

## Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades Master of Science

# Dynamik einer gepulsten, dimerisierten Spinkette

Maximilian Krebs geboren in Herdecke

2022

Lehrstuhl für Theoretische Physik Ia Fakultät Physik Technische Universität Dortmund

Erstgutachter: Prof. Dr. G. Uhrig Zweitgutachter: Dr. B. Normand Abgabedatum: 9. Juni 2022

## Kurzfassung

Diese Arbeit befasst sich mit der Analyse magnetischer Eigenschaften von Festkörpern durch kontrollierte Manipulation des Gitters über das Treiben mit THz-Lasern. Dabei werden in dieser Arbeit solche Festkörper betrachtet, welche sich als dimerisierte Spin-1/2 Kette beschreiben lassen. Auf dieser Basis wurde die Forschung aus der Masterarbeit [1] und dem Paper [2] fortgesetzt. Während diese Arbeiten sich mit dem Treiben des Systems über ein stationäres Laserfeld befasst haben, wurde hier zudem auch ein Treiben mit gaußförmigen Laserpulsen in Betracht gezogen. Dies lenkt den Fokus auf eine langsame Oszillation in der Antwort des Spinsystems auf das Treiben, wobei in dieser Arbeit davon ausgegangen wird, dass es sich dabei um eine Schwebung zwischen Moden des Spinsystems und Moden der Gitterschwingungen handelt. Es wird ein Vergleich zu einem ähnlichen Vorgang im stationär getriebenen System gezogen. Zur weiteren Analyse der Moden wird zudem mit der Phonon-Bitriplonnäherung ein vielversprechender neuer anlytischer Ansatz gemacht. Dieser wird vor allem zur Analyse des Phonon-Bitriplons verwendet. Bei diesem handelt es sich um ein neues Quasiteilchen, welches in dem Paper [3] erstmals beschrieben wurde. Der neue Ansatz fördert interessante neue Eigenschaften der Moden des Phonon-Bitriplons zu Tage.

#### **Abstract**

This work is concerned with the analysis of magnetic properties of solids due to controlled manipulation of the lattice via driving with THz lasers. The solids considered in this work can be described as a dimerized spin-1/2 chain. On this basis, research from the master's thesis [1] and the paper [2] was continued. While these works dealt with the driving of the system via a stationary laser field in addition, driving with Gaussian shaped laser pulses was also considered here. This directs the focus to a slow oscillation in the response of the spin system to the driving, which in this work is assumed to be a beating between modes of the spin system and modes of the lattice oscillations. A comparison is drawn with a similar process in the stationary driven system. For further analysis of the modes, a promising new anlytic approach is made with the phonon bitriplon approximation. This is mainly used to analyze the phonon bitriplon, which is a new quasiparticle that was first described in the paper [3]. The new approach promotes interesting new properties of the modes of the phonon-bitriplon.

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Motivation	1	
2	Grundlagen  2.1 Quantenmechanische Operatoren und Erwartungswerte  2.2 Fourier- und Bogoliubovtransformation  2.3 Die mathematische Beschreibung eines Dimers  2.4 Der Begriff der Magnetophononik  2.5 Die Lindblad Master Gleichungen  2.6 Die Molekularfeldnäherung  2.7 Die Greensunktion  2.8 Verwendete numerische Werkzeuge	2 4 5 7 8 10 11 12	
3	Das Modell           3.1 Einordnung der Systemparameter            3.2 Das J-Modell            3.3 Das J'-Modell	13 14 16 21	
4		23 23 25 28 32 36	
5	Der Phonon-Bitriplonansatz5.1 Einführung der Bitriplon Operatoren5.2 Analyse des Spektrums5.3 Berechnung der Selbstenergie der Phonon-Bitriplonmode	48 48 52 56	
6	Zusammenfassung und Ausblick	64	
A	Vollständige Rechnung zur Diagonalisierung des Spinanteils         A.1 Die Spinoperatoren als Triplonoperatoren          A.2 Diagonalisierung durch die Bogoliubovtransformation          A.3 Die Spin-Phonon Kopplung		
В	Vollständige Rechnung zur Bestimmung der Bewegungsgleichungen des J-ModellsB.1Berechnung der Phonon-Bewegungsgleichungen	<b>71</b> 71 74	
C	Rechnung zur Bestimmung der Bewegungsgleichungen des $J^\prime$ -Modells	77	
D	Analyse iterierter Pulse 7		

	Inhaltsverzeichnis
Literatur	82
Danksagung	87

# 1 Einleitung und Motivation

Das Feld der Festkörperphysik bietet diverse Materialien mit interessanten Eigenschaften, welche in unserer heutigen Welt von großer Bedeutung sind. Eines der wichtigsten Beispiele ist die Physik von Halbleitern, welche unter anderem für Prozessoren in Computern oder Handys notwendig sind. Aber auch das Feld des Magnetismus und der Supraleitung sind namhafte Beispiele für die Relevanz der Festkörperphysik. Viele dieser Felder wurden in Systemen erforscht, welche sich in einem Gleichgewichtszustand befinden. Zum einen, da diese meist mathematisch einfacher zu behandeln sind, zum Anderen aber auch weil entsprechende experimentelle Aufbauten für Nicht-Gleichgewichtssysteme lange Zeit schwierig zu realisieren waren. Festkörper können jedoch auch verschiedene, intrinsische Eigenschaften aufweisen, welche sich erst im Nicht-Gleichgewicht und auf sehr schnellen Zeitskalen zeigen.

In den vergangenen Jahren hat das Feld der Nicht-Gleichgewichtsphysik stark an Bedeutung zugenommen [4, 5]. Dies ist vor allem durch große Fortschritte der Lasertechnologie [6], durch welche nun entsprechende Experimente [4, 7, 8, 9] möglich sind, begründet. Diese Forschung hat bereits zu einigen interessanten Ergebnissen, wie beispielsweise der Floquet Bandkonstruktion [10] oder durch Licht induzierte Supraleitung [11], geführt. Letztere basiert darauf, dass die supraleitende Phase von Kupferoxid Supraleitern [12] durch kontrollierte Manipulation des Gitters über ein THz Laserfeld auch oberhalb der kritischen Temperatur  $T_{\rm C}$ , an welcher der Phasenübergang üblicherweise stattfindet, erreicht werden kann. Diese Arbeit befasst sich mit der kontrollierten Manipulation eines dimerisierten Spinsystems, ebenfalls durch einen THz Laser, und reiht sich somit in die Entdeckung und Erforschung solcher Nicht-Gleichgewichtsphänomene ein. Es wird eine dimerisierte, dissipative Spinkette, wie sie beispielsweise nach einen Spin-Peierls Phasenübergang [13, 14] in CuGeO $_3$  zu finden ist, betrachtet. Diese wird durch einen THz-Laser, welcher an infrarot-aktive Phononen koppelt, aus ihrem Gleichgewicht ausgelenkt. Aufgrund der Dimerisierung handelt es sich hier um ein System mit Bandlücke [15, 16]. Ein ähnliches System ohne Bandlücke wird beispielsweise in Ref. [17] behandelt.

In Kapitel 2 werden die physikalischen und mathematischen Grundlagen dieser Arbeit aufgeführt. In Kapitel 3 wird das Modell beschrieben und dessen Bewegungsgleichungen bestimmt. Die Ergebnisse der Auswertung dieser Bewegungsgleichungen sind in Kapitel 4 dargestellt und erörtert. Kapitel 5 befasst sich mit einem alternativen Ansatz zu dem Modell, um das Verhalten der Eigenmoden genauer zu untersuchen. Bei diesem wird das System jedoch in der Nähe seines Gleichgewichtszustands betrachtet. Zum Schluss werden in Kapitel 6 die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick auf mögliche Fortsetzungen dieses Projekts gegeben.

# 2 Grundlagen

Der folgende Abschnitt führt die in dieser Arbeit verwendeten, quantenmechanischen Grundlagen auf. Es handelt sich hierbei um Lehrbuchwissen, wie es beispielsweise in [18, 19] zu finden ist. Im Verlauf dieser Arbeit werden natürliche Einheiten verwendet, es gilt  $\hbar = 1$ .

## 2.1 Quantenmechanische Operatoren und Erwartungswerte

Die in dieser Arbeit verwendete Formulierung der Quantenmechanik ist die Matrizenmechanik nach Heisenberg aus dem Jahr 1925 [20, 21]. Die ursprüngliche Idee hinter dieser Formulierung ist, die Quantenmechanik über die beobachtbaren Spektrallinien zu beschreiben anstatt durch komplexe zeitabhängige Wellenfunktionen. Dementsprechend bietet sie eine natürliche Art der Beschreibung quantenmechanischer Systeme über die Quantisierung der Energie und hat zudem den Vorteil, dass sie, im Gegensatz zur Wellenmechanik nach Schrödinger, von rein algebraischer Natur ist. Hierzu wird eine orthonormale Matrixbasis mit den Eigenzuständen  $|n\rangle$ , der sogenannte Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , gewählt, welche sich auf allen möglichen Zuständen des Systems aufspannt. Die Mechanik des Systems wird nun durch zeitabhängige Operatoren  $\hat{O}_{\mathrm{H}}(t)$  beschrieben, welche die Eigenzustände von  $\mathcal{H}$  ineinander überführen. Das H im Index kennzeichnet dabei, dass es sich um einen Operator im Heisenbergbild handelt.

Der Erwartungswert eines Operators  $\left\langle \hat{O}_{\rm H} \right\rangle_n$  (t) zu einem Referenzzustand  $|n\rangle$  wird beschrieben durch

$$\left\langle \hat{O}_{\mathrm{H}} \right\rangle_{n}(t) = \left\langle n \right| \hat{O}_{\mathrm{H}}(t) \left| n \right\rangle .$$
 (2.1)

Dabei ist  $\langle \hat{O}_{\rm H} \rangle$  (t) der Erwartungswert mit dem Vakuumszustand  $|0\rangle$  als Referenzzustand. Die Erwartungswerte messbarer Größen werden Observablen genannt. Da diese stets reell sein müssen, sind die zugehörigen Operatoren hermitesch.

#### 2.1.1 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Zeitunabhängige Operatoren werden meist durch Erzeugungsoperatoren  $c^{\dagger}$  und Vernichtungsoperatoren c ausgedrückt. Werden solche Operatoren auf einen Zustand angewendet erzeugen oder vernichten sie eine Anregung beziehungsweise ein Teilchen in diesem Zustand. Dabei muss unterteilt werden zwischen bosonischen Anregungen und Teilchen auf der einen sowie fermionischen Anregungen und Teilchen auf der anderen Seite. Die bosonischen Operatoren werden  $b^{\dagger}$  beziehungsweise b genannt und erfüllen die Kommutatorrelationen

$$[b_i, b_j] = [b_i^{\dagger}, b_j^{\dagger}] = 0$$
  $[b_i, b_j^{\dagger}] = \delta_{i,j}$  (2.2)

Die fermionischen Operatoren werden  $f^{\dagger}$  beziehungsweise f genannt und erfüllen die Antikommutatorrelationen

$$\{f_i, f_j\} = \{f_i^{\dagger}, f_j^{\dagger}\} = 0$$
  $\{f_i, f_j^{\dagger}\} = \delta_{i,j}$ . (2.3)

(2.4)

Werden Vernichtungsoperatoren auf einen Zustand angewendet, welcher die zu vernichtende Anregung beziehungsweise das zu vernichtende Teilchen nicht enthält, vernichten sie stattdessen den kompletten Zustand

$$c|0\rangle = 0. (2.5)$$

Des weiteren gilt für fermionische Anregungen und Teilchen das Pauliverbot [18]. Nach diesem können keine zwei Fermionen mit den gleichen Quantenzahlen an einem Ort sein. Dies bedeutet für fermionische Erzeugungsoperatoren

$$f_i^{\dagger}|i\rangle = 0 \tag{2.6}$$

wenn  $|i\rangle$  der Zustand mit einem Teilchen ist.

#### 2.1.2 Die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen

Die Dynamik der Operatoren kann durch die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen beschrieben werden. Daher werden diese im folgenden Abschnitt hergeleitet. Zunächst wird die Schrödingergleichung

$$i\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle$$
 (2.7)

betrachtet, welche die zeitliche Entwicklung quantenmechanischer Zustände über den Hamiltonoperator H(t) beschreibt. Ein Ansatz für diese Gleichung lautet

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t') |\Psi(t')\rangle \tag{2.8}$$

U(t,t') ist dabei der sogenannte Zeitentwicklungsoperator, welcher die Entwicklung eines Zustandes  $|\Psi\rangle$  des durch H beschriebenen Systems von einem Zeitpunkt t bis zum Zeitpunkt t' beschreibt. Er ist für zeitunabhängige Systeme gegeben durch

$$U(t,t') = e^{-iH(t-t')} (2.9)$$

Durch den Zeitenwicklungsoperator lässt sich zudem auch die Zeitabhängigkeit von den Zuständen auf die Operatoren übertragen. Dabei wird unterschieden zwischen den zeitabhängigen Operatoren im Heisenbergbild mit Index H und den zeitunabhängigen Operatoren im Schrödingerbild mit Index S. Somit gilt

$$O_{\rm H}(t) = U^{\dagger}(t,0)O_{\rm S}(t)U(t,0)$$
 (2.10)

Die zeitliche Ableitung eines Operators O im Heisenbergbild kann dabei ausgedrückt werden durch

$$\frac{d}{dt}O_{\rm H}(t) = i[H_{\rm H}, O_{\rm H}(t)] + \frac{\partial}{\partial t}O_{\rm S}(t). \tag{2.11}$$

Im Weiteren wird nun der Erwartungswert der jeweiligen Operatoren

$$\frac{d}{dt} \langle O \rangle (t) = i \langle [H, O(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} O(t) \right\rangle \tag{2.12}$$

gebildet. Für Operatoren, die keine direkte Zeitabhängigkeit haben und dementsprechend im Schrödingerbild zeitunabhängig sind, verschwindet der zweite Term, sodass die Heisenbergsche Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt}\langle O\rangle(t) = i\langle [H, O(t)]\rangle \tag{2.13}$$

übrig bleibt. Aus dieser folgt zudem die Von-Neumann-Gleichung, welche das Verhalten der Dichtematrix  $\rho(t)$  über

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H, \rho(t)] \tag{2.14}$$

beschreibt.

## 2.2 Fourier- und Bogoliubovtransformation

Die Fouriertransformation mit anschließender Bogoliubovtransformation von Operatoren ist in der Festkörperphysik ein häufig angewendetes Verfahren, um den Hamiltonoperator eines Systems zu diagonalisieren. Die Fouriertransformation kann zudem genutzt werden, um das Frequenzspektrum einer zeitabhängigen Funktion zu berechnen.

#### 2.2.1 Die Fouriertransformation

Die Fouriertransformation kann genutzt werden, um das Spektrum einer zeitabhängigen Funktion f(t) zu bestimmen. Sie kann im Allgemeinen in zwei Arten unterteilt werden. Die diskrete Fouriertransformation (oder auch Fourierreihe) lautet

$$f(t) = \frac{1}{N} \sum_{j} a_j e^{i\omega_j t} . {2.15}$$

Bei dieser kann eine periodische Funktion f(t) als Superposition harmonischer Schwingungen der Frequenzen  $\omega_j$  mit den sogenannten Fourierkoeffizienten  $a_j$  als Amplituden ausgedrückt werden. Neben der diskreten Fouriertransformation gibt es zudem die kontinuierliche Fouriertransformation, welche

$$f(t) = \int_{\mathbb{R}} e^{i\omega t} \tilde{f}(\omega) d\omega \tag{2.16}$$

lautet. Diese bestimmt ein kontinuierliches Frequenzspektrum  $\tilde{f}(\omega)$  einer allgemeinen Funktion f(t). Eine solche, allgemeine Frequenzanalyse wird im weiteren Verlauf der Arbeit genutzt, um das Spektrum der verwendeten Laserpulse zu untersuchen.

Die Fouriertransformation kann auch auf Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren angewandt werden, um diese zwischen Orts- und Impulsraum (oder auch k-Raum) hin und her zu transformieren. Die Fourierreihe eines Operators ist für Gittersysteme

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{-ikr_j} \quad c_j^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k^{\dagger} e^{ikr_j}.$$
 (2.17)

Summiert wird dabei jeweils über die erste Brillouin-Zone. Im Zusammenhang mit dieser Fouriertransformation wird häufig die Identität

$$\delta_{k,k'} = \frac{1}{N} \sum_{i} e^{i(k-k')r_j} \tag{2.18}$$

verwendet.

#### 2.2.2 Die Bogoliubovtransformation

Die Bogoliubovtransformation kann genutzt werden, um bilineare Hamiltonoperatoren der Form

$$H = \sum_{k} \alpha_{k} b_{k}^{\dagger} b_{k} + \beta_{k} b_{k} b_{k}^{\dagger} + \zeta_{k} (b_{k}^{\dagger} b_{-k}^{\dagger} + b_{k} b_{-k})$$
 (2.19)

zu diagonalisieren. Die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $b_k^{\dagger}$  und  $b_k$  können dabei über die Bogoliubovtransformierten Operatoren  $\tilde{b}_k^{\dagger}$  und  $\tilde{b}_k$  ausgedrückt werden

$$b_k = \tilde{b}_k \cosh \Theta_k + \tilde{b}_{-k}^{\dagger} \sinh \Theta_k \tag{2.20a}$$

$$b_k^{\dagger} = \tilde{b}_k^{\dagger} \cosh \Theta_k + \tilde{b}_{-k} \sinh \Theta_k , \qquad (2.20b)$$

wobei dieser Ansatz der Impulserhaltung genügt. Dabei muss der Winkel  $\Theta_k$  so gewählt werden, dass die  $\tilde{b}_k \tilde{b}_{-k}$ - und  $\tilde{b}_k^{\dagger} \tilde{b}_{-k}^{\dagger}$ -Terme ausgelöscht werden.

## 2.3 Die mathematische Beschreibung eines Dimers

Grundlage des in dieser Arbeit betrachteten Modells ist eine dimerisierte Kette bestehend aus lokalisierten Spin-1/2. Im folgenden Abschnitt wird daher der Begriff eines Spindimers erörtert und eine mathematische Darstellung seines Hilbertraums aufgeführt. Bei dieser Darstellung handelt es sich um eine abgewandelte Form der bond-operator Darstellung, sprich eine Darstellung zweier gebundener Spinoperatoren, nach Sachdev und Bhatt [22]. Letztere Darstellung hat sich bereits in vielen wissenschaftlichen Arbeiten wie beispielsweise [23, 24] bezahlt gemacht.

