhung des Parameters x nicht den gewünschten Effekt erzielt. Die hohen Energien der z -Mode liegen weiterhin bei ca. 15 meV. Eine Veränderung des Parameters x sorgt dafür, dass sich die Form der Dispersionen im Bereich des Minimums so stark verändert, dass die Werte der \mathbf{D} -Komponenten geändert werden müssen, damit die Kurven am Minimum zu den Messdaten passen. Jedoch sorgen diese gewählten Parameter nicht zusätzlichen für eine bessere Übereinstimmung zwischen den berechneten Kurven und den Messdaten. Das Verhältnis zwischen den hohen und niedrigen Energien ändert sich nicht bemerkbar.

In Abbildung 8.7 ist gut zu erkennen, dass die Komponente D_1^z nicht allein für die Aufspaltung zwischen x - und y -Mode verantwortlich ist. Trotz verschwindender D_1^z -Komponente existiert eine Aufspaltung zwischen der x - und y -Mode. Die Parameter \tilde{D}_0^y , \tilde{D}_2^x und \tilde{D}_2^z sind mittels ihrer Γ -Terme, siehe Gleichungen 6.5.48, für eine Aufspaltung der Moden bei $k = \frac{\pi}{2}$ verantwortlich, da sie in diesem Punkt einen Beitrag liefern. Bei den vorherigen Analysen ohne Alternierung δ konnten diese Komponenten nicht für eine Aufspaltung zwischen der x - und y -Mode sorgen. Das bedeutet also, dass letztendlich die Alternierung δ den Effekt hat, dass die x - und y -Mode aufspalten können.

Der Bereich um das Minimum von Mode 1 und 2 wird in Abbildung 8.7 jedoch nicht so gut erfasst wie in Abbildung 8.5. Wir konnten bei unseren Analysen für diese Wahl von

x und y keinen Satz an Parameter finden, der bessere Ergebnisse erzielt.

Als Fazit können wir festhalten, dass die Parameter $x = 1.2$, $y = 0.9$ und $J' = 1.5 \text{ meV}$ besser geeignet sind als die Parameter $x = 1.3$, $y = 0.9$ und $J' = 1.5 \text{ meV}$, um die experimentellen Daten zu beschreiben.

Um eine weitere Verbesserung für das Verhältnis zwischen niedrigen und hohen Energien zu erlangen, haben wir als weiteren Datensatz die Werte $x = 1.4$ und $y = 0.85$ gewählt. Wie wir bereits in Kapitel 7 gesehen haben, sorgt eine Vergrößerung von x bei gleichbleibendem y dafür, dass die ungestörte Dispersion im Bereich $k = \pi$ gewisse Ausbeulungen annimmt. Eine Verringerung des Parameter y sorgt dafür, dass diese Verformungen geglättet werden, gleichzeitig wird die Position des Minimum für $k > \frac{\pi}{2}$ zu höheren k -Werten verschoben.

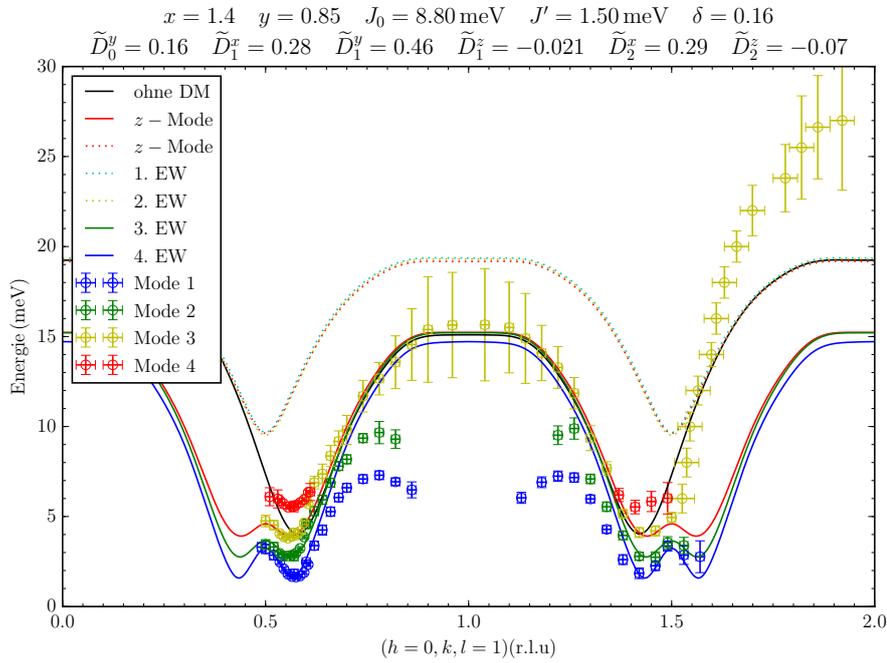


Abbildung 8.8: Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.