Das später betrachtete Modell basiert auf einer Spin-1/2 Kette mit alternierenden Bindungen J und J'. Dabei ist J sehr viel größer als J' und etwaige andere Kopplungen des Modells. Dadurch ist es möglich, zwei durch J gekoppelte Spins als ein einzelnes, bosonisches Objekt zu nähern, bevor sie mit ihrer Umgebung wechselwirken. Dies ist schematisch in Abbildung 2.1 dargestellt. Jeder dieser Spins kann nun entweder den Zustand  $|\uparrow\rangle$  oder  $|\downarrow\rangle$  annehmen. Das

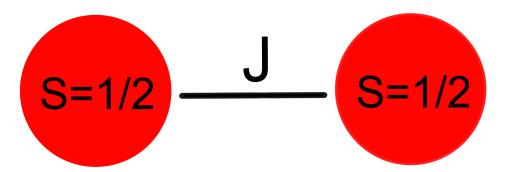


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung eines Dimers. Dieser besteht aus zwei Fermionen, welche durch eine starke Kopplung J gekoppelt sind. Die Wechselwirkungskoeffizienten mit der Umgebung sind deutlich geringer als J. Dadurch kann das Dimer als ein eigenständiges, bosonisches Objekt beschrieben werden.

Gesamtsystem kann dadurch vier verschiedene Zustände annehmen. Zum einen ein Singlet  $|s\rangle$ , welches für ein antiferromagnetisches J (J > 0) den Grundzustand mit einer Energie von  $-\frac{3}{4}J$ 

beschreibt. Zum Anderen drei Triplets  $|t_{\alpha}\rangle$ , welche die drei angeregten Zustände mit Energie  $\frac{1}{4}J$  beschreiben. Dabei steht  $\alpha$  für den Triplonflavour, welcher durch die drei Raumrichtungen x,y und z ausgedrückt wird. Diese Zustände lassen sich über die Superpositionen

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$$
 (2.21a)

$$|t_{x}\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle) \tag{2.21b}$$

$$\left|t_{y}\right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(\left|\uparrow\right\rangle\left|\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\right\rangle\left|\downarrow\right\rangle)$$
 (2.21c)

$$|t_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$$
 (2.21d)

ausdrücken. Der Einfachheit halber wird die Kurzschreibweise

$$|t_{\alpha}\rangle =: |\alpha\rangle \tag{2.22}$$

eingeführt. Häufig wird im Weiteren die Darstellung nach Ref. [22] (auch Sachdevs Darstellung) verwendet. In dieser können diese vier Zustände generiert werden, indem die zugehörigen bosonische Aufsteigeoperator  $s^{\dagger}$ ,  $t_x^{\dagger}, t_y^{\dagger}$  oder  $t_z^{\dagger}$  auf einen fiktiven Vakuumszustand  $|0\rangle$  angewendet werden. Darüber lässt sich, wie beispielsweise in Ref. [25] ein Ausdruck für die Spinoperatoren  $\vec{S}_i$  finden. In dieser Arbeit wird eine leicht abgewandelte Form davon verwendet, welche den Vorteil hat, vollständig auf real existierenden Zuständen zu basieren.

#### 2.3.1 Die Triplonoperator Darstellung

In der Triplonoperator Darstellung fungiert der Grundzustand  $|s\rangle$ als Vakuumszustand des Systems

$$|0\rangle := |s\rangle \,, \tag{2.23}$$

während die Physik des Systems nun vollständig über die angeregten Zustände  $|\alpha\rangle$  beschrieben wird. Dies ist analog zu  $\bar{s}=1$  in Sachdevs Darstellung. Die Aufsteigeoperatoren können nun über

$$t_{\alpha}^{\dagger} = |\alpha\rangle\langle s| \tag{2.24}$$

ausgedrückt werden. Dies führt nach Ref. [22, 25] mit  $s=s^\dagger=1$  für die Spinoperatoren wiederum auf folgenden Ausdruck

$$S_{1,2}^{\alpha} = \pm \frac{1}{2} (t_{\alpha} + t_{\alpha}^{\dagger}) - i \frac{1}{2} \sum_{\beta \zeta} \epsilon_{\alpha\beta\zeta} t_{\beta}^{\dagger} t_{\zeta} . \qquad (2.25)$$

Aufgrund der Energieverteilung mit  $-\frac{3}{4}J$  für den Grundzustand sowie  $\frac{1}{4}J$  für je einen der angeregten Zustände kann zudem direkt der Ausdruck

$$J\vec{S}_{1,j}\vec{S}_{2,j} = -\frac{3}{4}J + J\sum_{\alpha} t_{\alpha}^{\dagger} t_{\alpha}$$
 (2.26)

abgelesen werden. Aus Gleichung (2.24) folgt

$$t_{\alpha}t_{\beta} = t_{\alpha}^{\dagger}t_{\beta}^{\dagger} = 0 \ . \tag{2.27}$$

Zudem muss die Bedingung

$$|0\rangle\langle 0| = 1 - \sum_{\alpha} t_{\alpha}^{\dagger} t_{\alpha} \tag{2.28}$$

beachtet werden, welche auch Hardcorebedingung genannt wird. In Worten gefasst besagt sie, dass jeder Dimer zu jeder Zeit einen Gesamtspin 1 haben muss. Daraus folgt die Kommutatorrelation für Hardcorebosonen nach Ref. [26]

$$[t_{\alpha}, t_{\beta}^{\dagger}] = \delta_{\alpha, \beta} \left( 1 - \sum_{\gamma} t_{\gamma}^{\dagger} t_{\gamma} \right) - t_{\beta}^{\dagger} t_{\alpha} . \tag{2.29}$$

Die Hardcorebedingung sorgt dafür, dass der von den vier Zuständen aufgespannte Raum nicht verlassen wird. Es handelt sich bei den Dimeren somit nicht um klassische Bosonen, sondern um sogenannte Hardcorebosonen, welche trotz ihrer restlichen bosonischen Eigenschaften, weiterhin einer Art Pauliverbot unterliegen. Der Begriff "Hardcore" ist hier demnach wörtlich zu nehmen als eine Art "harter Kern", durch welchen die Bosonen nicht den selben Platz einnehmen können. Die Eigenschaften solcher Hardcore Bosonen sind unter anderem in Ref. [26, 23] genauer erörtert. Zuletzt sei gesagt, dass Triplonoperatoren, welche zu verschiedenen Dimeren gehören, selbstverständlich immer kommutieren.

### 2.4 Der Begriff der Magnetophononik

Die Magnetophononik beschreibt die magnetische Anregung von Materialien durch Gitterschwingungen. Dieser Prozess ist nicht trivial und wird daher in diesem Kapitel qualitativ erörtert. Zu diesem Zweck wird zunächst das Phonon im Einzelnen betrachtet.

#### 2.4.1 Phononen in Festkörpern

Phononen sind Quasiteilchen in Festkörpern, durch welche die elementaren Gitterschwingungen beschrieben werden. Als Gitterschwingung wird die Schwingung zwischen den Atomrümpfen, welche das Gitter eines Festkörpers bilden, verstanden. Phononen können unterteilt werden in sogenannte optische und akustische Phononen. Akustische Phononen sind Schwingungen der Atomrümpfe in Phase während optische Phononen gegenphasige Schwingungen darstellen. Schallwellen in Festkörpern können dabei durch akustische Phononen beschrieben werden. Optisch bedeutet hier jedoch nicht automatisch, dass diese Phononen durch Photonen angeregt werden können. Damit dies funktioniert, werden pro Einheitszelle des Gitters mehrere, verschieden ionisierte Atomrümpfe benötigt, welche zusammen ein Dipolmoment haben, an welches elektromagnetische Felder koppeln können. Ist dies der Fall, liegen die Anregungsfrequenzen optischer Phononen in typischen Festkörpern im Infrarotspektrum elektromagnetischer Wellen. Daher werden solche Phononen auch infrarot-aktive Phononen genannt. Infrarot-aktive Phononen haben dabei immer eine ungerade Parität. Neben den infrarot-aktiven Phononen gibt es zudem die Raman-aktiven Phononen, welche nicht direkt durch das Licht, sondern durch andere infrarotaktive Phononen erzeugt werden und gerade Parität haben, sich ansonsten jedoch ähnlich wie infrarot-aktive Phononen verhalten [27, 28].

Wird nun ein solches infrarot-aktives Phonon der Frequenz  $\omega_0$  mit einem monochromatischen Laser  $E(t)=E_0e^{i\omega t}$  getrieben, verhält sich die Auslenkung des Phonons q(t) für kleine Laseramplituden wie ein getriebener harmonischer Oszillator

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}q(t) + \omega_0^2 q = \frac{\mathcal{Q}}{\mathcal{M}}E(t) \tag{2.30}$$

mit einer effektiven Masse  $\mathcal{M}$  und einer effektiven Bornladung  $\mathcal{Q}$ . Das Verhalten des Phonons wird also als lineare Antwort auf das Treiben durch den Laser betrachtet. Um halbwegs realistische Phononen zu beschreiben, muss zudem eine allgemeine Dämpfung  $\gamma$  berücksichtigt werden, da das betrachtete Phonon an andere Phononen koppelt und diesen somit einen Teil seiner Energie übertragen wird. Daher folgt

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}q(t) + \gamma \frac{\partial}{\partial t}q(t) + \omega_0^2 q = \frac{\mathcal{Q}}{\mathcal{M}}E(t). \tag{2.31}$$

Diese Gleichung wird gelöst durch  $q(t)=q_0e^{i\omega_0t}$ mit der komplexen Amplitude

$$q_0 = \frac{\mathcal{Q}E_0}{\mathcal{M}}(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega). \tag{2.32}$$

Aus diesem Ausdruck geht für kleine  $\gamma$  hervor, dass die stärkste Anregung bei der Resonanz  $\omega = \omega_0$  geschieht. Dieses Modell wird auch Lorentzmodell oder Lorentz-Oszillator genannt.

Phononen, die sich so beschreiben lassen, werden harmonische Phononen genannt. Für hohe Laseramplituden  $E_0$  hingegen ist die Antwort des Phonons auf das Treiben des Lasers nicht linear. In diesem Fall wird von anharmonischen Phononen gesprochen.

#### 2.4.2 Magnetische Anregung durch Phononen

Phonon beschreiben Bewegungen der Atome eines Kristallgitters. Mit den Atomen bewegen sich auch deren Orbitale, welche die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen beschreiben. Überlappen sich diese Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, ermöglicht dies einen virtuellen Hüpfprozess der Form

$$[\uparrow | \downarrow] \to [\uparrow \downarrow |] \to [\uparrow | \downarrow] \tag{2.33}$$

mit einem Energiebetrag der Form  $\Delta E = \frac{-2t^2}{U}$  entsprechend des Hubbardmodells [19]. Bewegen sich die Orbitale, so ändert sich der Überlapp und damit die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten dieses virtuellen Prozesses. Auf diese Weise ist es den Phononen möglich, mit den magnetischen Eigenschaften des Systems zu interagieren. Solcherlei Interaktionen durch infrarot-aktive beziehungsweise Raman-aktive Phononen konnten besipielsweise in den Artikeln [29, 30, 31] nachgewiesen werden. Der Begriff Magnetophononik wird in dem Paper [32] eingeführt und beschreibt das kohärente Anregen eines Spinsystems durch harmonische, infrarot-aktive oder Raman-aktive Phononen. Der Einfachheit halber beschränkt sich diese Arbeit auf das Betrachten von infrarot-aktiven Phononen.

## 2.5 Die Lindblad Master Gleichungen

Im folgenden Abschnitt werden die verwendeten Bewegungsgleichungen, die so genannten 'Lindblad Master Gleichungen', erläutert. Diese beschreiben nach der Veröffentlichung [33] von G. Lindblad und Ref. [34] die Dynamik eines offenen quantenmechanischen Systems. Das bedeutet konkret, dass dem betrachteten System dissipative Effekte in ein nicht unbedingt näher definiertes Bad ermöglicht sind. Der Vorteil der Lindblad Master Gleichungen besteht vor allem darin, dass daher keine Badoperatoren definiert werden müssen. Stattdessen werden die dissipativen Effekte allein als die möglichen Dissipationen durch die bereits vorhandenen Operatoren des beobachteten Systems beschrieben. Das spart sowohl analytische als auch numerische Rechenleistung. Bei den

Lindblad Master Gleichungen handelt es sich um eine Erweiterung der von-Neumann-Gleichung (2.14) aus Abschnitt 2.1.2.

Die Erweiterung der von-Neumann-Gleichung zu der Lindblad Master Gleichung geschieht nach dem Vorbild von [34] und [1]. Die Grundlage der Lindblad Master Gleichung ist, dass ein beobachtetes System  $H_{\mathrm{Sys}}$  an externe Systeme  $H_{\mathrm{Ext}}$  ankoppelt, wobei jedoch nur die Kopplung als solche, nicht aber die komplette Dynamik des externen System, aktiv beschrieben wird. Die Eigenschaften des externen Systems werden später lediglich über die Dämpfungsraten  $\gamma$  in betracht gezogen. Der vollständige Hamiltonoperator eines solchen Konstrukts ließt sich wie folgt

$$H = H_{\rm Sys} \otimes H_{\rm Ext} = H_{\rm Sys} \otimes \mathbb{1}_{\rm Ext} + \mathbb{1}_{\rm Sys} \otimes H_{\rm Ext} + H_{\rm Int}. \tag{2.34}$$

 $H_{\mathrm{Int}}$  ist dabei der Anteil, durch welchen das beobachtete System mit dem externen System wechselwirkt. Nun kann die Dichtematrix des betrachteten Systems  $\rho_{\mathrm{Sys}}$  durch das Ausspuren der vollständigen Dichtematrix des externen Systems bestimmt werden

$$\rho_{\text{Sys}} = \text{Tr}_{\text{Ext}}(\rho). \tag{2.35}$$

Die Zeitentwicklung dieser Dichtematrix sieht nun wie folgt aus

$$\rho_{\text{Svs}}(t) = \text{Tr}_{\text{Ext}}(U(t,0)\rho(0)U^{\dagger}(t,0)) . \tag{2.36}$$

Nach der von-Neumann-Gleichung (2.14) gilt zudem

$$\frac{d}{dt}\rho_{\text{Sys}}(t) = -i\text{Tr}_{\text{Ext}}\left\{ [H(t), \rho(t)] \right\} . \tag{2.37}$$

Die Zeitentwicklung der Dichtematrix des beobachteten Subsystems kann außerdem noch über die Abbildung V(t) ausgedrückt werden

$$\rho_{\mathrm{Sys}}(0) \rightarrow \rho_{\mathrm{Sys}}(t) = V(t)\rho_{\mathrm{Sys}}(0) \coloneqq \mathrm{Tr}_{\mathrm{Ext}} \left\{ U(t,0)(\rho_{\mathrm{Sys}}(0) \otimes \rho_{\mathrm{Ext}}) U^{\dagger}(t,0) \right\} \ , \tag{2.38}$$

wobei V(t) wiederum über den Generator  $\mathcal L$  ausgedrückt werden kann

$$V(t) = e^{\mathcal{L}t} \ . \tag{2.39}$$

Dies führt direkt auf die sogenannte Lindbladgleichung

$$\frac{d}{dt}\rho_{\rm Sys}(t) = \mathcal{L}\rho_{\rm Sys} \ . \tag{2.40}$$

Für den  $\mathcal{L}$ -Generator kann schließlich, wie in Ref. [34], der Ausdruck

$$\mathcal{L}\rho_{\mathrm{Sys}} = -i[H, \rho_{\mathrm{Sys}}] + \sum_{l} \gamma_{l} \left\{ A_{l} \rho_{\mathrm{Sys}} A_{l}^{\dagger} - \frac{1}{2} A_{l}^{\dagger} A_{l} \rho_{\mathrm{Sys}} - \frac{1}{2} \rho_{\mathrm{Sys}} A_{l}^{\dagger} A_{l} \right\}$$
(2.41)

gefunden werden. Die  $A_l$  Operatoren bilden dabei eine vollständige Orthonormalbasis im zu  $H_{\mathrm{Sys}}$  zugehörigen Liouvilleraum. Der Liouvilleraum wiederum ist der Raum aller Operatoren des Hilbertraums [35]. Die Operatoren  $A_l$  werden auch Lindbladoperatoren genannt. Die  $\gamma_k$  sind die dazugehörigen Dämpfungsraten. Sie sind abhängig von der Wahl der Operatorbasis  $A_l$ , dem externen dämpfenden System und von der thermischen Zustandsdichte, sprich in diesem Fall der Bose-Einstein Verteilung

$$n(\omega_l, T) = \frac{1}{e^{\frac{\omega_l}{T}} - 1} \ . \tag{2.42}$$

Für zwei Lindbladoperatoren der Art  $A_1 = b_l$ ,  $A_2 = b_l^{\dagger}$  müssen die Dämpfungsraten im Verhältnis  $\gamma_1/\gamma_2 = n(\omega_l)/(1+n(\omega_l))$  zueinander stehen, um eine Relaxation in den Gleichgewichtszustand bei fehlender Anregung zu ermöglichen [34].

Aus der Lindbladgleichung (2.40) und dem Ausdruck (2.41), sowie der Beziehung zwischen der Heisenberg (2.13) und der von-Neumann-Gleichung (2.14) kann nun die Lindblad Master Gleichung (oder auch adjungierte Quantum Master Gleichungen nach [34])

$$\frac{d}{dt}O_{H}(t) = i[H, O_{H}(t)] 
+ \sum_{l} \gamma_{l} \left[ A_{l}^{\dagger} O_{H}(t) A_{l} - \frac{1}{2} A_{l}^{\dagger} A_{l} O_{H}(t) - \frac{1}{2} O_{H}(t) A_{l}^{\dagger} A_{l} \right]$$
(2.43)

für Operatoren im Heisenbergbild  $O_{\mathrm{H}}$  geformt werden. In dieser Arbeit wird der Erwartungswert

$$\begin{split} \frac{d}{dt} \left\langle O_{\mathrm{H}}(t) \right\rangle &= i \left\langle [H, O_{\mathrm{H}}] \right\rangle (t) \\ &+ \sum_{l} \gamma_{l} \left[ \left\langle A_{l}^{\dagger} O_{\mathrm{H}} A_{l} \right\rangle (t) - \frac{1}{2} \left\langle A_{l}^{\dagger} A_{l} O_{\mathrm{H}} \right\rangle (t) - \frac{1}{2} \left\langle O_{\mathrm{H}} A_{l}^{\dagger} A_{l} \right\rangle (t) \right] \end{split} \tag{2.44}$$

der Lindblad Master Gleichung genutzt. Dabei setzen sich die Lindblad Master Gleichungen aus den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen (Zeile 1 in Gleichung 2.43) und dem sogenannten Dissipator (Zeile 2 in Gleichung 2.43) zusammen.

## 2.6 Die Molekularfeldnäherung

Die Molekularfeldnäherung kann genutzt werden, um komplexe Wechselwirkungsterme eines Hamiltonoperators auf mehrere, einfachere Terme aufzuteilen. Sie basiert darauf, dass die Operatoren der Wechselwirkungspartner nicht miteinander sondern stattdessen mit einem mittleren Feld wechselwirken, wobei Quantenfluktuationen vernachlässigt werden. Dieses wiederum beschreibt das gemittelte Verhalten der jeweils anderen Wechselwirkungspartner. Dadurch können diese Wechselwirkungsterme in einfachere Terme aufgeteilt werden. Ein Operator  $\hat{O}$  wird hierbei als Schwankung  $\Delta$  um seinen Mittelwert  $\langle \hat{O} \rangle$  betrachtet

$$\hat{O} = \Delta + \left\langle \hat{O} \right\rangle. \tag{2.45}$$

Diese Näherung funktioniert dementsprechend nur für verhältnismäßig kleine Fluktuationen  $\Delta \ll \langle \hat{O} \rangle$ . Da im später betrachteten System makroskopisch besetzte Zustände bei tiefen Temperaturen, beziehungsweise T=0, und somit geringen Fluktuationen  $\Delta$  vorliegen werden, ist diese Bedingung erfüllt.

Betrachtet werden Wechselwirkungsterme zweier interagierender Subsysteme A und B, welche je ihre eigene Operatorbasis  $\mathcal{B}_A$  beziehungsweise  $\mathcal{B}_B$  mit sich bringen. Solche Wechselwirkungsterme haben oft eine Form wie  $H_{AB} \propto \hat{O}_A \hat{O}_B$ , wobei  $\hat{O}_A \in \mathcal{B}_A$  und  $\hat{O}_B \in \mathcal{B}_B$  beliebige Operatoren ihrer Subsysteme sind. Diese Wechselwirungsterme lassen sich dann wie folgt zerlegen

$$\begin{split} H_{\mathrm{AB}} &\propto \hat{O}_{A} \hat{O}_{B} = \left( \Delta_{A} + \left\langle \hat{O}_{A} \right\rangle \right) \left( \Delta_{B} + \left\langle \hat{O}_{B} \right\rangle \right) \\ &= \Delta_{A} \left\langle \hat{O}_{B} \right\rangle + \Delta_{B} \left\langle \hat{O}_{A} \right\rangle + \left\langle \hat{O}_{A} \right\rangle \left\langle \hat{O}_{B} \right\rangle + \underbrace{\Delta_{A} \Delta_{B}}_{\rightarrow 0} \\ &= \left( \hat{O}_{A} - \left\langle \hat{O}_{A} \right\rangle \right) \left\langle \hat{O}_{B} \right\rangle + \left( \hat{O}_{B} - \left\langle \hat{O}_{B} \right\rangle \right) \left\langle \hat{O}_{A} \right\rangle - \left\langle \hat{O}_{A} \right\rangle \left\langle \hat{O}_{B} \right\rangle \\ &= \left\langle \hat{O}_{A} \right\rangle \hat{O}_{B} + \hat{O}_{A} \left\langle \hat{O}_{B} \right\rangle - \left\langle \hat{O}_{A} \right\rangle \left\langle \hat{O}_{B} \right\rangle \;. \end{split} \tag{2.46}$$

#### 2.7 Die Greensunktion

Die lineare Antworttheorie [19] ist ein Werkzeug, um die Antwort eines ungestörten Systems  $\hat{H}_0$  auf das Einschalten einer Störung  $\hat{V}(t) = \hat{A}s(t)$  zu bestimmen. Dabei ist s(t) eine skalare Schaltfunktion und  $\hat{A}$  der eigentliche Operator der Störung. Das Gesammtsystem ist somit gegeben durch

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \ . \tag{2.47}$$

Ziel hierbei ist es, die Änderung einer Observablen  $\langle \hat{B} \rangle$  (t) relativ zur Observablen des ungestörten Systems  $\langle \hat{B} \rangle_0$  zu bestimmen. Dies geschieht über

$$\begin{split} \left\langle \hat{B} \right\rangle(t) &= \left\langle \hat{B} \right\rangle_0 + i \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(t-t') \left\langle \left[ \hat{B}(t), \hat{A}(t') \right] \right\rangle s(t') dt' + \mathcal{O}(s^2(t)) \\ &=: \left\langle \hat{B} \right\rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} X_{BA}(t,t') s(t') dt' + \mathcal{O}(s^2(t)) \;. \end{split} \tag{2.48}$$

Dabei ist  $X_{BA}(t,t')$  die sogenannte Antwortfunktion, welche sich lediglich durch ein Vorzeichen von der sogenannten retardierten Greenfunktion  $G_{AB}^{\text{ret}}(t,t')$  unterscheidet. Sie lässt sich unter anderem gemäß Gleichung (2.48) über den Kubo Formalismus

$$G_{AB}^{\rm ret}(t,t') = -X_{BA}(t,t') = -i \left\langle \left[ \hat{B}(t), \hat{A}(t') \right] \right\rangle \Theta(t-t') \tag{2.49}$$

bestimmen. Diese retardierte Greenfunktion ist ein extrem häufig verwendetes Werkzeug [36, 37, 19], und kann beispielsweise im Rahmen der diagrammatischen Störungstheorie verwendet werden, um Entwicklungen von Vielteilchensystemen zu beschreiben.

In diesem Zusammenhang kann die vollständige, lokale Greenfunktion über die Dysongleichung

$$G(\omega) = G^{(0)}(\omega) + G^{(0)}(\omega)\Sigma(\omega)G(\omega) = \frac{1}{(G^{(0)}(\omega))^{-1} - \Sigma(\omega)}$$
(2.50)

in die wechselwirkungsfreie Greenfunktion  $G^{(0)}(\omega)=\frac{1}{(\omega+i0^+)-\varepsilon(k)}$ , mit den Eigenenergien  $\varepsilon(k)$  des ungestörten Hamiltonoperators  $H_0$ , und die sogenannte Selbstenergie  $\Sigma(\omega)$  aufgeteilt werden. Die Selbstenergie beschreibt dabei den Wechselwirkungsbeitrag einzelner Moden zur gesamten Greenfunktion. Analog zu  $G^{(0)}(\omega)$  kann zudem die Resolvente

$$R := \frac{1}{(\omega + i0^+) - H_0} \tag{2.51}$$

definiert werden. Über die wechselwirkungsfreie Greenfunktion  $G^{(0)}(\omega)$  kann zudem auch die Zustandsdichte DOS (engl.: Density Of States) des Systems

$$\mathrm{DOS}(\omega) = \frac{-1}{\pi} \sum_{k}^{\mathrm{1.BZ}} \mathrm{Im} \left[ G^{(0)}(\omega) \right] = \frac{-1}{\pi} \sum_{k}^{\mathrm{1.BZ}} \mathrm{Im} \left[ \frac{1}{(\omega + i0^{+}) - \omega_{k}} \right] \tag{2.52}$$

bestimmt werden.

## 2.8 Verwendete numerische Werkzeuge

In diesem Abschnitt werden die für diese Masterarbeit verwendeten, numerischen Werkzeuge aufgelistet. Die verwendeten Programmiersprachen sind C++, python sowie Wolfram Mathematica. Zum Lösen der Bewegungsgleichungen wurde ein Runge-Kutta Algorithmus 4. Ordnung [38, 39] für gekoppelte Differentialgleichungen mit fester Schrittweite  $\Delta t$  nach dem Vorbild von Ref. [40] in C++ implementiert. Es wurde keine vorgefertigte Routine verwendet, da es als zielführender erachtet wurde, diesen verhältnismäßig einfachen Algorithmus selber zu implementieren, als dafür eine vorgefertigte Bibliothek zu verwenden. Dies ermöglicht einen besseren Überblick über das Programm, welches die Bewegungsgleichungen löst und somit eine essenzielle Rolle in dieser Arbeit spielt. Zur Parallelisierung wurde openmpi verwendet [41]. Zudem wurde die Eigen-Bibliothek genutzt [42]. Zum Diagonalisieren von Matrizen wurde die eigenvalues() Routine der python Bibliothek numpy [43] beziehungsweise die Routine Eigenvalues[] von Wolfram Mathematica [44] verwendet. Beide Routinen sind nicht direkt an einen Algorithmus gekoppelt, sondern können das verwendete Verfahren an die zu diagonalisierende Matrix anpassen. Zur Fouriertransformation wurde die FFT(Fast Fourier Transform) Implementierung numpy.fft.rfft() der python Bibliothek numpy [43], zum Fitten von Funktionen die Methode scipy.optimize.curvefit() der Bibliothek scipy [45] verwendet. Zur Berechnung komplexer, eliptischer Integrale wurde EllipticK//,EllipticE// und EllipticPi// von Wolfram Mathematica [44] genutzt.

## 3 Das Modell

Das verwendete Modell ist in Abbildung 3.1 schematisch dargestellt. Es besteht zunächst aus der dimersierten Kette aus lokalisierten Spin- $\frac{1}{2}$  mit alternierenden, antiferromagnetischen Kopplungen J und J' wie in rot dargestellt. Die J-Kopplung ist dabei mindestens doppelt so groß wie J'-Kopplung, die J-Kopplung dominiert also das betrachtete Spinsystem. Dadurch ist es möglich, zwei durch J gekoppelte Spins als ein einzelnes bosonisches Objekt zu beschreiben, welches dann wiederum mit seiner Umgebung, vor allem mit den benachbarten Dimeren, wechselwirkt. Dieses bosonische Objekt ist nun ein so genanntes Dimer, wie in Sektion 2.3 beschrieben. Dabei kann die Hardcorebedingung für kleine Triplonbesetzungen vernachlässigt werden, sodass die Triplonoperatoren als rein bosonische Operatoren betrachtet werden können. Dies ist gut an der Kommutatorrelation (2.29) zu sehen, welche für kleine Triplonbesetzungen in die rein bosonische Kommutatorrelation übergeht.

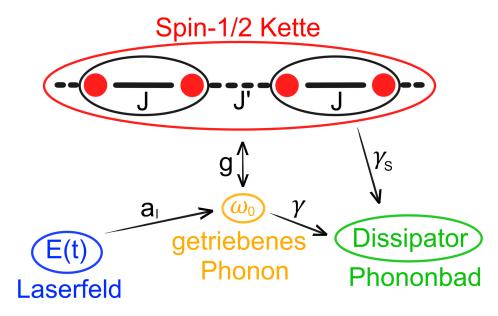


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung des betrachteten Modells. Zu sehen sind die dimersierte Spinkette (rot), das Laser getriebene optische Phonon (orange), der Laser (blau) sowie das Bad aus akustischen Phononen (grün).

Ein Dimer kann zum einen mit benachbarten Dimeren in der Spinkette über J' wechselwirken. Des Weiteren kann das Dimer mit den infrarot-aktiven harmonischen Phononen aus Abschnitt 2.4.1 über die Spin-Phonon Kopplung g wechselwirken. Diese sind in Abbildung 3.1 in orange dargestellt. Betrachtet wird lediglich ein einziger Phononkanal mit Frequenz  $\omega_0$ , da, wie ebenfalls in Abschnitt 2.4.1 beschrieben, in erster Linie die mit dem Laser resonante Phononfrequenz angeregt wird. Im Hauptmodell dieser Arbeit, welches auch als J-Modell bezeichnet und in Abschnitt 3.2 beschrieben wird, koppelt das getriebene Phonon an die J-Kopplung des Spinsystems. Es ist prinzipiell auch möglich, dass das getriebene Phonon an die J'-Kopplung des Spinsystems koppelt. Dies wird im J'-Modell in Abschnitt 3.3 weiter betrachtet. Im Weiteren ist zu bemerken, dass sich in dem

System zwar durchaus mehrere dieser optischen Phonon befinden (eins pro Dimer), diese im Endeffekt jedoch durch eine einzelne Mode beschrieben werden. Bei dieser handelt es sich, im Sinne der Fouriertransformation aus Abschnitt 2.2.1, um die vom Laser angeregte q=0-Mode, welche das Verhalten des getriebenen Phonons dominiert und für welche im Folgenden die singular Form 'optisches Phonon' verwendet wird. Alle anderen Moden werden, wie in Abschnitt 2.4.1 argumentiert, vernachlässigt.

Ein weiterer wichtiger Bestandteil des Modells ist der Laser, welcher über die Amplitude  $a_l$  an das optische Phonon koppelt und dieses antreibt. Dieser ist in Abbildung 3.1 in blau zu sehen und wird durch die Amplitudenfunktion seines klassischen elektrischen Feldes E(t) mathematisch beschrieben. Dies ist möglich, da, wie in Abschnitt 2.4.1 beschrieben, die Auslenkung von Phononen im Bereich kleiner Amplituden  $a_l$  eine lineare Antwort auf das Treiben eines Lasers darstellt. Dieses Feld kann verschiedene Formen, wie beispeilsweise stationäres Treiben oder Laserpulse, annehmen, wird jedoch stets von einer Laserfrequenz  $\omega$  dominiert.

Zuletzt ist in Abbildung 3.1 in grün das Phononbad zu sehen, welches aus allen restlichen, überwiegend akustischen Phononen besteht. Durch dieses wird dem System Energiedissipation ermöglicht, sodass ein unendlich langes Treiben durch den Laser nicht automatisch in ein fortwährendes Aufheizen mündet. Dabei ist  $\gamma$  die Dämpfungsrate des Phonons und  $\gamma_s$  die Dämpfungsrate des Spinsystems. Alternativ kann  $\gamma$  auch als inverse Lebensdauer einer Phononanregung und  $\gamma_s$  als inverse Lebenszeit einer Spinanregung gesehen werden. Dieses Phononbad wird in der folgenden mathematischen Betrachtung jedoch kein Teil des Hamiltonoperators, sondern wird stattdessen durch den Dissipator der Lindblad Master Gleichung (2.43) beschrieben.

Ein solches Spinsystem kann, wie bereits in der Motivation erwähnt, durch einen Spin-Peierls Übergang [13, 14, 15, 16] entstehen. Dieser ist dadurch charakterisiert, dass die magnetische Suszeptibilität für geringe Temperaturen sehr schnell gegen null geht. Dadurch ensteht die benannte Dimerstruktur und es öffnet sich eine Bandlücke. In dem hauptsächlich referenzierten Zielmaterial CuGeO<sub>3</sub> geschieht ein solcher Übergang bei Temperaturen von T < 14K [15, 16]. Ein Spin-Peierls Übergang ist jedoch nicht unbedingt notwendig um ein solches System zu realisieren. Beispielsweise kann  $(VO)_2P_2O_7$  aufgrund seiner Gitterstruktur ebenfalls über eine solche dimersierte Spinkette beschrieben werden [46, 47, 48].

# 3.1 Einordnung der Systemparameter

Das betrachete System ist abhängig von einer Vielzahl von Parametern, welche im folgenden Abschnitt in den physikalischen und analytischen Kontext dieser Arbeit eingeordnet werden.

- J Die Intradimerkopplung
- J' Die Interdimerkopplung
- $\omega_0$  Die Phononfrequenz
- g Die Spin-Phononkopplung
- $\omega$  Die Laserfrequenz
- $a_l$  Die Laseramplitude in Einheiten von Energie
- $\gamma$  inverse Lebensdauer / Zerfallsrate der Anregung des Phonons

•  $\gamma_s$  - inverse Lebensdauer / Zerfallsrate der Anregung eines Dimers

Die Kopplungskonstanten J und J' sind die starke und schwache Kopplung der Spins. Das Verhältnis dieser Parameter bestimmt die Bandbreite sowie die Bandlücke des Systems. Je kleiner  $\lambda = J'/J$ , desto schmaler das Band und desto größer die Lücke. Für  $\lambda \to 1$  würde die Bandlücke verschwinden. Um die Dimere als freie Bosonen betrachten zu können, sollte nach Ref. [2] gelten  $\lambda \lesssim 1/2$ . Der Einfachheit halber wird in dieser Arbeit J=1 und J'=1/2 verwendet, solange es nicht anders angegeben ist. In einem realistischen Festkörper liegt J in der Größenordnung  $J \sim 10$ meV [14, 16].

Die Phononfrequenz  $\omega_0$  ist die Frequenz des treibenden, infrarot-aktiven Phonons. In dieser Arbeit wird angenommen, dass das betrachtete Phonon eine beliebige, beziehungsweise zum Laser resonante, Frequenz hat. In einem echten Festkörper sind die möglichen Phononmoden eine Frage der Gitterstruktur und der Lasereinstellungen. In vielen Fällen treten im realen Festkörper einige, wenige, dominante Phononmoden auf. Dies ist, neben der in Abschnitt 2.4.1 beschriebenen Resonanz zwischen Phonon und Laser, ein weiterer Grund, warum es sinnvoll ist, immer nur einzelne Phononfrequenzen zu betrachten. Die Phononfrequenz des Modells  $\omega_0$  kann ohne Weiteres auf die im realen Festkörper dominanten Phonon Moden gelegt werden.

Die Spin-Phononkopplung g ist für die meisten Festkörper eher schwach g < 0.1J [49]. Einige Festkörper mit geringer Symmetrie, wie beispielsweise  $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ , erreichen allerdings auch höhere Werte von bis zu  $g \approx 0.5J$  [50, 46, 47, 48]. Für höhere Werte von g treten andere physikalische Effekte in den Vordegrund als für geringe g. Daher wird zwischen einem Bereich schwacher Kopplung bis g = 0.1J und einem Bereich starker Kopplung von g = 0.1J bis g = 0.5J unterschieden. Der Übergang zwischen diesen Bereichen ist allerdings fließend. In dieser Arbeit werden zur qualitativen Analyse teilweise Werte von g > 0.5J genutzt.