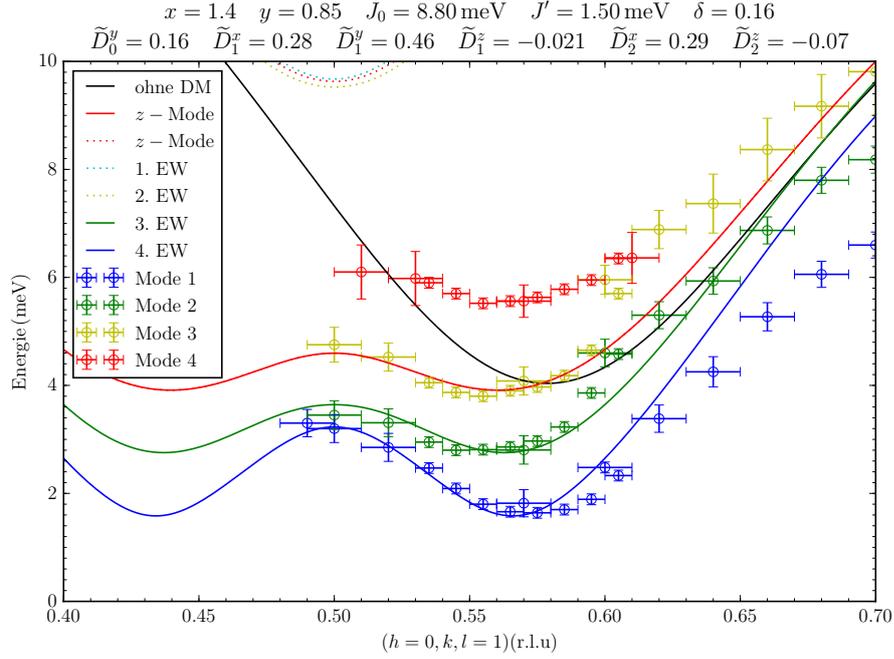


Abbildung 8.9: Vergrößerte Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 8.8.

Bei diesem Parametersatz ist ebenfalls keine Verbesserung des Verhältnisses zwischen den niedrigen und hohen Energien der z -Mode zu erkennen. Die hohen Energien der z -Mode liegen weiterhin bei ca. 15 meV.

Um den Bereich des Minimums passen die Kurven besser als bei dem Parametersatz für $x = 1.3$ und $y = 0.9$. Auffällig ist der große relative Wert für die Komponente $\tilde{D}_1^y = 0.46$. Da es unser Ziel ist die Werte der \mathbf{D} -Vektoren zu verkleinern, ist nach unserem Ermessen dieser gewählte Parametersatz für x und y nicht passend.

Als Fazit können wir festhalten, dass die Parameter $x = 1.2$, $y = 0.9$ und $J' = 1.5 \text{ meV}$ am besten geeignet sind, um die experimentellen Messdaten zu beschreiben. Bei diesen Parameterwerten kann der Bereich des Minimums am besten beschrieben werden. Zusätzlich sind die gewählten Werte der \mathbf{D} -Vektoren verglichen mit denen anderer x - und y -Werte am kleinsten.

Zum Abschluss unserer Analysen können wir folgende Ergebnisse festhalten.

1. Mit Hilfe der Einführung der Alternierung δ sind wir in der Lage den Bereich der Minima von den untersten drei gemessenen Moden beschreiben zu können. Verglichen mit den Analysen ohne Alternierung δ können wir nun auch den Verlauf von Mode 3 mit der z -Mode beschreiben.

2. Die Alternierung δ hat ebenfalls den Effekt, dass wir die relativen Werte der \mathbf{D} -Vektoren senken konnten. In Kapitel 7 lag der maximale Wert der \mathbf{D} -Vektoren bei $\tilde{D}_1^y = 0.61$. Durch Einführen einer Alternierung von $\delta = 0.13$ gelang es uns den maximalen Wert der \mathbf{D} -Komponenten auf $\tilde{D}_1^x = 0.36$ zu senken. Wir konnten also den maximalen \mathbf{D} -Wert mit einer Alternierung δ von 13 % um über 40 % senken. Diese Tatsache ist ein enormer Fortschritt und stellt gegenüber der gewählten Parameter von PLUMB *et al.*, die einen maximalen \mathbf{D} -Wert von $\tilde{D}_1^x=0.6$ vorschlagen, eine deutliche Verbesserung dar.
3. Die Alternierung δ hat als weiteren positiven Effekt, dass wir in der Lage sind die Aufspaltung der gemessenen Moden 1 und 2 an dem Punkt $k = \frac{\pi}{2}$ reproduzieren zu können. Ohne Alternierung konnten wir analytisch zeigen, dass die x - und y -Mode an diesem Punkt unabhängig von den gewählten Parametern entartet sind, siehe Kapitel 7. Auch in diesem Punkt konnten wir eine Verbesserung gegenüber den Ergebnissen von PLUMB *et al.* erreichen.
4. Ein noch bestehendes Problem stellt das Verhältnis zwischen den hohen Energien, ca. 27 meV, und den niedrigen Energien, ca. 5 meV, der Mode 3 dar. Die Alternierung δ sorgte in diesem Punkt für eine Verschlechterung. Ohne Alternierung lag der höchste Energiewert der z -Mode bei ca. 19 meV. Bei endlichem δ sank dieser Wert auf ca. 15 meV. In diesem Punkt konnten wir keine Verbesserung verglichen mit den Ergebnissen von PLUMB *et al.* erreichen.
5. Ein weiteres Problem stellt weiterhin der Verlauf der Moden 1 und 2 im Bereich $k = 0.75\pi$ dar. Dort zeigen die experimentellen Datenpunkte ein abknickendes Verhalten auf. Es ist uns nicht möglich mit unseren Annahmen und unserer Methode diesen Verlauf zu reproduzieren, wie auch PLUMB *et al.*.