Die Größen  $\omega$  und  $a_l$  sind Frequenz und Amplitude des treibenden Lasers. Dabei ist  $a_l$  nicht die eigentliche Laseramplitude, sondern eine Wechselwirkungsamplitude, welche sich nach [2] ausdrücken lässt durch

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{2}} 2eE_0 q_{\rm osc}.$$
 (3.1)

Dabei ist e die Elektronladung,  $E_0$  die tatsächliche Laserfeldstärke und  $q_{\rm osc}$  die approximierte maximale Auslenkung der Atome. Für Sauerstoffionen beispielsweise ist  $q_{\rm osc}=1,1\cdot 10^{-11}{\rm m}$ . Die Laseramplitude  $a_l$  wird meist in Einheiten von  $\omega_0$  angegeben, damit sichergestellt werden kann, das in Abschnitt 2.4.1 beschriebene harmonische Regime nicht zu verlassen. Am häufigsten wird  $a_l=0,004\omega_0$  verwendet.

Die Dämpfungskoeffizienten des Systems  $\gamma$  und  $\gamma_s$  sorgen für eine Relaxation zurück in den Grundzustand bei Abschaltung des Lasers. Bei der Auswertung des betrachteten Modells werden wir auf sogenannte stationäre Nichtgleichgewichtszustände (NESS aus dem engl.: Non Equilibrium Steady States) treffen. Damit diese zustande kommen, müssen beide Dämpfungskoeffizienten endlich sein. Die Dämpfung des Phonons  $\gamma$  sollte zudem größer sein als die Laseramplitude  $a_l$  um ein übermäßiges Aufheizen des Systems zu verhindern. Meist wird  $a_l/\gamma=0,2$  gewählt. Da die Dissipation der Spinanregung in ein Phononbad über die eher geringe Spin-Phononwechselwirkung stattfindet, während die Dämpfung des optischen Phonons von direkter Natur ist, sollte  $\gamma_s < \gamma$  gelten. Wie zuvor genannt können  $\gamma$  und  $\gamma_s$  auch als inverse Lebensdauer des Phonons und der Triplonanregung gesehen werden. In diesem Sinne entsprechen die Dämpfungsraten  $\gamma$  beziehungsweise  $\gamma_s$  der Linienbreite des Phonons beziehungsweise der Triplonanregung.

Insgesammt müssen die Laseramplitude  $a_l$  und die Dämpfungskoeffizienten  $\gamma$  und  $\gamma_s$  so eingestellt werden, dass die gesammte Triplonbesetzung  $n_x$  nicht größer wird als  $n_x \approx 0,2$ . Ansonsten lässt sich die Hardcorebedingung für die Triplonoperatoren nicht vernachlässigen, wie in [1, 2] gezeigt wurde.

#### 3.2 Das J-Modell

Nun, da das Modell schematisch dargestellt und ein Überblick über die Systemparameter geschaffen wurde, kann der Hamiltonoperator des Systems aufgestellt werden. Dies geschieht zunächst für das hauptsächlich verwendete J-Modell, indem das Phonon an die Intradimerkopplung J koppelt.

#### 3.2.1 Der Hamiltonoperator

Der Hamitonoperator unseres Systems lässt sich in vier Teile unterteilen

$$H = H_{\rm S} + H_{\rm SP} + H_{\rm P} + H_{\rm L} \ . \tag{3.2}$$

Dabei beschreibt  $H_{\rm S}$  das Spinsystem,  $H_{\rm P}$  die optischen Phononen,  $H_{\rm SP}$  die Spin-Phonon-Kopplung und  $H_{\rm L}$  die Kopplung des Lasers an die optischen Phononen. Wie bereits erwähnt, wird das Phononbad im Hamiltonoperator nicht betrachtet. Der Hamiltonoperator des Spinsystems lautet

$$H_{\rm S} = \sum_{i} \left( J \vec{S}_{1,j} \vec{S}_{2,j} + J' \vec{S}_{2,j} \vec{S}_{1,j+1} \right) . \tag{3.3}$$

Summiert wird über alle Dimere j, wobei der erste Term die Intradimerkopplung über J und der zweite Term die Interdimerkopplung über J' beschreibt. Die  $\vec{S}_{i,j}$  beschreiben die Spinkomponeten eines Spin- $\frac{1}{2}$  Teilchens in Dimer  $j \in \{0, \cdots, N\}$  an Position  $i \in \{1, 2\}$ , wobei die betrachtete Kette aus N Dimeren besteht. Der reine Phononanteil ergibt sich zu

$$H_{\rm P} = \omega_0 \sum_j b_j^{\dagger} b_j \ , \tag{3.4}$$

wobei zunächst je eine Phononmode für jedes Dimer j betrachtet wird. Die Wechselwirkung eines Dimers mit einem Phonon geschieht über

$$H_{\rm SP} = g \sum_{j} (b_j^{\dagger} + b_j) \vec{S}_{1,j} \vec{S}_{2,j} . \tag{3.5}$$

Hier koppeln die Spins  $\vec{S}$  eines Dimers j an die Auslenkung des entsprechenden Phonons. Zuletzt kann der Laserbeitrag über

$$H_{\rm L} = E(t) \sum_{j} (b_j + b_j^{\dagger}) \tag{3.6}$$

beschrieben werden, in welchem die Amplitudenfunktion E(t) des Lasers ebenfalls an die Auslenkungen der einzelnen Phononen koppelt.

#### Fouriertransformation des Phononanteils

Wie zu Beginn dieses Kapitels erwähnt, werden im Weiteren alle Phononmoden außer q=0 vernachlässigt, wodurch sich die Fouriertransformation aus Abschnitt 2.2.1 vereinfacht zu

$$b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} b_0 \quad \text{und} \quad b_j^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} b_0^{\dagger} .$$
 (3.7)

Dadurch ergibt sich für den reinen Phononanteil

$$H_{\rm P} = \omega_0 b_0^{\dagger} b_0 \ . \tag{3.8}$$

Der Ausdruck der Phononauslenkung in  $H_{\rm L}$  und  $H_{\rm SP}$  transformiert sich zu

$$\sum_{j} (b_{j}^{\dagger} + b_{j}) = \frac{1}{\sqrt{N}} (b_{0}^{\dagger} + b_{0}) =: \hat{d} . \tag{3.9}$$

Für  $H_{\rm L}$  ergibt sich somit

$$H_{\rm L} = NE(t)d \; , \tag{3.10} \label{eq:3.10}$$

wobei das N aus der Summation über j kommt.

#### Diagonalisierung des Spinanteils

Im Folgenden wird nun der Spinanteil des Hamiltonoperators diagonalisiert. Dies betrifft zum einen den Spinanteil  $H_{\rm S}$  selber, aber auch den Spin-Phononkopplungsterm  $H_{\rm SP}$ . Dazu muss zunächst eine Formulierung für die Spinoperatoren  $\vec{S}_{i,j}$  gefunden werden. Diese können aufgrund der Dimerstruktur, wie in Abschnitt 2.3 dargestellt, durch die Triplonoperatoren  $t_{i,\alpha}$  und  $t_{i,\alpha}^{\dagger}$  ausgedrückt werden. Wie zu Beginn des Kaptitels erwähnt, wird das System ausschließlich für kleine Triplonbesetzungen  $n_x < 0,2$  betrachtet, wodurch es gerechtfertigt ist, die Triplonoperatoren als rein bosonische Operatoren zu behandeln und die Hardcorebedingung (2.29) zu vernachlässigen. Unter einer Fouriertransformation können die Ausdrücke

$$H_{\mathrm{S}} = \sum_{k,\alpha} \left[ J t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha} - \frac{1}{4} J' \cos(k) \left\{ 2 t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha} + t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha}^{\dagger} + t_{k,\alpha} t_{-k,\alpha} \right\} \right] \tag{3.11a}$$

$$H_{\rm SP} = g \frac{1}{\sqrt{N}} (b_0 + b_0^{\dagger}) \left[ \sum_{k,\alpha} t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha} - \left\langle t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha} \right\rangle_{\rm eq} \right]$$
 (3.11b)

bis auf Konstanten bestimmt werden. Zur Diagonalisierung von  $H_{\rm S}$  kann anschließend eine Bogoliubovtransformation durchgeführt werden (siehe Abschnitt 2.2.2), sodass folgendes gilt

$$H_{\rm S} = \sum_{k,\alpha} \omega_k \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} \tag{3.12a}$$

$$\omega_k = J\sqrt{1 - \frac{J'}{J}\cos(k)},\tag{3.12b}$$

wobei die Tilde einen bogoliubov<br/>transformierten Operator kennzeichnet. Damit ist  $\omega_k$  die Dispersion des reinen Spinsystems und definiert dessen Band, welches in Abschnitt 3.2.3 behandelt

wird. Im Allgemeinen folgt für die bogoliubovtransformierten Triplonoperatoren

$$t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}=y_{k}(\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{k,\alpha}+\frac{1}{2})+\frac{1}{2}y_{k}^{\prime}(\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}+\tilde{t}_{k,\alpha}\tilde{t}_{-k,\alpha}) \tag{3.13a}$$

$$y_k = \frac{1 - \frac{1}{2}\lambda\cos(k)}{\sqrt{1 - \lambda\cos(k)}} = \frac{J}{2} \frac{1 + \frac{\omega_k^2}{J^2}}{\omega_k}$$
(3.13b)

$$y'_{k} = \frac{\frac{1}{2}\lambda\cos(k)}{\sqrt{1 - \lambda\cos(k)}} = \frac{J}{2}\frac{1 - \frac{\omega_{k}^{2}}{J^{2}}}{\omega_{k}},$$
(3.13c)

was für den Spin-Phononterm auf

$$H_{\rm SP} = gd \sum_{k,\alpha} y_k (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} - n(\omega_k)) + \frac{1}{2} y_k' (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha})$$
(3.14)

führt. Die Verteilung  $n(\omega_k)$  ist dabei die termische Besetzung der Triplonmode mit Frequenz  $\omega_k$  und folgt der Bose-Einstein-Verteilung. Zudem können, wie in Abschnitt 2.6 beschrieben, noch Spin- und Phononanteil im Sinne der Molekularfeldnäherung aus Abschnitt 2.6 voneinander entkoppelt werden

$$H_{\rm SP,S} = g \langle d \rangle \sum_{k,\alpha} y_k (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} - n(\omega_k)) + \frac{1}{2} y_k' (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha})$$
(3.15a)

$$H_{\mathrm{SP,P}} = gd \sum_{k,\alpha} y_k \left( \left\langle \tilde{t}_{k,\alpha}^\dagger \tilde{t}_{k,\alpha} \right\rangle - n(\omega_k) \right) + \frac{1}{2} y_k' \left( \left\langle \tilde{t}_{k,\alpha}^\dagger \tilde{t}_{-k,\alpha}^\dagger \right\rangle + \left\langle \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha} \right\rangle \right) \ . \tag{3.15b}$$

Detailrechungen sind bis auf Konstanten in Anhang A dargestellt.

#### 3.2.2 Die Bewegungsgleichungen

Mit dem aufgestellten Hamiltonoperator lassen sich über die Lindblad Master Gleichungen (2.44) (siehe Abschnitt 2.5) wie in Ref [2] die Bewegungsgleichungen für beliebige Erwartungswerte des Systems aufstellen.

#### **Erwartungswerte**

Zunächst müssen allerdings die zu betrachtenden Erwartungswerte so gewählt werden, dass alle Operatoren, welche in den Bewegungsgleichungen vorkommen werden, durch die Operatoren dieser Erwartungswerte ausgedrückt werden können. Dazu wird ein Set von je drei Erwartungswerten für das Spinsystem und für das Phononsystem gewählt. Als Erwartungswerte für das Phononsystem werden

$$q(t) = \langle d \rangle (t) = \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} (b_0 + b_0^{\dagger}) \right\rangle (t) \tag{3.16a}$$

$$p(t) = \left\langle \frac{i}{\sqrt{N}} (b_0^{\dagger} - b_0) \right\rangle (t) \tag{3.16b}$$

$$n_{\rm Ph}(t) = \left\langle \frac{1}{N} b_0^{\dagger} b_0 \right\rangle(t) \tag{3.16c}$$

genutzt. Diese entsprechen den physikalischen Größen der Phononauslenkung q, des Phononimpulses p und der Besetzung der Phononmode  $n_{\rm Ph}$ . Für die Erwartungswerte des Spinsystems werden zunächst die Operatoren

$$u_k = \sum_{\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} \qquad \tilde{v}_k = \sum_{\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \qquad (3.17)$$

eingeführt. Dabei entspricht  $u_k$  der Triplonbesetzung der einzelnen k-Moden, während  $\tilde{v}_k$  dem Paarerzeugungserwartungswert und  $\tilde{v}_k^{\dagger}$  dementsprechend dem Paarvernichtungserwartungswert entspricht. Dabei ist anzumerken, das  $u_k$  nach Definition reell ist, während  $\tilde{v}_k = v_k + i w_k$  komplex sein kann. Die betrachteten Erwartungswerte für das Spinsystem sind dementsprechend

$$u_k(t) = \langle u_k \rangle (t) \tag{3.18a}$$

$$v_k(t) = \langle v_k \rangle (t) = \text{Re} \left[ \langle \tilde{v}_k \rangle \right] (t)$$
 (3.18b)

$$w_k(t) = \langle w_k \rangle (t) = \operatorname{Im} \left[ \langle \tilde{v}_k \rangle \right] (t) . \tag{3.18c}$$

Zudem werden die Größen

$$U(t) = \frac{1}{N} \sum_{k} y_{k} [u_{k}(t) - 3n(\omega_{k})]$$
 (3.19a)

$$V(t) = \frac{1}{N} \sum_{k} y'_{k} v_{k}(t)$$
 (3.19b)

zur Formulierung der Bewegungsgleichungen benötigt.

#### Die Bewegungsgleichungen

Nun können die Bewgungsgleichungen nach der Lindblad Master Gleichung

$$\begin{split} \frac{d}{dt} \left\langle A_{H} \right\rangle(t) &= i[H, A_{\mathrm{H}}(t)] \\ &+ \sum_{l} \gamma_{l} \left[ A_{l}^{\dagger} A_{\mathrm{H}}(t) A_{l} - \frac{1}{2} A_{l}^{\dagger} A_{l} A_{\mathrm{H}}(t) - \frac{1}{2} A_{\mathrm{H}}(t) A_{l}^{\dagger} A_{l} \right] \end{split} \tag{3.20}$$

aufgestellt werden. Dabei sind  $\langle A_H \rangle$  (t) die Erwartungswerte aus Abschnitt 3.2.2 und H ist der Hamiltonoperator bestehend aus (3.8), (3.10), (3.12a), (3.15a) und (3.15b). Für die Lindbladoperatoren wird in dieser Arbeit

$$A_1 = b_0^{\dagger} \qquad \qquad \text{und} \qquad \qquad A_2 = b_0 \tag{3.21a}$$

mit den Dämpfungskoeffizienten

$$\gamma_1 = \gamma n(\omega_0) = 0 \qquad \qquad \text{und} \qquad \qquad \gamma_2 = \gamma (n(\omega_0) + 1) = \gamma \qquad (3.21b)$$

für das Phononsystem, sowie

$$A_{k,1} = \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \qquad \qquad \text{und} \qquad \qquad A_{k,2} = \tilde{t}_{k,\alpha} \qquad \qquad (3.21c)$$

mit den Dämpfungskoeffizienten

$$\gamma_{1,k} = \gamma_s n(\omega_k) = 0$$
 und  $\gamma_{2,k} = \gamma_s (1 + n(\omega_k)) = \gamma_s$  (3.21d)

für das Spinsystem verwendet. Diese Basis wird genutzt, da sie die einfachste Basis ist, welche den Ansprüchen des Lindbladformalismus genügt. Sie ist dabei nicht Spin erhaltend, was im betrachteten Modell zumindest unter Berücksichtigung der Hardcorebedingung, nach welcher jeder Dimer zu jeder Zeit einen Gesamtspin von 1 hat, der Fall sein sollte. Da jedoch kleine Besetzungen des Spinsystems betrachtet werden, wodurch die Hardcorebedingung vernachlässigbar wird, kann diese Basis für den Lindbladformalismus verwendet werden. Mit den Rechnungen aus Anhang B folgen die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}q(t) = \omega_0 p(t) - \frac{1}{2}\gamma q(t) \tag{3.22a}$$

$$\frac{d}{dt}p(t) = -\omega_0 q(t) - \frac{1}{2}\gamma p(t) - 2[E(t) + g(U(t) + V(t))] \tag{3.22b}$$

$$\frac{d}{dt} n_{\rm Ph}(t) = -[E(t) + g(U(t) + V(t))] p(t) - \gamma [n_{\rm Ph}(t) - n(\omega_0)] \eqno(3.22c)$$

$$\frac{d}{dt}u_k(t) = 2gq(t)y_k'w_k(t) - \gamma_s[u_k(t) - 3n(\omega_k)] \tag{3.22d} \label{eq:3.22d}$$

$$\frac{d}{dt}v_k(t) = -2[\omega_k + gy_kq(t)]w_k(t) - \gamma_s v_k(t) \eqno(3.22e)$$

$$\frac{d}{dt}w_k(t) = 2[\omega_k + gy_kq(t)]v_k(t) + 2gq(t)y_k'\left[u_k(t) + \frac{3}{2}\right] - \gamma_s w_k(t) \ . \tag{3.22f}$$

Diese Bewegungsgleichungen können nun mit einem beliebigem numerischen Löser für Differentialgleichungen für verschiedene Systemparameter gelöst werden. Im Falle dieser Arbeit wird dafür der in Abschnitt 2.8 erwähnte Runge-Kutta Algorithmus 4. Ordnung für gekoppelte Bewegungsgleichungen verwendet.

Dabei wird eine feste Schrittweite von  $\Delta t = 0.001/J$  und eine Systemgröße von N = 2000 gewählt. In den meisten Fällen wird der Algorithmus bis t = 2000/J laufen gelassen, wobei ab  $t \approx 1000/J$  angefangen wird die Mittelwerte der betrachteten Größen zu bilden. Der genaue Zeitpunkt wird dabei so festgelegt, dass der Zeitraum, über welchen gemittelt wird, ein ganzzahliges Vielfaches von  $\frac{1}{\omega}$  ist, um den Mittelwert möglichst akurat zu bestimmen. Eine Ausnahme bilden die Daten aus Abbildung 4.8, wo der Algorithmus bis t = 20000/J mit einer Mittelung ab  $t \approx 5000$  laufen gelassen wird, um eine bessere Auflösung der mittleren Phononauslenkung zu erzielen. Dabei werden im Falle der gemittelten Daten in Abhängigkeit eines Parameters je zwischen 40 und 320 Werte für diesen Parameter (je nach benötigter Auflösung) betrachtet, wobei so parallelisiert wird, dass pro 40 Werten des Parameters je ein Knoten a 40 Kernen genutzt werden kann. Die Laufzeit für t bis t = 2000 beträgt ungefähr 40min, die für t bis t = 20000 entsprechend das 10-fache.

#### 3.2.3 Das Spinband

Die Dispersionsrelation (3.12b) spannt das Band des Systems auf. Dieses reicht, wie in Abbildung 3.2(a) zu sehen, von  $\omega_{\min} = \omega_{k=0} = 1/\sqrt{2}$  bis  $\omega_{\max} = \omega_{k=\pi} = \sqrt{3/2}$ . In Abbildung 3.2(b) ist die dazugehörige Zustandsdichte DOS( $\omega_k$ ) nach (2.52) zu sehen, welche durch die Form der Dispersion Wurzeldivergenzen beziehungsweise van Hove Singularitäten an den Bandkanten aufweist. Da je ein Phonon an ein paar von Triplonen koppelt und seine Energie somit gleichmäßig auf diese aufteilt, gilt die Resonanzbedingung

$$\omega = 2\omega_k \ . \tag{3.23}$$

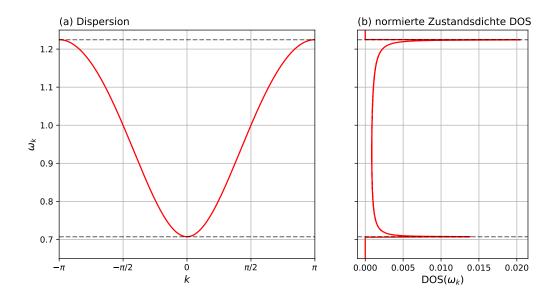


Abbildung 3.2: (a) zeigt die Dispersion des Systems, (b) die dazugehörige, normierte Zustandsdichte  $DOS(\omega_k)$ . Die gestrichelten grauen Linien kennzeichnen die Bandkanten bei  $1/\sqrt{2}$  und  $\sqrt{3/2}$ 

Daher erstreckt sich das Spinband in Abhängigkeit der Laserfrequenz  $\omega$  von  $\omega=2\omega_{\min}=\sqrt{2}$  bis  $\omega=2\omega_{\max}=\sqrt{6}$ . Dieser Bereich wird im Weiteren auch als Spinband oder einfach nur Band bezeichnet. Bei Frequenzen von  $\omega_{\min}$  bis  $\omega_{\max}$  sind ebenfalls Reaktionen auf das Treiben zu verzeichnen. Hierbei handelt es sich um die zweite harmonische Anregung des Bandes [2, 51] durch den Laser, daher wird dieser Bereich auch zweites harmonisches Band genannt. Höhere harmonische Schwingungen sind ebenfalls möglich genauso wie Reaktionen der Triplonen für  $2\omega_k \neq n\omega_0$  mit  $n \in \mathbb{N}$ . Diese Effekte sind lediglich weniger stark als die Hauptresonanz nach Gleichung (3.23) im Spinband.

## 3.3 Das J'-Modell

Wie zuvor erwähnt, gibt es neben dem J-Modell auch das J'-Modell, welches die Wechselwirkung des Phonons mit der Kopplung J' benachbarter Spins aus verschiedenen Dimeren betrachtet. Dazu werden im Spin-Phononkopplungsterm (3.5) die Spinoperatoren zweier Spins in einem Dimer  $\vec{S}_{1,j}\vec{S}_{2,j}$  gegen benachbarte Spinoperatoren verschiedener Dimere  $\vec{S}_{2,j}\vec{S}_{1,j+1}$  ausgetauscht. Der Spin-Phononkopplungsterm lautet nun

$$H_{\rm SP} = g' \sum_{j} (b_j^{\dagger} + b_j) \vec{S}_{2,j} \vec{S}_{1,j+1} \ . \tag{3.24}$$

Dabei ist g' die Spin-Phonokopplung des J'-Modells. Die restlichen Terme des Hamiltonoperators bleiben unverändert. Voll ausgeschrieben lautet der Spin-Phononkopplungsterm

$$H_{\rm SP} = -\sum_{k,\alpha} \frac{g'd}{2\lambda} y_k' (2\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha})$$
(3.25)

wie aus Anhang A hervorgeht. Mit analogem Vorgehen zu dem in Abschnitt 3.2 ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}q(t) = \omega_0 p(t) - \frac{1}{2}\gamma q(t) \tag{3.26a}$$

$$\frac{d}{dt}p(t) = -\omega_0 q(t) - \frac{1}{2}\gamma p(t) - 2[E(t) - \frac{g'}{\lambda}(U'(t) + V'(t))] \eqno(3.26b)$$

$$\frac{d}{dt}n_{\rm Ph}(t) = -[E(t) - \frac{g^{'}}{\lambda}(U^{\prime}(t) + V^{\prime}(t))]p(t) - \gamma[n_{\rm Ph}(t) - n(\omega_{0})] \eqno(3.26c)$$

$$\frac{d}{dt}u_k(t) = -2\frac{g'}{\lambda}q(t)y_k'w_k(t) - \gamma_s[u_k(t) - 3n(\omega_k)] \eqno(3.26\text{d})$$

$$\frac{d}{dt}v_k(t) = -2[\omega_k - \frac{g'}{\lambda}y_k'q(t)]w_k(t) - \gamma_s v_k(t) \eqno(3.26e)$$

$$\frac{d}{dt}w_k(t) = 2[\omega_k - \frac{g'}{\lambda}y_k'q(t)]v_k(t) - 2\frac{g'}{\lambda}q(t)y_k'\left[u_k(t) + \frac{3}{2}\right] - \gamma_s w_k(t) \tag{3.26f}$$

unter Beachtung der Neudefinitionen

$$U'(t) := \sum_{k} y_k' u_k(t) \tag{3.27a}$$

$$V'(t) \coloneqq \sum_{k} y'_k v_k(t) \ . \tag{3.27b}$$

Im Vergleich mit den Bewegungsgleichungen des J-Modells (3.22) gibt es zwei Änderungen. Zum einen wurde jedes g ersetzt durch  $-g'/\lambda$ , die Spin-Phononkopplung hat also effektiv ein Vorzeichen und einen Faktor von  $1/\lambda=2$  bekommen. Zum anderen ist aus einem  $y_k$  in den Gleichungen (3.22e), (3.22f) und (3.19a) für  $v_k(t)$  und  $w_k(t)$  sowie U(t) ein  $y_k'$  in den Gleichungen (3.26e), (3.26f) und (3.27a) geworden. In diesem Kontext ist die Relation

$$y_k - y_k' = \omega_k \tag{3.28}$$

aus Anhang A interessant. Hieraus ist ersichtlich, dass dieser zweite Unterschied der beiden Modelle vor allem innerhalb des Bandes eine Rolle spielt. Die Rechnungen hierzu können im Anhang C eingesehen werden.

# 4 Numerische Ergebnisse

Die Bewegungsgleichungen werden zunächst für ein stationäres Laserfeld der Form

$$E(t) = a_l \cos \omega t \Theta(t) \tag{4.1}$$

gelöst. Das System wird in seinem Grundzustand initialisiert, sprich wir setzen

$$\langle q \rangle (t=0) = 0$$
  $\langle p \rangle (t=0) = 0$   $\langle n_{nh} \rangle (t=0) = 0$  (4.2a)

Zudem wird die gesamte Triplonbesetzung  $n_x$  berechnet über

$$n_x = \frac{1}{N} \sum_k u_k \ . \tag{4.3}$$

Nun kann der zeitliche Verlauf der Observablen bei durchgängigem Treiben betrachtet werden.

## 4.1 Stationäre Nichtgleichgewichtszustände

Zunächst werden die Bewegungsgleichungen des J-Modells einmal für einen beispielhaften Parametersatz

$$\begin{array}{lll} J=1 & J'=0{,}5J & \omega_0=\omega=1{,}5J & g=0{,}1J \\ \gamma=0{,}02\omega_0 & \gamma_s=0{,}01J & a_L=0{,}004\omega_0 \end{array}$$

gelöst. Dieser Parametersatz entspricht den in Abschnitt 3.1 beschriebenen Anforderungen und wird im Weiteren als Standardparametersatz verwendet. Er ermöglicht unter anderem eine gute Vergleichbarkeit mit den Werten aus Ref. [2] und [3]. Für die Numerik wird im Verlauf eine zeitliche Schrittweite von  $\Delta t = 0.001/J$  und eine Systemgröße von N = 2000 Dimeren, wie in Abschnitt 3.2.2 genannt, gewählt.

Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.1 zu sehen. In 4.1(a) und 4.1(b) sind zunächst die Besetzungen der Phononmode  $n_{\rm Ph}(t)$  und die kollektive Besetzung der Triplonmoden  $n_x(t)$  abgebildet. Beide zeigen ein Verhalten auf zwei verschiedenen Zeitskalen. Die schnellere Zeitskala entspricht einer Schwingung geringer Amplitude in Resonanz zum Laser nach der Resonanzbedingung (3.23). Im Konkreten bedeutet das für die Triplonbesetzung  $n_x(t)$  eine Frequenz von  $2\omega_0$  und für das Phononsystem eine Frequenz von  $\omega_0$ , wie es auch der Abbildung zu entnehmen ist. Auf der langsameren Zeitskala schwingt sich der Mittelwert der schnellen Oszillation ein. Dieser Einschwingvorgang dauert hier bis  $t \approx 950/J$  an.

Während des Einschwingvorgangs weist die Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$  interessanterweise einen Überschwinger auf. Eine qualitative Begründung kann sein, dass sie gegen eine Phononbesetzung

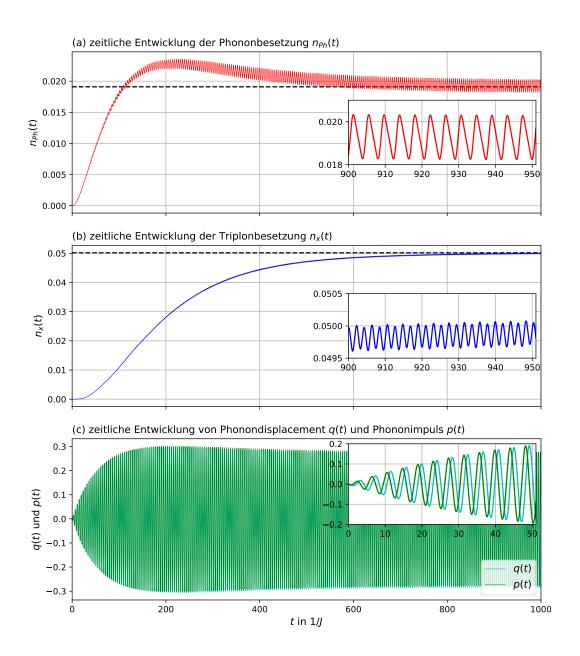


Abbildung 4.1: Zeitlicher Verlauf der Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$  in (a), der Triplonbesetzung  $n_x(t)$  in (b) und der Phononauslenkung q(t) sowie des Phononimpulses p(t) in (c). Die gewählten Parameter sind  $J'=0.5J,\ g=0.1J,\ \omega=\omega_0=1.5J,\ \gamma=0.02\omega_0,\ \gamma_s=0.01J$  und  $a_l=0.004\omega_0$ . Dabei wird J in der Numerik auf J=1 gesetzt. Dies sind die Standardparameter, welche immer genutzt werden, solange keine anderen Werte angegeben sind. Ebenfalls gilt  $\omega=\omega_0$ , solange nicht anders erwähnt. Die gestrichelten schwarzen Linien in (a) und (b) entsprechen dem Mittelwert des sogenannten NESS.

von 4% strebt, wie sie im ungekoppelten System g=0 vorliegt. Dabei wird sie jedoch von dem Spinsystem, in welches die Energie abfließen kann, ausgebremst. Die Menge der abfließenden Energie ist proportional zu g(U(t)+V(t)) (siehe Gleichung (3.22b), (3.22c)) und somit stark abhängig von der Aktivität des Spinsystem. Diese wiederum ist, wie in Abbildung 4.1(b) zu sehen, zu Beginn noch sehr gering und erlaubt dem Phonon somit diesen Überschwinger. Eine quantitative Analyse des Verhaltens während des Einschwingvorgangs ist in Kapitel V in Ref [2] zu sehen.

Nach dem Einschwingvorgang bleibt lediglich die schnelle Oszillation kleiner Amplitude um einen verhälnismäßig großen, konstanten Mittelwert  $n_{\rm Ph0}$  beziehungsweise  $n_{x0}$  übrig. Es handelt sich hier dementsprechend um einen stationären Zustand. Da dieser stationäre Zustand aus dem Gleichgewicht des Systems  $n_{\rm Ph}=n_x=0$  ausgelenkt ist, wird er auch stationärer Nichtgleichgewichtszustand (NESS aus dem eng.: Non Equilibrium Steady State) genannt. Solange das System mit dem stationären Laserfeld aus Gleichung (4.1) getrieben wird, werden im Weiteren ausschließlich die Mittelwerte verschiedener NESS miteinander verglichen.

In Abbildung 4.1(c) sind zudem noch die zugehörige Phononauslenkung q(t) und der zugehörige Phononimpuls p(t) abgebildet. Im Falle dieser Größen wird die Dynamik von der schnellen Oszillation des Laserfelds dominiert. Die langsamere Änderung des Mittelwerts dieser Schwingung ist auch hier vorhanden, jedoch wesentlich weniger signifikant ausgeprägt. Dennoch ist auch die mittlere Phononauslenkung  $q_0$ , sprich der Mittelwert der Phononauslenkung nach dem Einschwingvorgang, von entscheidender Bedeutung für das System. Aufgrund der verhälnismäßig großen Amplitude der Schwingung muss in diesem Fall über einen längeren Zeitraum gemittelt werden (siehe Abschnitt 3.2.2). Die mittlere Phononauslenkung  $q_0$  sorgt für eine effektive Verschiebung des Spinbandes um  $gy_kq_0$ . Dies ist in den Bewegungsgleichungen (3.22e) und (3.22f) zu sehen und wird vor allem im Bereich größerer q noch eine Rolle spielen. Der Phononimpuls p(t) entspricht der Phononauslenkung q(t) mit einer relativen Phase von  $\pi/2$ .

# 4.2 Ergebnisse zum *J*-Modell

In diesem Abschnitt wird ein Überblick über das Verhalten des J-Modells im Bereich schwacher Spin-Phonon Kopplung g<0.1J nach den Ergebnissen aus Ref. [2] geschaffen. Dies dient der besseren Einordnung späterer Ergebnisse. Dazu ist in Abbildung 4.2 das Verhalten von  $n_{\rm Ph0}$  und  $n_{x0}$  für verschiedene Laser- und Phononfrequenzen  $\omega_0$  zu sehen. Für ein Phonon, welches nicht oder nur sehr wenig, mit dem Spinsystem wechselwirkt, liegt der Wert der mittleren Phononbesetzung bei  $n_{\rm Ph0}=(a_l/\gamma)^2=0.04$  und der Wert der mittleren Triplonbesetzung bei  $n_{x0}\approx 0$ . Wie in dieser Abbildung zu erkennen, ist daher vor allem der Bereich zwischen  $\sqrt{2}J$  und  $\sqrt{6}J$  interessant, in welchem das nicht der Fall ist. Wie in Abschnitt 3.2.3 zu sehen, handelt es sich bei diesem Bereich um das Spinband. Am Rand dieses Bereiches lassen sich die erwähnten Wurzeldivergenzen erkennen. Für  $\omega_0=2$ , sprich  $k=\pm\pi/2$ , ist die Antwort des Spinsystems stark unterdrückt beziehungsweise ausgelöscht. Der Faktor  $y_k'$ , welcher im Hamiltonoperator (3.14) vor dem Austauschterm  $t_k^\dagger t_{-k}^\dagger + t_k t_{-k}$  steht, verschwindet an dieser Stelle, wodurch das Spin- und das Phononsystem hier nicht wechselwirken.