9 Zusammenfassung

9.1 Ergebnisse

In dieser Arbeit wurde der Einfluss der Spinanisotropien auf das frustrierte Spinleitersystem BiCu_2PO_6 (kurz: BCPO) untersucht.

Zuerst wurde die Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen (engl: continuous unitary transformations, kurz: CUT) eingeführt. Der Fokus lag auf der epCUT und deepCUT. Die Ergebnisse der deepCUT für eine einzelne frustrierte Spinleiter dienten als Grundlage dieser Arbeit.

Als nächstes wurde die Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung (kurz: DM-Wechselwirkung) diskutiert. Sie besitzt einen antisymmetrischen und einen symmetrischen Anteil. Es wurde erläutert, dass keiner der beiden Anteile gegenüber dem anderen vernachlässigt werden kann.

Anschließend wurden die Auswahlregeln nach MORIYA eingeführt und anhand von Beispielen erläutert. Im Anschluss wurden diese Regeln auf die Struktur des Spinleitersystems BCPO angewandt. Dabei wurde festgestellt, dass fünf der insgesamt neun möglichen Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren nicht verschwinden. Es wurde die Parität und das Vorzeichenverhalten entlang der Spinleiter für jede der fünf Komponenten festgestellt.

Als Nächstes wurde der Einfluss der Kopplung zwischen einzelnen Spinleitern analysiert. Es war möglich die Dispersion von gekoppelten frustrierten Spinleitern im Rahmen einer Mean-Field-Näherung mit Hilfe einer Bogoliubov-Transformation zu bestimmen.

Der nächste Schritt lag darin, den Einfluss der antisymmetrischen DM-Wechselwirkung auf die Dispersion der gekoppelten frustrierten Spinleitern zu berechnen. Hierbei fokussierten wir uns auf bilineare Terme, da diese möglicherweise bereits in linearer Ordnung in \mathbf{D} einen Beitrag zur Dispersion liefern. Bei der Berechnung fiel auf, dass nur eine der fünf Komponenten einen Beitrag zur Dispersion in linearer Ordnung in \mathbf{D} liefert. Es können nur Komponenten mit einer geraden Parität einen Beitrag zur Dispersion liefern. Diese Komponente sorgt dafür, dass die x -Mode mit Impuls k an die y -Mode mit Impuls $k + \pi$ koppelt und umgekehrt.

Als Nächstes wurde die Methode, mit der wir die Dispersion berechnen, vorgestellt. Es stellt sich heraus, dass die DM-Wechselwirkung dafür sorgt, dass die x - und y -Mode aneinander koppeln und die z -Mode isoliert bleibt. Abschließend wurden die Effekte der einzelnen \mathbf{D} -Vektoren bezüglich der Dispersion untersucht.

Im nächsten Schritt haben wir unsere berechneten Dispersionen mit den experimentell gemessenen Daten verglichen. Wir halten die folgenden Ergebnisse unserer Analysen fest.

1. Mit unserer Näherungsmethode sind wir in der Lage nur zwei von vier gemessenen Moden im Bereich der Minima mit der x - und y -Mode beschreiben zu können.
2. Wir konnten feststellen, dass hauptsächlich die Komponenten D_1^x und D_1^y für die Überstimmung zwischen den berechneten Dispersionen und den Messdaten verantwortlich sind. Um die experimentellen Daten bestmöglich beschreiben zu können, wählten wir maximale Werte für die \mathbf{D} -Komponenten von ca. $0.6J_1$. Die Werte der anderen \mathbf{D} -Komponenten wurden entweder nur sehr klein, d.h. ca. $0.02J_2$, gewählt oder auf Null gesetzt.
3. Bei unseren Analysen stellte sich heraus, dass die z -Mode zu keinem gemessenen Datensatz passt. Ihre Form ähnelte noch sehr der der ungestörten Dispersion und nicht den gemessenen Moden, die alle eine W-Form suggerieren.
4. Die Messdaten, die im Bereich des Minimums von der x - und y -Mode erfasst werden, zeigen im Bereich $k = 0.75\pi$ einen abknickenden Verlauf. Es gelang uns nicht dieses Verhalten zu reproduzieren.
5. Die experimentellen Daten zeigen maximale Energien von ca. 27 meV und minimale Energien von ca. 5 meV auf. Diese Energiedifferenz konnte mit Hilfe unserer Berechnungen nicht beschrieben werden. Es gelang uns maximale Energiewerte von ca. 19 meV zu erreichen.