In Abbildung 4.3 ist das Verhalten der mittleren Triplonbesetzung  $n_{x0}$  bei Änderung der Spin-Phonon Kopplung g für fünf verschiedene Anregungsfrequenzen  $\omega_0$  zu sehen. Die Anregungsfrequenz  $\omega_0 = 1,0J$  liegt dabei klar unterhalb der unteren Bandkante,  $\omega_0 = 1,5J$  knapp oberhalb dieser und somit im Band. Die Anregungsfrequenz  $\omega_0 = 2,0J$  ist wie bereits erwähnt die Frequenz

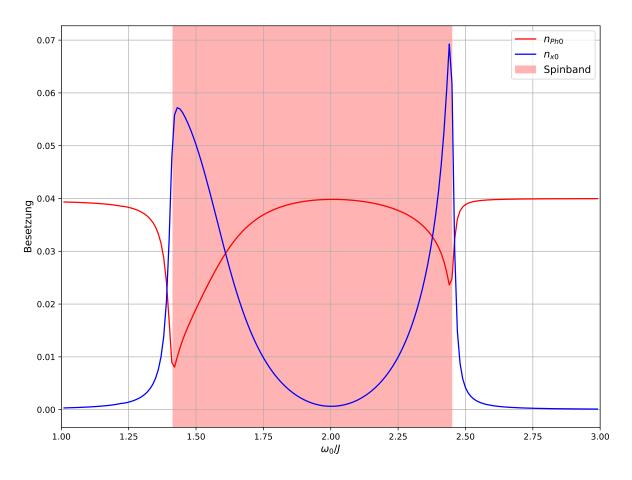


Abbildung 4.2: Entwicklung der mittleren Phononbesetzung  $n_{\mathrm{Ph0}}$  und der mittleren Triplonbesetzung  $n_{x0}$  für verschiedene Anregungsfrequenzen  $\omega_0$ . Die restlichen Parameter entsprechen den Standardparametern. Das Spinband  $2\omega_k$  ist in rot hinterlegt.

in der Bandmitte, an der  $y_k'=0$  gilt und somit die Triplonpaarerzeugung unterdrückt wird. Die beiden Anregungsfrequenzen  $\omega_0=2.5J$  und  $\omega_0=3.0J$  liegen überhalb der oberen Bandkante,  $\omega_0=2.5J$  ist dieser jedoch sehr nahe. Für kleine g ist, durch die doppelt logarithmische Darstellung, deutlich ein Zusammenhang der Form  $n_{x0}\propto g^2$  erkennbar. Die Frequenzen nahe der Bandkante weisen dabei wie zu erwarten die höchste Triplonbesetzungen auf. Danach folgt die Triplonbesetzung in der Bandmitte. Ab  $g\approx 0.08J$  treten erste Abweichungen von dem  $g^2$ -Verhalten auf. Ab hier beginnt der Bereich starker Spin-Phonon Kopplung, wobei die Abweichungen bis g=0.1J noch sehr gering sind. Daher kann auch g=0.1J näherungsweise noch als Referenzwert für schwache Spin-Phononkopplung angesehen werden. Für g>0.1J wird die Triplonbesetzung für die verschiedenen Anregungsfrequenzen nach und nach signifikant unterdrückt. Dieser Effekt wird in Abschnitt 4.4 eine entscheidende Rolle spielen.

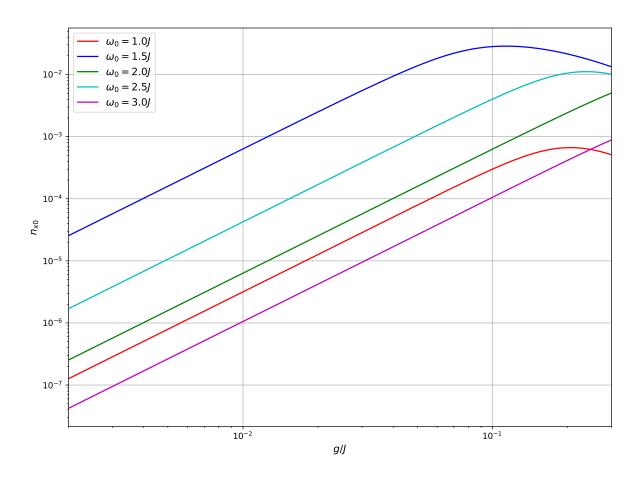


Abbildung 4.3: Entwicklung der mittleren Triplonbesetzung  $n_{x0}$  mit steigender Spin-Phononkopplung g. Diese ist für verschiedene Anregungsfrequenzen  $\omega_0$  innerhalb und außerhalb des Spinbandes doppellogarithmisch aufgetragen.

Des Weiteren ist in Abbildung 4.4 das Verhalten von  $n_{x0}$  unter Änderung der Laseramplitude  $a_l$  für dieselben fünf Frequenzen zu sehen. Auch hier ist für kleine Laseramplituden eine Abhängigkeit der Form  $n_{x0} \propto (a_l/\gamma)^2$  zu sehen. Für größere  $a_l$  gibt es jedoch sichtbare Abweichungen. Das Verhältnis der  $n_{x0}$  für die verschiedenen Anregungsfrequenzen stimmt ebenfalls mit dem aus Abbildung 4.3 überein. Die Parameter g und  $a_l$  können also im Bereich kleiner Spin-Phononkopplung und schwacher Laseramplituden vollständig analog betrachtet werden. Die

Autoren von Ref. [2] führen daher einen effektiven Anregungsparameter

$$D = \frac{ga}{\gamma J} \tag{4.4}$$

für diesen Bereich ein und führen auf dessen Basis ausführliche Analysen des schwach angeregten Spinsystems durch. Diese Arbeit geht daher nicht weiter auf diesen Bereich des J-Modells ein.

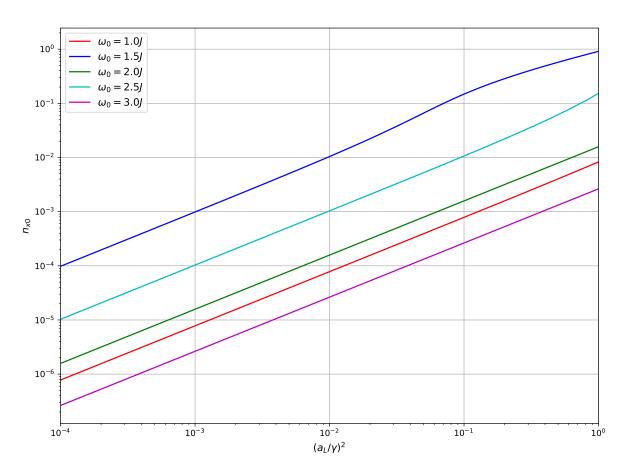


Abbildung 4.4: Entwicklung der mittleren Triplonbesetzung  $n_{x0}$  mit steigender Laseramplitude  $a_l$ . Da die Anregung des Phonons durch den Laser dessen Dämpfung  $\gamma$  direkt entgegen wirkt, wird  $a_l$  in Einheiten von  $\gamma$  angegeben. Dabei bleibt  $\gamma$  selber bei  $\gamma = 0.02\omega_0$ .

# 4.3 Ergebnisse zum $J^{'}$ -Modell

Neben dem J-Modell, bei welchem die Phononen an die Spins eines Dimers koppeln, wird nun im J'-Modell die Kopplung der Phononen an die Spins benachbarter Dimere betrachtet. Im Rahmen dieser Arbeit geschieht dies zum Einen um zu rechtfertigen, dass im Weiteren überwiegend die Effekte des J-Modells betrachtet werden, zum Anderen um zu argumentieren, warum der  $t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}$ -Term der Spin-Phononkopplung des J-Modells (3.14) in einer späteren Rechnung vernachlässigt wird. Eine ausführlichere Betrachtung des J'-Modells kann in der Dissertation von Mohsen Yarmohammadi [51] eingesehen werden. Da die Bewegungsgleichungen

beider Modelle sehr ähnlich sind, wie bereits in Abschnitt 3.3 dargestellt, bietet sich ein direkter Vergleich mit den bisherigen Ergebnissen des J-Modells an. Aufgrund des relativen Faktors  $-1/\lambda$  in der Spin-Phononkopplung beider Modelle wird die Spin-Phonokopplung g' des J'-Modells immer auf  $g\lambda$  gesetzt. Dies entspricht der gleichen relativen Spin-Phononkopplungsstärke beider Modelle im Verhältnis zu ihrer jeweiligen Spinkopplung

$$\frac{g'}{J'} = \frac{g}{J} \Leftrightarrow g' = g\frac{J'}{J} = g\lambda . \tag{4.5}$$

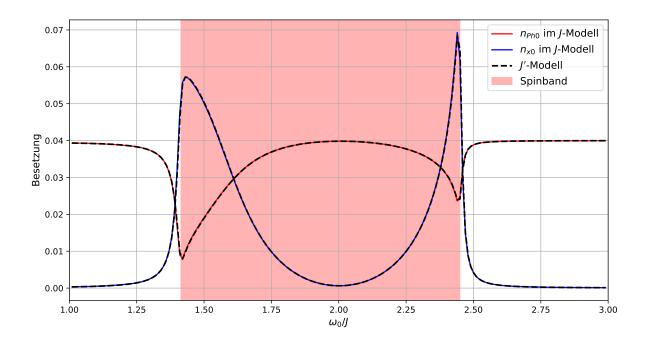
Diese Reskalierung kann jedoch nur auf die Paarerzeuger- und Paarvernichterbeiträge der Spin-Phononkopplung des J'-Modells (3.25) bezogen werden. Der  $t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}$ -Term wird im J'-Modell durch den Übergang  $y_k \to y_k'$  der Bewegungsgleichungen (3.14) aus dem J-Modell zu den Bewegungsgleichungen (3.25) im J' Modell stark unterdrückt.

Zunächst wird das Verhalten des J'-Modells in Abhängigkeit der Anregungsfrequenz untersucht. In Abbildung 4.5 ist dies für die Standardparameter im J-Modell und g'=0.05J abgebildet, in Abbildung 4.6 für die Standardparameter im J'-Modell und g=0.2J. In beiden Fällen ist zu sehen, dass die Ergebnisse der Modelle nahezu übereinstimmen. Der größte Unterschied besteht an der oberen Kante des zweiten harmonischen Bandes für  $\omega_0=1/\sqrt{2}J$  in Abbildung 4.6, an welcher das J-Modell eine deutliche Reaktion zeigt, das J'-Modell jedoch nicht. Für noch größere g beziehungsweise g' wird auch das J'-Modell eine solche Reaktion an dieser Stelle zeigen, jedoch mit wesentlich geringerer Amplitude, wie in der erwähnten Dissertation [51] zu sehen ist. Da diese Arbeit mehr an der Reaktion im Spinband interessiert ist, wird hier nicht weiter darauf eingegangen. Ansonsten sind noch leichte Abweichungen in der Nähe der Bandkanten des Spinbandes zu sehen, diese sind jedoch erstmal vernachlässigbar gering.

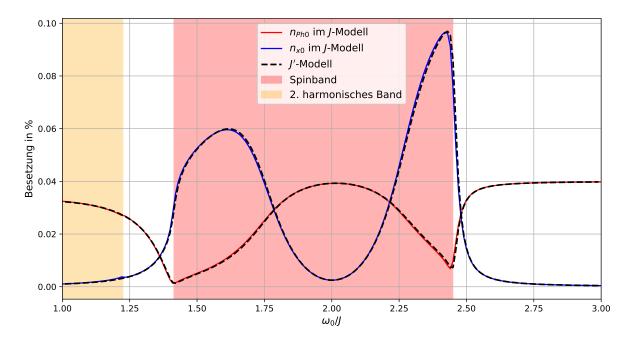
In Abbildung 4.7 wird zudem noch einmal die  $a_l$ -Abhängigkeit der mittleren Triplonbesetzung  $n_{x0}$  aus Abbildung 4.4 mit der  $a_l$ -Abhängigkeit des J'-Modells verglichen. Auch hier ist eine sehr gute Übereinstimmung beider Modelle sichtbar. Lediglich für sehr große Laseramplituden  $(a_l/\gamma)^2>0.4$  treten hier nennenswerte Abweichungen auf. Der verwendete Standardwert ist mit  $a_l=0.2\gamma$  jedoch eine Größenordnung kleiner und somit unproblematisch.

Das Verhalten des J- und des J'-Modells ist in diesem Rahmen also, unter Beachtung von g'=g/2, fast identisch und weißt nur geringfügige, quantitative Abweichungen auf. Daher wird im Verlauf dieser Arbeit der Fokus vollständig auf das J-Modell gelegt. Der erwähnte Übergang  $y_k \to y_k'$  scheint dementsprechend nur einen sehr geringen Einfluss zu haben. Aus diesem Grund ist davon auszugehen, dass der  $t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}$ -Term der Spin-Phononkopplung in nachgehenden Rechnungen sowohl im J'-Modell als auch im J-Modell vernachlässigt werden darf.

In Ref. [51] ist zu sehen, dass ein durchaus nennenswerter Unterschied in der Verschiebung resonanter Moden für größere Werte von g zwischen dem J-Modell und dem J'-Modell besteht. Dies wird im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter behandelt. Es kann jedoch für weitere Forschung von Interesse sein, beide Modelle genauer zu betrachten und möglicherweise ein Hybridmodell in Betracht zu ziehen.



**Abbildung 4.5:** Die mittlere Phononbesetzung  $n_{\rm Ph0}$  in rot und die mittlere Triplonbesetzung  $n_{x0}$  in blau in Abhängigkeit der Standardparameter für das J-Modell. Die ensprechenden Besetzungen mit g'=g/2 im J'-Modell sind mit den schwarz gestrichelten Linien dargestellt. Das Spinband ist rot hinterlegt.



**Abbildung 4.6:** Wie in Abbildung 4.5 nur für g = 0.2J und g' = 0.1J. Zudem ist nun auch das zweite harmonische Band gekennzeichnet, da das J-Modell hier eine Reaktion an dessen Kante zeigt.

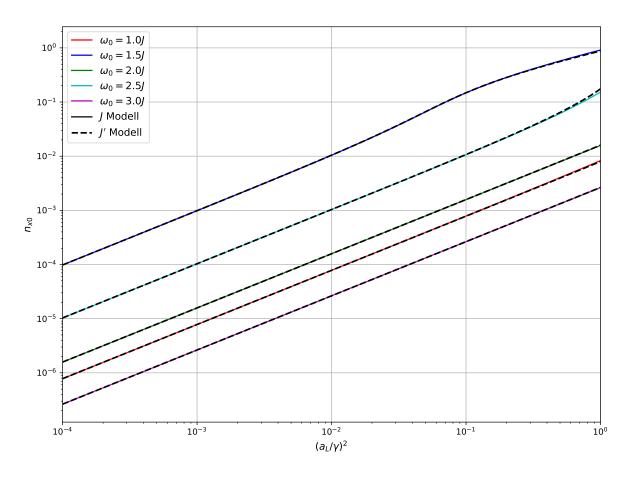


Abbildung 4.7: Die mittlere Triplonbesetzung  $n_{x0}$  in Abhängigkeit der Laseramplitude  $a_l$  für verschiedene Anregungsfrequenzen  $\omega_0$  des J-Modells ist durch durchgezogene farbige Linien dargestellt. Die entsprechenden  $a_l$ -Abhängigkeiten des J'-Modells sind je durch die gestrichelten schwarzen Linien gekennzeichnet.

## 4.4 Starke Spin-Phononkopplung und die resonante Riesenselbstblockade

In diesem Abschnitt wird weiter das J-Modell betrachtet, im Bereich der starken Spin-Phononkopplung g. Die Ergebnisse davon sind in Abhängigkeit der Anregungsfrequenz  $\omega_0$  in Abbildung 4.8 zu sehen.

In Abbildung 4.8(a) ist zunächst die mittlere Phononbesetzung  $n_{\rm Ph0}$  zu sehen. Für g=0.1J liegt die mittlere Phononbesetzung für die meisten Anregungsfrequenzen noch bei  $n_{\rm Ph0}=0.04$  und nimmt lediglich an den Ränder des Spinbandes leicht ab. Bei genauem Hinschauen ist zudem noch ein geringer Peak an der unteren Kante des zweiten harmonischen Bandes zu sehen. Für größere g kann, vor allem an den Kanten des Spinbandes, mehr Energie in das Spinsystem abfließen, daher werden die Abweichungen von  $n_{\rm Ph0}=0.04$  hier nach und nach größer. Für hohe g verbleibt im Inneren des Spinbandes lediglich ein kleiner Bereich in der Bandmitte bei  $n_{\rm Ph0}=0.04$ . Dies ist der Bereich, wo der Vorfaktor der Paarerzeuger  $y_k'$ , wie in Abschnitt 4.2 erwähnt, verschwindet. Auch die Flanken am Außenrand des Spinbandes sowie die Reaktion an der unteren Bandkante des zweiten harmonischen Bandes werden für größere g stärker ausgeprägt. Zudem geht für größere g auch unterhalb des Spinbandes ein Teil der Anregung des Phonons durch Anregungen höherer Ordnung auf das Spinsystem über. Im Bereich überhalb des Spinbandes ist dies, im sogenannten Floquet Grenzfall [10], nicht der Fall.

In Abbildung 4.8(b) ist die entsprechende mittlere Triplondichte  $n_{x0}$  zu sehen. Generell lässt sich sagen, dass ein in Abbildung 4.8(a) geringeres  $n_{\rm Ph0}$  meist ein entsprechend höheres  $n_{x0}$  bedeutet, da die Energie an diesen Stellen aus dem Phononsystem in das Spinsystem überführt wird. Für g=0,1J lassen sich die Effekte der Wurzeldivergenzen an den Bandkanten gut erkennen und auch an der Unterkante des zweiten harmonischen Bandes ist ein Anstieg der Triplonbesetzung zu erkennen. Für größere g zeigt sich allerdings eine eher unerwartete Reaktion der Triplonbesetzung an den Bandkanten. Die üblichen Wurzeldivergenzen werden hier stark unterdrückt, die Triplonbesetzung erreicht ihr Maximum erst weiter innen im Band. Dieser Effekt steigt mit größeren g an. Eine mögliche Begründung lässt sich in dem E(t)+g(U(t)+V(t))-Term in den Bewegungsgleichungen (3.22b) und (3.22c) finden. An den Bandkanten hat der g(U(t)+V(t))-Term relativ zu E(t) eine Phase von  $\approx \pi$  und somit ein effektives Vorzeichen. Die erhöhte Triplonbesetzung blockiert also das weitere Treiben mit dem Laser. Dieser Effekt wird in dieser Form zum ersten Mal in Ref. [3] festgestellt und besprochen und wird resonante Riesenselbstblockade (aus dem eng.: Giant Resonant Self-Blocking) genannt.

In Abbildung 4.8(c) ist zudem noch das dazugehörige mittlere Phonondisplacement  $q_0$  angegeben. Vor allem für große g weist dieses im Spinband endliche Werte auf und sorgt für eine effektive Verschiebung von  $J \to J + gq_0$ . Dies bedeutet, dass das Resonanzverhalten des Systems sich für große g verändert. Aus diesem Grund wird nun der Fall  $\omega \neq \omega_0$  betrachtet und das Verhalten des Systems für feste Phononfrequenzen  $\omega_0$  in Abhängigkeit der Laserfrequenz  $\omega$  analysiert.