Im darauffolgenden Schritt haben wir eine Alternierung in der J_2 -Kopplung eingeführt. Ein Unterschied in den Übernächst-Nachbar-Kopplungen wurde bereits von TSIRLIN [24] vorgeschlagen. Diese Form der Alternierung besitzt bezüglich der Spiegelsymmetrie der Spinleiter ungerade Parität und liefert im Rahmen unserer Näherungsmethode keinen Beitrag zur Dispersion. Losgelöst von diesem Vorschlag führten wir eine Alternierung δ in der Übernächst-Nachbar-Kopplung ein, die gerade Parität besitzt. Unsere Motivation für diesen Schritt war, dass die Alternierung δ dafür sorgt, dass die z -Mode eine W-Form annimmt und wir kleinere Parameterwerte für die relativen Komponenten \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y

wählen können. Die Einführung der Alternierung δ sorgte dafür, dass jede Mode α mit Impuls k an sich selbst mit Impuls $k + \pi$ koppelt. Außerdem hatte die Alternierung δ als Folge, dass die Symmetrie des Spinleitersystems erniedrigt wird, sodass die Symmetrieüberlegungen von Neuem durchgeführt werden mussten. Dabei stellte sich heraus, dass die Komponenten D_1^z nicht mehr verschwinden muss. Unsere Erwartung bezüglich der Größeordnung der neuen Komponente D_1^z war, dass diese bei einer Alternierung δ von ca. 10-15 % einen Wert von 10-15 % der anderen \mathbf{D}_1 -Komponenten annimmt. Im nächsten Schritt haben wir die neu berechneten Dispersionen wiederum mit den experimentellen Daten verglichen. Die Ergebnisse dieser Analysen halten wir in den nachfolgenden Punkten fest.

1. Mit Hilfe der eingeführten Alternierung konnten wir drei der vier gemessenen Moden im Bereich des Minimums beschreiben. Dieses Ergebnis ist eine Verbesserung verglichen mit den vorherigen Analysen.
2. Es stellte sich heraus, dass mit einem endlichen Wert für δ die Komponenten D_1^x und D_1^y nicht mehr hauptverantwortlich für die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment sind. Wir konnten zeigen, dass bereits maximale Werte von $0.36J_1$ für die \mathbf{D} -Komponenten bereits dafür sorgen, dass wir die gemessenen Daten im Bereich des Minimums reproduzieren können. Verglichen mit den vorherigen Analysen konnten wir eine Absenkung von über 40 % der maximalen \mathbf{D} -Vektoren erreichen, ohne dass sich die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment verschlechtert hat. Dies ist eine bemerkenswerte Verbesserung. Die Alternierung lag mit $\delta = 0.13\%$ bei den bestpassenden Parametern in dem erwarteten Bereich. Der Wert der relativen Komponente \tilde{D}_1^z betrug in diesem Fall ca. 5 % von den relativen Parametern \tilde{D}_1^x und \tilde{D}_1^y und damit unterhalb des erwarteten Wertebereichs.
3. Der bereits erwähnte abknickende Verlauf zweier gemessener Moden im Bereich $k = 0.75\pi$ konnte auch mit dieser Erweiterung unseres Modells nicht erklärt werden.
4. Durch die Einführung der Alternierung δ konnten wir ebenfalls keine Verbesserung bezüglich der Übereinstimmung zwischen den hohen und niedrigen Energien erreichen. Es stellte sich sogar heraus, dass die Alternierung eine Verschlechterung bezüglich dieses Aspekts darstellt. Die maximalen Energiewerten bei einem endlichen δ lagen bei ca. 15 meV.

Als Gesamtfazit dieser Arbeit können wir festhalten, dass wir mit Hilfe einer Alternierung in der Übernächst-Nachbar-Kopplung in der Lage sind die experimentellen Daten im

Bereich der Minima mit Hilfe von maximalen relativen Werten von $\tilde{D}_1^x \approx 0.36$ theoretisch beschreiben zu können.

9.2 Ausblick

Die Struktur von BCPO bedarf weiterer theoretischer und experimenteller Untersuchungen in der Zukunft. Bis zum jetzigen Zeitpunkt existiert keine Theorie, die die Dispersion von BCPO vollständig erfassen kann. Es ist von großem Interesse die Entstehung der vierten Mode zu verstehen, sowie das Verhältnis zwischen den hohen und niedrigen Energien in der Dispersion. Außerdem konnte der Abfall der beiden niedrigeren Moden im Bereich $k = 0.75\pi$ nicht erklärt werden. Unsere Vermutung ist, dass in diesem Bereich das Zweiteilchenkontinuum auf die Dispersion trifft und damit der Zerfall von Triplonen möglich ist. FISCHER konnte zeigen, dass Terme mit ungerader Parität in der Spinleiter dafür sorgen, dass Triplonen zerfallen [23]. In seiner Arbeit wurde die Spiegelsymmetrie der Spinleiter durch Einführung einer diagonalen Kopplung zwischen den Holmen gebrochen. In unserem Fall existieren bereits Terme mit ungerader Parität, die dann einen Beitrag in linearer Ordnung zur Dispersion liefern können.

Ein nächster Schritt in unseren Untersuchungen ist, teilchenzahlverletzende Terme in unseren Berechnungen zu berücksichtigen, sodass die Terme ungerader Parität einen Einfluss auf die Dispersion haben.

Teil III

Anhang

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung eines Dimers. Die grauen Punkte stehen für den linken (\mathbf{S}^L) und den rechten (\mathbf{S}^R) Spin mit jeweils $S=1/2$. Die schwarze Linie stellt die Kopplung J zwischen den Spins dar.	13
3.1	Schematische Darstellung der Spinleiter. Die grauen Kreise stellen Spins mit $S=1/2$ dar. Die roten Linien stehen für die Holmkopplung J_{\parallel} und die schwarzen Linien für die Sprosskopplung J_{\perp} . Die türkisfarbene Gerade stellt die Symmetrieachse der Spinleiter dar.	18
3.2	Schematische Darstellung der frustrierten Spinleiter. Die grauen Kreise stellen Spins mit $S=1/2$ dar. Die roten Linien stehen für die Holmkopplung J_{\parallel} , die schwarzen Linien für die Sprosskopplung J_{\perp} und die blauen Linien für die Übernächst-Nachbar-Kopplung J_2	20
3.3	Schematische Darstellung zweier gekoppelter Spinleitern. Die grauen Kreise stellen Spins mit $S=1/2$ dar. Die roten Linien stehen für die Holmkopplung J_{\parallel} , die schwarzen Linien für die Sprosskopplung J_{\perp} und die grünen Linien für die Zwischen-Leiter-Kopplung J'	22
3.4	Kristallstruktur von BCPO. Die orthorhombische Einheitszelle mit der Länge a besteht aus frustrierten Spinleitern mit einer Höhe von $a' = 0.162a$. Um die bereits eingeführten Kopplungsbezeichnungen beizubehalten, werden die hier eingezeichneten Kopplungen wie folgt identifiziert: $J_1 = J_{\parallel}$, $J_2 = J_2$, $J_3 = J'$ und $J_4 = J_{\perp}$. Die Abbildung wurde entnommen aus [6].	23
3.5	Skizze der Kopplungen zwischen den Spins der Kupferkationen Cu_A (A) und Cu_B (B) nach TSIRLIN [24]. Die grauen Kreise stellen Spins mit $S=1/2$ dar. Die roten Linien stehen für die Nächst-Nachbar-Kopplung J_{\parallel} zwischen den verschiedenen Kupferkationen Cu_A und Cu_B . Die schwarzen Linien stehen für die Sprosskopplung J_{\perp} , die dunkelblauen Linien für die Übernächst-Nachbar-Kopplung J_2 zwischen den Kupferkationen Cu_A und die hellblauen Linien für die Übernächst-Nachbar-Kopplung J'_2 zwischen den Kupferkationen Cu_B	24

4.1	Darstellung des Algorithmus, um alle Beiträge D_{ijk} für eine gegebene Zielordnung, hier $n = 4$, zu berechnen. Die Kästchen stehen für die Berechnung der Kommutatoren von dem Generator $\eta^{(m)}$ mit dem Hamiltonoperator $\mathcal{H}^{(n)}$, um die Beiträge D_{ijk} zu bestimmen. Die Berechnung für jede Ordnung p basiert auf niedrigere Ordnungen und benötigt die Berechnung jedes Kommutators mit $p = m + n$. Die Abbildung wurde entnommen aus [21].	33
5.1	Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit Inversionssymmetrie bezüglich des Mittelpunktes der Strecke \overline{AB}	41
5.2	Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit einer Spiegelebene senkrecht zur Strecke \overline{AB} , die durch den Mittelpunkt der Strecke verläuft.	42
5.3	Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit einer Spiegelebene auf der Strecke \overline{AB}	43
5.4	Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit einer zweifachen Rotationsachse senkrecht zur Strecke \overline{AB}	44
5.5	Schematische Darstellung einer Anordnung von Spins, dargestellt durch Kugeln, mit einer vierfachen Rotationsachse auf der Strecke \overline{AB}	45
5.6	Schematische Darstellung der Spinleiterstruktur von BCPO. Die Sprossenkopplungen sind in blau eingezeichnet, die Nächst-Nachbar-Kopplungen rot und die Übernächst-Nachbar-Kopplungen sind grün gekennzeichnet. An den verschiedenen Bonds stehen bereits die Bezeichnungen der zugehörigen Dzyaloshinskii-Moriya Vektoren. Eine Einheitszelle besteht aus einer unteren und einer oberen Sprosse.	46
5.7	Draufsicht der Spinleiterstruktur von BCPO aus Abbildung 5.6. Die Sprossen sind aus dieser Sichtweise alternierend obere und untere. Die markierten Spins mit dem Index O stehen für Spins auf einer oberen Sprosse, Spins mit einem U als Index stehen für Spins auf einer unteren Sprosse.	48
6.1	Darstellung der oberen (gepunktet) und der unteren Mode (durchgezogen) in Abhängigkeit der D_2^z -Komponente. Als Parameter für die isolierte frustrierte Spinleiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die Zwischenleiter-Kopplung J' ist auf Null gesetzt.	64
6.2	Darstellung der Dispersion $\omega(k)$ in Abhängigkeit der Zwischenleiter-Kopplung J' . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt.	65