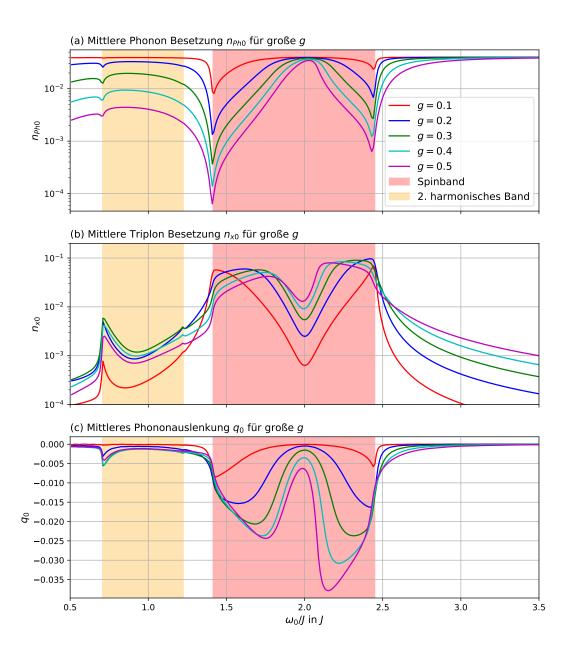


Abbildung 4.8: Observablen des Systems in Abhängigkeit der Anregungsfrequenz  $\omega_0$  für verschiedene, starke Spin-Phononkopplungen g. Die restlichen Parameter entsprechen weiterhin den Standardparametern. In Orange ist das zweite harmonische Band hinterlegt, in dunklerem Rot das Spinband. In (a) ist die mittlere Phononbesetzung  $n_{\rm Ph0}$  zu sehen, in (b) die mittlere Triplonbesetzung  $n_{x0}$  und in (c) die mittlere Phononauslenkung  $q_0$ .

## 4.4.1 Das Phonon-Bitriplon

In diesem Abschnitt wird das Resonanzverhalten des Systems im Bereich der unteren Bandkante für die Phononfrequenzen  $\omega_0=1,35J$  (knapp unterhalb des Bandes) und  $\omega_0=1,45J$  (knapp überhalb der unteren Bandkante) für verschiedene g betrachtet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.9 zu sehen. Alle  $n_{\rm Ph0}$  und  $n_{x0}$  weisen je zwei Resonanzpeaks auf. Für kleine g liegen diese an der Phononfrequenz und an der unteren Bandkante. Für größer werdende g werden die Peaks von dem Bereich zwischen Bandkante und Phononmode weggeschoben.

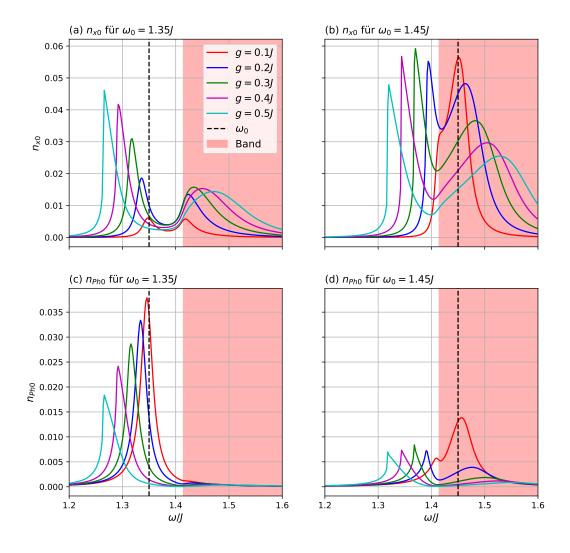
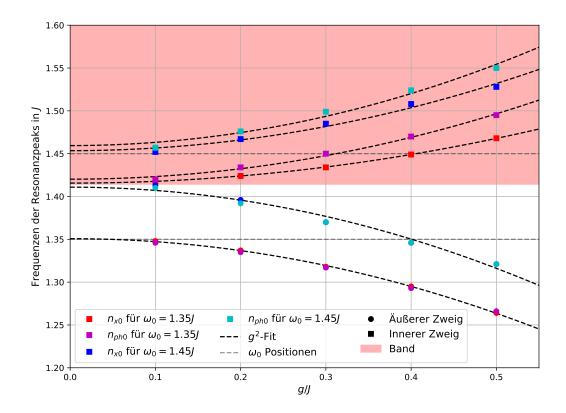


Abbildung 4.9: Besetzung des Systems in Abhängigkeit der Laserfrequenz für verschiedene Phononmoden und Spin-Phononkopplungen. In (a) die Triplonbesetzung  $n_{x0}$  für  $\omega_0=1{,}35J$  mit der zugehörigen Phononbesetzung  $n_{\rm Ph0}$  in (c). In (b) beziehungsweise (d) sind die Triplonbesetzung beziehungsweise Phononbesetzung für  $\omega_0=1{,}45J$  zu sehen. Das Spinband ist je in rot hervorgehoben, die jeweilige Phononmode durch eine gestrichelte, schwarze Linie gekennzeichnet.



**Abbildung 4.10:** Positionen der Resonanzpeaks aus Abbildung 4.9 in Abhängigkeit der Spin-Phononkopplung g. Das Spinband ist jeweils in rot hervorgehoben, die Phononmoden durch gestrichelte, graue Linien gekennzeichnet. Zudem sind 'least-square'-Fits der Form  $ag^2 + b$  für die verschiedenen Zweige vorgenommen worden, um deren quadratische Abhängigkeit hervorzuheben. Diese Fits sind durch schwarz gestrichelte Linien gekennzeichnet.

Die Positionen dieser Resonanzpeaks in Abhängigkeit von g sind in Abbildung 4.10 zu sehen. Sie unterteilen sich pro Phononfrequenz  $\omega_0$  in zwei innere Zweige und einen äußeren Zweig. Es lässt sich anhand der  $ag^2 + b$ -Fits erkennen, dass die Verschiebung der Moden von ihren ursprünglichen Positionen quadratisch in g ist. Bei diesen Moden handelt es sich um Hybride aus der Mode des Phonons und denen der beiden Triplonen, an welches das Phonon koppelt. Diese Hybridmode wurde in Ref. [3] Phonon-Bitriplon getauft.

## 4.5 Das gepulste System

Ein wichtiger Teil dieser Arbeit ist das Treiben mit Gaußpulsen

$$E(t) = a_l \cos(\omega t) e^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma^2}}.$$
(4.6)

Bei der numerischen Simulation wird angenommen, dass die Gaußkurve außerhalb der  $3\sigma$ -Umgebung vernachlässigbar gering ist, sodass ein Puls von  $\mu - 3\sigma$  bis  $\mu + 3\sigma$  geht und dementsprechend eine Länge von  $6\sigma$  hat. Für einen einzelnen Puls gilt zunächst  $\mu = 3\sigma$ , sodass der Puls vollständig auf der positiven Zeitachse liegt. Außerhalb dieses Bereichs wird der Puls abgeschnitten. Ein solcher Puls ist nun für  $\sigma = 5/J$  beispielhaft in Abbildung 4.11(a) abgebildet. Dies ist der Standardwert für  $\sigma$ , falls nichts anderes angegeben ist. Die anderen Standardparameter bleiben, abgesehen von g, gleich

$$J = 1$$
  $J' = 0.5$   $\omega_0 = \omega = 1.5J$   $q = 0.5J$  (4.7a)

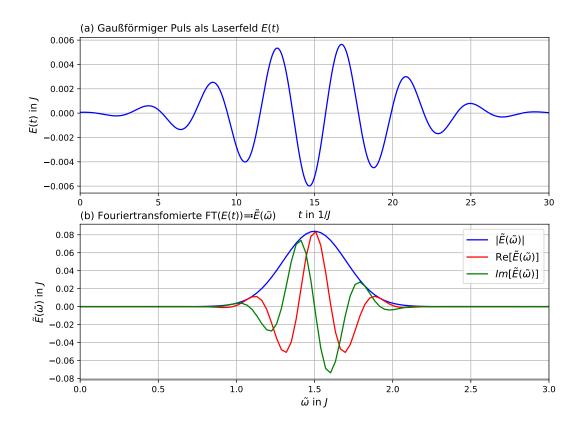
$$J = 1 \qquad \qquad J' = 0.5 \qquad \qquad \omega_0 = \omega = 1.5 J \qquad \qquad g = 0.5 J \qquad (4.7a)$$
 
$$\gamma = 0.02 \omega_0 \qquad \qquad \gamma_s = 0.01 J \qquad \qquad a_l = 0.004 \omega_0 \qquad \qquad \sigma = 5/J \; . \qquad (4.7b)$$

In Abbildung 4.11(b) ist zudem die Fouriertransformierte von E(t) zu sehen. Zwar wird hier wieder resonantes Treiben  $\omega = \omega_0$  angenommen, doch Aufgrund der Gaußform des Pulses wird hier nicht nur die Laserfrequenz  $\omega$  angeregt, sondern ein breiteres Frequenzband um  $\omega$  herum. Gerade für höhere Werte von q bedeutet das, dass ein selektives Treiben einzelner Frequenzen so nur bedingt möglich ist. Dieses Band wird breiter, je kürzer der Puls ist.

In Abbildung 4.12 ist der Vergleich zwischen der Reaktion des Systems auf den Laserpuls und der Reaktion des Systems auf das stationäre Treiben mit den Standardparametern (4.7) zu sehen. In beiden Systemen ist zunächst eine schnelle, zum Laser resonante Schwingung zu sehen, welche für das stationär getriebene System höhere Amplituden erreicht. Dies ist zu erwarten, da im Falle des stationären Treibens diese Frequenz über einen wesentlich längeren Zeitraum in das System eingespeist wird.

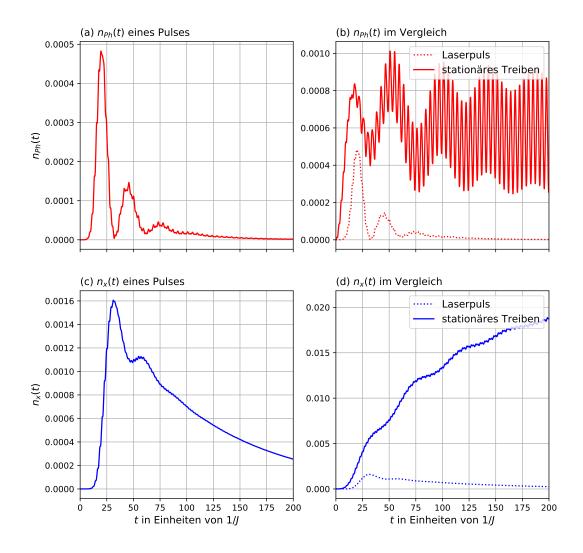
Zudem ist für beide Systeme eine langsamere Oszillation festzustellen, welche auf einer ähnlichen Zeitskala stattfindet. Zum Einen ist eine Oszillation während des Einschwingvorgangs des NESS für stationäres Treiben zu sehen, zum Anderen eine langsame Oszillation zu Beginn der Relaxation des gepulsten Systems. Diese Oszillation ist in beiden Fällen für  $n_{\rm Ph}$  und  $n_x$  exakt gegenläufig. Es scheint sich also um eine Art Schwebung zwischen zwei oszillierenden Teilsystemen, sprich dem Phonon- und dem Triplonsystem, zu handeln. Die Frequenz der langsamen Oszillationen im stationär getriebenem System und die Frequenz der langsamen Oszillation im gepulsten System sind nicht dieselben. Es ist daher schwierig zu sagen, ob es sich dabei um denselben Effekt handelt. Aufgrund der verschiedenen Resonanzverhalten des gepulsten und des stationär getriebenen Systems können die dominanten Moden der beiden Systeme leicht verschieden sein. Daher ist es trotz des Frequenzunterschiedes nicht undenkbar, dass es sich hier um denselben Effekt handelt.

Es könnte argumentiert werden, dass die Anregung durch den Puls aufgrund des endlichen Spektrums in Abbildung 4.11 andere Frequenzen als  $\omega = 1.5J$  mit möglicherweise stärkerer Resonanz zulässt, was diesen Frequenzunterschied erklären könnte. In diesem Fall müsste die Frequenz dieser langsame Oszillation im Falle des gepulsten Systems allerdings abhängig vom Spektrum des Pulses und somit von der Pulsdauer sein. Im folgenden Abschnitt wird jedoch gezeigt, dass dies nicht der Fall ist.



**Abbildung 4.11:** In (a) ist ein Puls der Form (4.6) für  $a_l=0.004\omega_0,\,\omega=\omega_0=1.5J$  und  $\sigma=5/J$  zu sehen. In (b) ist die nach Abschnitt 2.8 Fouriertransformierte  $\tilde{E}(\omega)$  als Frequenzpektrum des Pulses zu sehen.

Während das stationär getriebene Systeme für lange Zeiten zu einem NESS konvergiert, relaxiert das gepulste System zurück in den Grundzustand, da ihm nach dem Puls keine weitere Energie mehr hinzugefügt wird. Daher können hier keine mittleren Besetzungen betrachtet werden. Stattdessen muss jeweils der zeitliche Verlauf für verschiedene Parameter analysiert werden.

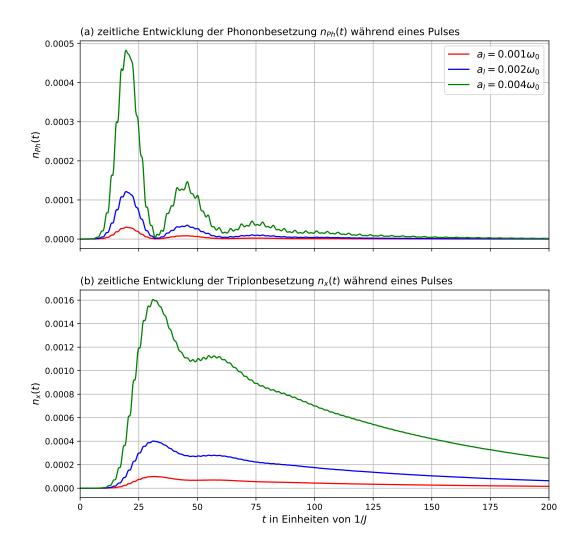


**Abbildung 4.12:** Vergleich zwischen gepulstem System ((a) und (c)) und System mit stationärem Treiben ((b) und (d)). Je die Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$  in rot und die Triplonbesetzung  $n_x(t)$  in blau für die neuen Standardparameter.

#### 4.5.1 Verhalten für einzelne Pulse

In diesem Abschnitt wird das Verhalten des Systems für die jeweilige Änderung einzelner Parameter betrachtet. Begonnen wird in Abbildung 4.13 mit der Änderung der Pulsamplitude. Die reine Form der Reaktion scheint für die verschiedenen  $a_l$  identisch zu sein, einzig die Amplitude

der Reaktion ist verschieden. Sowohl für  $n_{\rm Ph}$  als auch für  $n_x$  lässt sich dabei gut sehen, dass durch Verdopplung der Laseramplitude  $a_l$  ungefähr die vierfache Reaktion des Systems hervorgerufen wird. Die  $a_l^2$ -Abhängigkeit des Systems bleibt demnach weiterhin bestehen



**Abbildung 4.13:** Verhalten des Systems für verschiedene Laseramplituden  $a_l$ . Die restlichen Parameter entsprechen den Standardparametern. In (a) ist die Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$ , in (b) die Triplonbesetzung  $n_x(t)$  zu sehen.

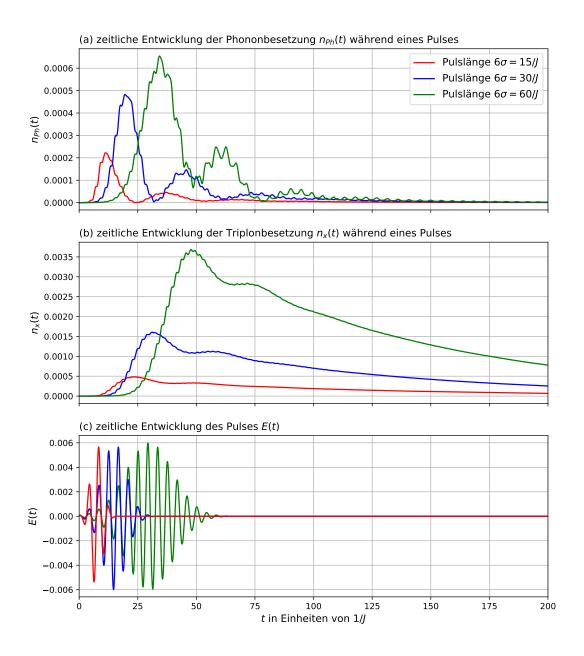
In Abbildung 4.14 ist die Abhängigkeit des Systems von der Pulslänge  $6\sigma$  zu sehen. Für längere Pulse wird, bei gleicher Pulsamplitude  $a_l$ , dem System mehr Energie hinzugefügt, sodass die Reaktion des Systems in  $n_{\rm Ph}$  und  $n_x$  ebenfalls stärker ausfällt. Gerade für lange Pulse zeigt sich in Abbildung 4.14(a), dass neben der schnellen Oszillation eine weitere Oszillation mit der halben Resonanzfrequenz in  $n_{\rm Ph}$  auftritt, welche in Abbildung 4.14(b) für  $n_x$  nicht zu sehen ist. Der Ursprung dieser ist bis auf Weiteres unklar. Die Frequenz der langsamen Oszillation ändert sich

nicht unter Änderung der Pulslänge. Lediglich ein Offset dieser langsamen Oszillation ist für die verschieden langen Pulse zu sehen. Dieses entspricht dem Offset der Pulsmitten  $\mu = 3\sigma$  der jeweils zugehörigen Pulse, wie es in Abbildung 4.14(c) zu sehen ist.