6.3	Darstellung der x -Mode in Abhängigkeit der Komponente D_0^y . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.	71
6.4	Darstellung der y -Mode in Abhängigkeit der Komponente D_0^y . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.	72
6.5	Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Moden in Abhängigkeit der Komponente Γ_1^{xy} bei identischen Werten von D_1^x und D_1^y . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.	73
6.6	Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Moden in Abhängigkeit der Komponente D_1^x bei festem Wert $D_1^y = 0.2J_0$. Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.	74
6.7	Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Moden in Abhängigkeit der Komponente D_1^y bei festem Wert $D_1^x = 0.2J_0$. Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.	75
6.8	Darstellung der x -Mode in Abhängigkeit der Komponente D_2^x . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.	77
6.9	Darstellung der y -Mode in Abhängigkeit der Komponente D_2^x . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt.	78
6.10	Darstellung der x - und y -Mode in Abhängigkeit der Komponenten D_2^z . Als Parameter für die isolierte frustrierte Leiter werden $x = 1.2$ und $y = 0.9$ gewählt. Die restlichen Parameter werden auf Null gesetzt. Der lineare Beitrag von D_2^z wird ebenfalls vernachlässigt.	79
7.1	Verlauf der berechneten Dispersion von PLUMB <i>et al.</i> . Die gefüllten Kreise stammen aus Messungen für $h = 0$, die offenen Dreiecke aus Messungen für $h = 3$. Die Abbildung wurde entnommen [6]. Die lila Messpunkte werden mit Mode 1 bezeichnet, die grünen mit Mode 2 und die blauen mit Mode 3.	83
7.2	Darstellung der x -, y , und z -Mode mit den verwendeten Daten von PLUMB <i>et al.</i> aus Gleichungen 7.0.1	85
7.3	Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.2 um den Bereich des Minimums.	85

7.4	Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.	87
7.5	Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.4 um den Bereich des Minimums.	87
7.6	Darstellung der Dispersion senkrecht zur Leiter in l -Richtung mit den angepassten Parametern aus Abbildungen 7.4 und 7.5	88
7.7	Vergrößerter Ausschnitt aus der Dispersion für positives \tilde{D}_2^z zum Vergleich mit Abbildung 7.5.	90
7.8	Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.	92
7.9	Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.8.	92
7.10	Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.	94
7.11	Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.10 um den Bereich des Minimums.	94
7.12	Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.	96
7.13	Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 7.12 um den Bereich des Minimums.	96
8.1	Schematische Darstellung der Spinleiterstruktur von BCPO bei alternierender Übernächst-Nachbar-Kopplung. Die Sprosskopplungen sind in blau eingezeichnet, die Nächst-Nachbar-Kopplungen rot und die alternierenden Übernächst-Nachbar-Kopplungen sind grün und gelb gekennzeichnet. An den verschiedenen Bonds stehen bereits die Bezeichnungen der zugehörigen Dzyaloshinskii-Moriya Vektoren.	102
8.2	Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Mode der Dispersion $\omega_\alpha(k)$ in Abhängigkeit der Alternierung δ . Als Parameter für die isolierte frustrierte Spinleiter werden $x=1.2$ und $y=0.9$ gewählt.	104
8.3	Darstellung der oberen (gepunktet) und unteren (durchgezogen) Mode $\omega_{1,2}(k)$ in Abhängigkeit der Komponente D_1^z . Als Parameter für die isolierte frustrierte Spinleiter werden $x=1.2$ und $y=0.9$ gewählt.	109

8.4	Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.	113
8.5	Vergrößerter Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 8.4. . .	114
8.6	Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.	116
8.7	Vergrößerte Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 8.6. . .	117
8.8	Angepasste Dispersion der x -, y - und z -Mode. Die Werte für x , y und J' wurden festgesetzt. Die Komponenten der \mathbf{D} -Vektoren und die Energieskala J_0 wurden angepasst.	118
8.9	Vergrößerte Ausschnitt der angepassten Dispersion aus Abbildung 8.8. . .	119

Tabellenverzeichnis

5.1	Knapp Zusammenfassung der Auswahlregeln nach MORIYA.	46
5.2	Verhalten der D -Vektoren entlang der Holme der Leiter und bezüglich einer Spiegelung in der Mitte einer Sprosse. Nicht aufgeführte Komponenten besitzen aufgrund von Symmetrieargumenten den Wert Null.	49
6.1	Verhalten der Tensorkomponenten $\Gamma_{ij}^{\alpha\beta}$ entlang der Holme der Leiter und bezüglich einer Spiegelung in der Mitte einer Sprosse. Nicht aufgeführte Komponenten verschwinden oder sind bereits durch den äquivalenten Ausdruck $\Gamma_{ij}^{\beta\alpha}$ vertreten.	66
8.1	Verhalten der D -Vektoren entlang der Holme der Leiter und bezüglich einer Spiegelung in der Mitte einer Sprosse bei alternierender J_2 -Kopplung. Nicht aufgeführte Komponenten verschwinden. Der Strich (-) bedeutet, dass keine Aussage über das Verhalten der Vektorkomponente mit Hilfe der bestehenden Symmetrien gemacht werden kann.	105

Literaturverzeichnis

- [1] F. Anders. Skript zur Vorlesung Einführung in die Festkörpertheorie. *Technische Universität Dortmund*, Wintersemester 2013/2014.
- [2] G. Czycholl. *Theoretische Festkörperphysik, 2. Auflage*. Springer-Verlag, 2004.
- [3] I. Dzyaloshinsky. A Thermodynamic Theory of "weak" Ferromagnetism of Antiferromagnetics. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **4**:241, 1958.
- [4] T. Moriya. New Mechanism of Anisotropic Superexchange Interaction. *Phys. Rev. Lett.*, **4**:228, 1960.
- [5] F. Schwabl. *Quantenmechanik, 7. Auflage*. Springer-Verlag, 2007.
- [6] K. W. Plumb, K. Hwang, Y. Qiu, L. W. Harriger, G. E. Granroth, G. J. Shu, F. C. Chou, C. Ruediger, Y. B. Kim, and Y.-J. Kim. Giant Anisotropic Interactions in the Copper Based Quantum Magnet BiCu_2PO_6 . *ArXiv e-prints*, **1408.2528v1**, 2014.
- [7] S. Sachdev and R. N. Bhatt. Bond-operator representation of quantum spins: Mean-field theory of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **41**:9323, 1990.
- [8] N.A. Drescher. Optimierte Basiswahl und Trunkierungsfehler bei kontinuierlichen unitären Transformationen am Beispiel der dimerisierten Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette. Master's thesis, Technische Universität Dortmund, 2009.
- [9] K. P. Schmidt and G. S. Uhrig. Spectral Properties of Magnetic Excitations in Cuprate Two-Leg Ladder Systems. *Mod. Phys. Lett.*, 2005.
- [10] S. Notbohm, P. Ribeiro, B. Lake, D. A. Tennant, K. P. Schmidt, G. S. Uhrig, C. Hess, R. Klingeler, G. Behr, B. Büchner, M. Reehuis, R. I. Bewley, C. D. Frost,

- P. Manuel, and R. S. Eccleston. One- and Two-Triplon Spectra of a Cuprate Ladder. *Phys. Rev. Lett.*, **98**:27403, 2007.
- [11] B. Normand and Ch. Rüegg. Complete bond-operator theory of the two-chain spin ladder. *Phys. Rev. B*, **83**:54415, 2011.
- [12] E. Dagotto and T. M. Rice. Surprises on the Way from One- to Two-Dimensional Quantum Magnets: The Ladder Materials. *Science*, **271**:618, 1996.
- [13] T. S. Nunner, P. Brune, T. Kopp, M. Windt, and M. Grüninger. Cyclic spin exchange in cuprate spin ladders. *Phys. Rev. B*, **66**:180404, 2002.
- [14] S. Brehmer, H.-J. Mikeska, M. Müller, N. Nagaosa, and S. Uchida. Effects of biquadratic exchange on the spectrum of elementary excitations in spin ladders. *Phys. Rev. B*, **60**:329, 1999.
- [15] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera, and E. S. Swanson. Excitation spectrum of Heisenberg spin ladders. *Phys. Rev. B*, **47**:3196, 1993.
- [16] M. Greven, R. J. Birgeneau, and U. J. Wiese. Monte Carlo Study of Correlations in Quantum Spin Ladders. *Phys. Rev. Lett.*, **77**:1865, 1996.
- [17] J. Oitmaa, R. R. P. Singh, and W. Zheng. Quantum spin ladders at $T = 0$ and at high temperatures studied by series expansions. *Phys. Rev. B*, **54**:1009, 1996.
- [18] Z. Weihong, V. Kotov, and J. Oitmaa. Two-chain spin ladder with frustrating second-neighbor interactions. *Phys. Rev. B*, **57**:11439, 1998.
- [19] C. Knetter, K. P. Schmidt, and G. S. Uhrig. High order perturbation theory for spectral densities of multi-particle excitations: $\mathbf{S} = \frac{1}{2}$ two-leg Heisenberg ladder. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, **36**:525, 2003.
- [20] S. Duffe. *Effective Hamiltonians for undoped and hole-doped antiferromagnetic Spin- $\frac{1}{2}$ ladder by self-similar continuous unitary transformations in real space*. PhD thesis, Technische Universität Dortmund, 2010.
- [21] H. Krull, N. Drescher, and G. Uhrig. Enhanced perturbative continuous unitary transformations. *Phys. Rev. B*, **86**:125113, 2012.

- [22] H. Krull. Verbesserte perturbative kontinuierliche unitäre Transformation mit direkter Auswertung: Erläutert anhand der Spin $S=1/2$ antiferromagnetischen Heisenberg-Leiter. Master's thesis, Technische Universität Dortmund, 2011.
- [23] T. Fischer. *Description of quasiparticle decay by continuous unitary transformations*. PhD thesis, Technische Universität Dortmund, 2011.
- [24] A. Tsirlin, I. Rousochatzakis, D. Kasinathan, O. Janson, R. Nath, F. Weickert, C. Geibel, A. Läuchli, and H. Rosner. Bridging frustrated-spin-chain and spin-ladder physics: Quasi-one-dimensional magnetism of BiCu_2PO_6 . *Phys. Rev. B*, **82**:144426, 2010.
- [25] F. Wegner. Flow-equations for Hamiltonians. *Annalen der Physik*, **506**:77, 1994.
- [26] S. D. Głazek and K. G. Wilson. Renormalization of Hamiltonians. *Phys. Rev. D*, **48**:5863, 1993.
- [27] S. D. Glazek and K. G. Wilson. Perturbative renormalization group for Hamiltonians. *Phys. Rev. D*, **49**:4214, 1994.
- [28] S. Dusuel and G.S. Uhrig. The quartic oscillator: a non-perturbative study by continuous unitary transformations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **37**:9275, 2004.
- [29] A. Mielke. Flow equations for band-matrices. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, **5**:605, 1998.
- [30] C. Knetter and G.S. Uhrig. Perturbation theory by flow equations: dimerized and frustrated $S=1/2$ chain. *European Physical Journal B*, **13**:209, 2000.
- [31] 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**:33048, 2010.
- [32] N. A. Drescher. *Variational and Perturbative Extensions of Continuous Unitary Transformations for Low-Dimensional Spin Systems*. PhD thesis, Technische Universität Dortmund, 2014.
- [33] T. Moriya. Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism. *Phys. Rev.*, **120**:91, 1960.

- [34] Y.-Y. Li. Domain Walls in Antiferromagnets and the Weak Ferromagnetism of α -Fe₂O₃. *Phys. Rev.*, **101**:1450, 1956.
- [35] L. Shekhtman, O. Entin-Wohlman, and A. Aharony. Moriya's anisotropic superexchange interaction, frustration, and Dzyaloshinsky's weak ferromagnetism. *Phys. Rev. Lett.*, **69**:836, 1992.
- [36] D. Mütter. Der Einfluss der Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung auf thermodynamische Observable. Master's thesis, Universität Osnabrück, 2006.
- [37] G. Uhrig, K. Schmidt, and M. Grüninger. Unifying Magnons and Triplons in Stripe-Ordered Cuprate Superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, **93**:267003, 2004.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich sehr herzlich bei Prof. Dr. Götz S. Uhrig für die Vergabe dieses interessanten und aktuellen Themas, sowie für die intensive Betreuung während dieser Arbeit bedanken. Dr. Kai P. Schmidt danke ich für seine Funktion als Zweitgutachter.

Insbesondere möchte ich mich bei Nils Drescher bedanken, der mir sehr viel über Triplo-
nen und die CUT beigebracht hat. Außerdem hat er mich in die deepCUT eingearbeitet,
sodass ich selbstständig in der Lage war diese zu bedienen. Ich danke ihm ebenfalls für
die vielen Ratschläge bezüglich der Organisation weiterer Projekte nach der Masterar-
beit. Außerdem danke ich ihm für die vielen Ratschläge bezüglich der Arbeit und seinem
Beistand, während diese Arbeit in ihren letzten Zügen war.

Bei meinen Bürokollegen bedanke ich mich über die vielen Hilfe bezüglich Datensiche-
rung und -management. Meinem Bürokollegen Peter Lorenz danke ich insbesondere über
die umfangreiche Hilfe bezüglich Python und git.

Bei meinem Freund Heiko Müller bedanke ich mich für die große mentale Unterstützung
während dieser Arbeit. Viele aufbauenden Worte haben mich während des Erstellens
dieser Arbeit immer wieder von Neuem motiviert und mir die nötige Kraft geschenkt.

Des Weiteren möchte ich mich bei der gesamten Arbeitsgruppe vom Lehrstuhl T1a be-
danken, die immer in fachlichen sowie persönlichen Fragen stets hilfsbereit ist.

Meinen engen Freunden Christina Stange, Philipp Stange, Thilo Falkenberg und Chris-
tian Wischnewski möchte ich ausdrücklich für die vielen privaten Gespräche während
dieser Arbeit danken. Aus jedem dieser Gespräche konnte ich genügend Energie sam-
meln, um einige späte Stunden in diese Arbeit zu investieren.

Ich danke Eckhard Müller für das Lesen meiner Einleitung.

Zum Schluss möchte ich mich bei meiner Familie bedanken, die in den letzten Wochen
dieser Arbeit leider auf mich verzichten musste und mich in meinen Plänen während des
gesamten Studiums unterstützt hat.

Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Masterarbeit mit dem Titel "Qualitative Analyse der Spin-Anisotropien im frustrierten Spinleitersystem BiCu_2PO_6 " selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Ort, Datum

Unterschrift

Belehrung

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00€ geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG -).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird ggf. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software "turnitin") zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen.

Ort, Datum

Unterschrift