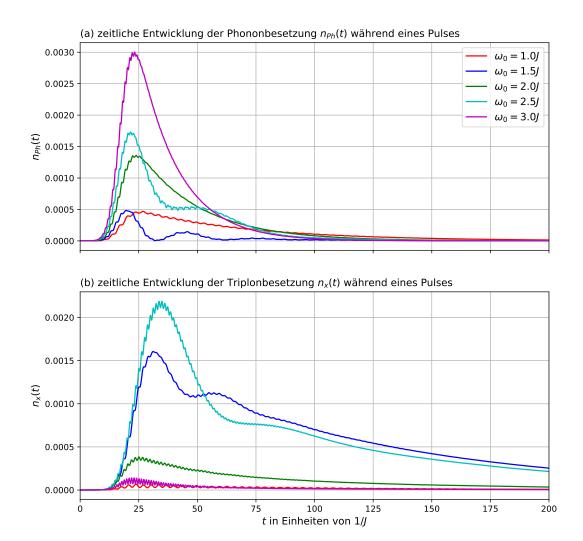
Als letzter Parameter des Laserpulses wird die Laserfrequenz  $\omega$  betrachtet. Dabei handelt es sich hier aufgrund der Resonanz  $\omega_0 = \omega$  zugleich um einen wichtigen Parameter des Spin-Phononsystems. Die Ergebnisse hierzu sind in Abbildung 4.15 zu sehen. Die maximale Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}$  steigt mit zunehmenden  $\omega_0$  an, da die Laseramplitude  $a_l$  über  $\omega_0$  skaliert wird. Die Triplonbesetzung  $n_x$  hingegen ist vor allem für Frequenzen in der Nähe der Bandkanten für  $\omega_0 = 1.5J$  und  $\omega_0 = 2.5J$  sehr groß. Diese beiden Frequenzen sind außerdem die Einzigen, für welche die langsame Oszillation zwischen  $n_{\rm Ph}$  und  $n_x$  während der Relaxationsphase sichtbar ist. An der Stelle  $\omega_0 = 2J$ , wo der Triplonpaarerzeuger unterdrückt wird, und weiter außerhalb des Bandes ist die Reaktion der Triplonen geringer und die langsamen Oszillationen kommen nicht zustande. Die langsamen Oszillationen kommen demnach immer in den Frequenzbereichen zustande, in welchen eine hohe Triplonbesetzung und somit auch eine starke Spin-Phononwechselwirkung auftritt. Dies kann als Indiz dafür gewertet werden, dass die langsamen Oszillationen aus der Spin-Phononwechselwirkung stammen. Die Oszillation für  $\omega_0 = 1.5J$  ist schneller als die für  $\omega_0 = 2.5J$ . Wie genau jedoch die Frequenz dieser Oszillation von  $\omega_0$  abhängt wird in dieser Arbeit nicht weiter untersucht.

Als Nächstes wird die Abhängigkeit des Systems von g in Abbildung 4.16 überprüft. Dieser hat vor allem Einfluss auf die relative Amplitude von  $n_{\rm Ph}$  und  $n_x$  sowie die Frequenz der langsamen Oszillation. Dabei gilt, dass je größer g ist, desto höher ist  $n_x$  gegenüber  $n_{\rm Ph}$  und desto schneller ist die langsame Oszillation. Der erste Effekt ist relativ trivial zu erklären und ist bereits in den Ergebnissen des stationär getriebenen Systems zu finden. Je gößer g ist, desto mehr Energie kann in das Triplonsystem übergehen, bevor sie aufgrund der Dissipation verloren geht. Die Abhängigkeit der langsamen Oszillation hingegen ist weniger trivial. Daher wird die Frequenz der langsamen Oszillationen über den zeitlichen Abstand verschiedener Maxima der Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$  bestimmt und in Abbildung 4.17 für  $\omega_0=1.5J$  und in Abbildung 4.18 für  $\omega_0=2.5J$ in Abhängigkeit der Spin-Phononkopplung aufgetragen. Dabei lässt sich zunächst sehen, dass diese Frequenz zumindest im gepulsten System nicht einfach über die Zeit konstant ist, sondern abhängig davon, welche Maxima gewählt werden. Dennoch ist für die je gleichen Maxima eindeutig ein lineares Verhalten in g zu erkennen. Dies wird durch einen linearen Fit hervorgehoben. Es ist anzumerken, dass auch die Amplitude der langsamen Oszillation abhängig von q ist. Für q < 0.2J sind, abgesehen vom globalen Maximum zu Beginn, keine eindeutigen weiteren Maxima zu erkennen, für q = 0.2J lediglich eins. Daher reichen die Datensätze nicht weiter in Richtung  $g \to 0$ . Wie zu Beginn dieses Abschnitts erwähnt, wird angenommen, dass es sich bei der langsamen Oszillation um eine Art Schwebung intrinsischer Moden des Phonon-Triplonsystems handelt. Daher wird in Abschnitt 5 ein Ansatz zur Analyse der im System vorhandenen Moden vorgenommen. Diese langsame Oszillation wird im Weiteren als Schwebung bezeichnet.

In Abbildung 4.19(a) und 4.19(b) ist zudem noch die Abhängigkeit des Systems von der Phonondämpfung  $\gamma$  sowie in Abbildung 4.19(c) und 4.19(d) die Abhängigkeit von der Triplondämpfung  $\gamma_s$  zu sehen. Beide Dämpfungsparameter scheinen lediglich die Geschwindigkeit des Relaxationsprozesses zu beeinflussen. Dabei sorgt  $\gamma$  vor allem an den Maxima der Schwebung von  $n_{\rm Ph}(t)$  für einen hohen Energieverlust, während  $\gamma_s$  dasselbe an den Maxima von  $n_x(t)$  bewirkt. Einen Einfluss auf die in  $n_{\rm Ph}(t)$  und  $n_x(t)$  vorhandenen Frequenzen haben die Dämpfungsparameter offenbar nicht.



**Abbildung 4.14:** Verhalten des Systems für verschiedene Pulslängen  $6\sigma$ . Die restlichen Parameter entsprechen den Standardparametern. In (a) ist die Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$ , in (b) die Triplonbesetzung  $n_x(t)$  zu sehen. In (c) ist zudem noch einmal der Puls E(t) abgebildet.



**Abbildung 4.15:** Verhalten des Systems für verschiedene Anregungsfrequenzen  $\omega_0$ . Die restlichen Parameter entsprechen den Standardparametern. In (a) ist die Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$ , in (b) die Triplonbesetzung  $n_x(t)$  zu sehen.

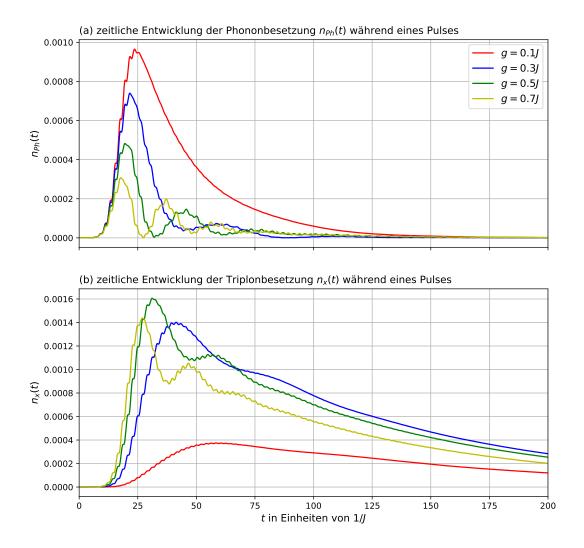


Abbildung 4.16: Verhalten des Systems für verschiedene Spin-Phonon Kopplungen g. Die restlichen Parameter entsprechen den Standardparametern. In (a) ist die Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$ , in (b) die Triplonbesetzung  $n_x(t)$  zu sehen.

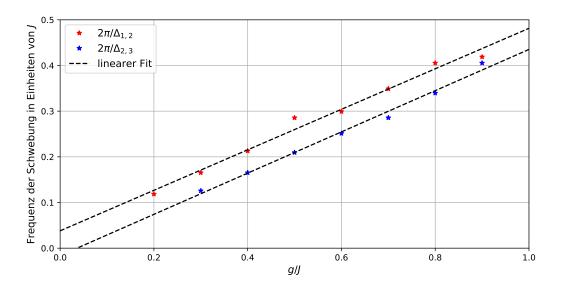


Abbildung 4.17: Kreisfrequenzen der Schwebung aus Abbildung 4.16 gegen g aufgetragen. Die Phononfrequenz beträgt  $\omega_0=1,5J$ . Die restlichen Parameter entsprechen den Standardparametern (4.7). Zur Bestimmung der Frequenz werden die Differenzen der Maxima der Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$ , wie sie in Abbildung 4.16 zu sehen sind, verwendet. Dabei ist  $\Delta_{1,2}$  die Differenz der Positionen des ersten und des zweiten Maximums und  $\Delta_{2,3}$  die Differenz der Positionens des zweiten und des dritten Maximums. Die Kreisfrequenz  $2\pi/\Delta$  ist für  $\Delta_{1,2}$  in rot und für  $\Delta_{2,3}$  in blau zu sehen. Die schwarz gestrichelten Linien entsprechen linearen Fits der Form ax+b.

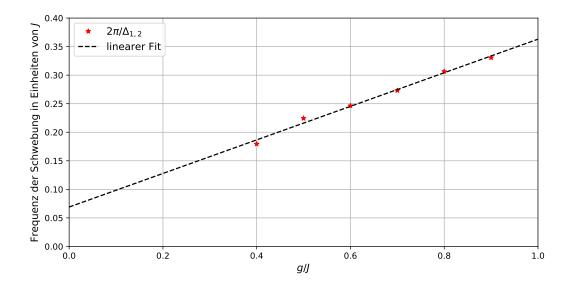


Abbildung 4.18: Kreisfrequenzen der Schwebung für  $\omega_0=2,5J$  gegen g aufgetragen. Die restlichen Parameter entsprechen den Standardparametern (4.7). Dabei ist  $\Delta_{1,2}$  die Differenz der Positionen des ersten und des zweiten Maximums. Die zugehörige Kreisfrequenz  $2\pi/\Delta_{1,2}$  ist in rot zu sehen. Die Differenz  $\Delta_{2,3}$  der Positionens des zweiten und des dritten Maximums kann für  $\omega_0=2,5J$  nicht bestimmt werden, da bis g=0,9J kein drittes Maximum auftritt. Die schwarz gestrichelte Linie entspricht einem linearen Fit der Form ax+b.

Zuletzt wird in diesem Kapitel das Verhalten der einzelnen  $u_k$  für die Standardparameter (4.7) untersucht. Dies ist in Abbildung 4.20 einmal für das gepulste System und in Abbildung 4.21 für das stationär getriebene System gezeigt. Im gepulsten System ist zu Beginn nur zu sehen, dass Moden in der Brillouinzonenhälfte  $|k| < \pi/2$  stärker angeregt werden als in der Brillouinzonenhälfte  $|k| > \pi/2$ , während bei  $k = \pi/2$  die Unterdrückung durch  $y_0' = 0$  auftritt. Erst einige Zeit nach dem Puls bilden sich stärker definierte Moden aus, welche sich zwar nahe der Phononmode befinden, dieser jedoch nicht entsprechen. Für das stationär getriebene System hingegen bilden sich deutlich früher stark definierte Moden aus, welche in diesem Fall auch dieselbe Frequenz wie die Phononmode haben. Dieser Unterschied ist vor allem auf das Spektrum endlicher Breite aus Abbildung 4.11(b) zurückzuführen. Die Reaktion auf den Puls gibt stärker die Effekte aus dem Spin-Phononsystem wieder, während die Reaktion auf das stationäre Treiben durch die feste Laserfrequenz stärker beschränkt ist. Dies macht das Pulsen des Systems zu einer attraktiven Analysemethode in Ergänzung zu dem stationären Treiben.

In Anhang D wird zudem das Verhalten des Systems auf eine Abfolge von Pulsen angeschnitten.

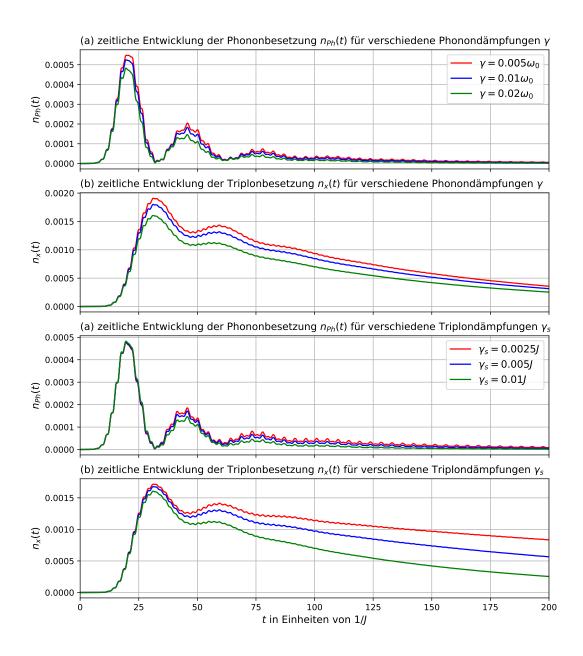


Abbildung 4.19: Verhalten des Systems für verschiedene Phonondämpfungen  $\gamma$  und verschiedene Triplondämpfungen  $\gamma_s$ . Die restlichen Parameter entsprechen den Standardparametern. In (a) ist die Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$ , in (b) die Triplonbesetzung  $n_x(t)$  unter Änderung von  $\gamma$  zu sehen In (c) und (d) sind je die Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}(t)$  und die Triplonbesetzung  $n_x(t)$  für verschiedene  $\gamma_s$  zu sehen.

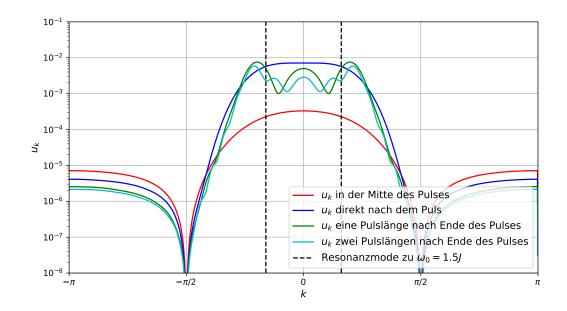


Abbildung 4.20:  $u_k$  aufgetragen gegen k zu verschiedenen Zeitpunkten während und nach dem Eintreffen eines Laserpulses am System. Die gestrichelte schwarze Linie kennzeichnet die Phononmode  $\omega_0=1,5J$ . Die Pulslänge beträgt  $6\sigma=30/J$ , die Spin-Phononkopplung g=0,5J. Die weiteren Parameter entsprechen den Standardparametern (4.7).

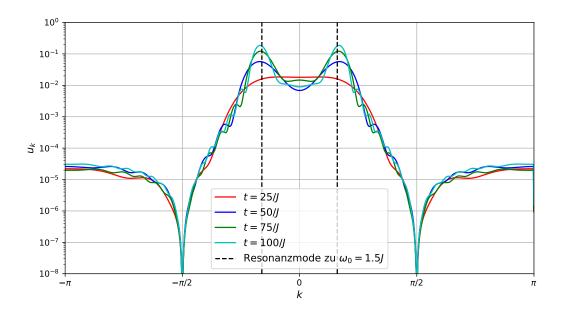


Abbildung 4.21: Zeitliche Entwicklung von  $u_k$  gegen k währen des stationären Treibens. Die gestrichelte schwarze Linie kennzeichnet die Phononmode  $\omega_0=1,5J$ . Die Spin-Phononkopplung beträgt g=0,5J. Die weiteren Parameter entsprechen den Standardparametern (4.7).

## 5 Der Phonon-Bitriplonansatz

Im Folgenden wird ein alternativer Ansatz zur Diagonalisierung des Hamiltonoperators, anstelle der Molekularfeldtheorie aus Ref. [2] betrachtet. Er basiert darauf, dass ein Triplonpaar sich bei niedriger Besetzung ähnlich wie ein freies Boson verhält. Dieser Ansatz führt auf einen direkt diagonalisierbaren Hamiltonoperator. Die Motivation besteht darin, in diesem ein Modenpaar zu finden, dessen Schwebung die langsamen Oszillationen des gepulsten Systems aus Abschnitt 4.5 erklären kann.

## 5.1 Einführung der Bitriplon Operatoren

Zunächst wird der Hamiltonoperator in drei Teile aufgeteilt

$$H = H_{\rm P} + H_{\rm S} + H_{\rm SP} \ .$$
 (5.1)

Der Hamiltonoperator  $H_{\rm P}$  des optischen Phonons bleibt dabei wie gehabt

$$H_{\rm P} = \omega_{\rm Ph} b_0^{\dagger} b_0 \ . \tag{5.2}$$

Dabei wird die Frequenz des Phonons von nun an  $\omega_{\rm Ph}$  genannt, um Verwechslungen mit der Triplonmode  $\omega_{k=0}$  auszuschließen. Letztere muss im Weiteren zusammen mit der  $\omega_{k=\pi}$ -Mode häufig von den restlichen Moden getrennt betrachtet werden. Für den Spinanteil des Systems wird nun die folgende Definition vorgenommen

$$B_{k,\alpha} = t_{k,\alpha} t_{-k,\alpha} \quad B_{k,\alpha}^{\dagger} = t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha}^{\dagger} , \qquad (5.3)$$

womit ein Triplonpaar genähert als ein einzelnes Boson beschrieben werden kann. Damit es sich bei  $B_{k,\alpha}$  und  $B_{k,\alpha}^{\dagger}$  um echte bosonische Operatoren handelt, müssen die bosonische Kommutatorrelationen erfüllt sein. Hierbei wird angenommen, dass die Triplonbesetzung  $t^{\dagger}t$  vernachlässigbar gering ist. Explizit ergibt sich

$$[B_{k,\alpha}, B_{k,\alpha}] = [t_{k,\alpha}t_{-k,\alpha}, t_{k,\alpha}t_{-k,\alpha}] = 0$$

$$(5.4a)$$

$$\left[B_{k,\alpha}^{\dagger}, B_{k,\alpha}^{\dagger}\right] = \left[t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha}^{\dagger}, t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha}^{\dagger}\right] = 0 \tag{5.4b}$$

$$\left[B_{k,\alpha}, B_{k,\alpha}^{\dagger}\right] = \left[t_{k,\alpha} t_{-k,\alpha}, t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha}^{\dagger}\right] \tag{5.4c}$$

$$= t_{k,\alpha} \underbrace{\left[t_{-k,\alpha}, t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha}^{\dagger}\right]}_{t_{k,\alpha}^{\dagger}} + \underbrace{\left[t_{k,\alpha}, t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha}^{\dagger}\right]}_{t_{k,\alpha}^{\dagger}} t_{-k,\alpha}$$
(5.4d)

$$=t_{k,\alpha}t_{k,\alpha}^{\dagger}+t_{-k,\alpha}^{\dagger}t_{-k,\alpha}=1+\underbrace{t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}+t_{-k,\alpha}^{\dagger}t_{-k,\alpha}}_{\approx 0}\forall k\neq 0,\pi \tag{5.4e}$$

(5.4f)

und für k = 0 oder  $k = \pi$ 

$$\left[B_{0,\alpha}, B_{0,\alpha}^{\dagger}\right] = \left[t_{0,\alpha} t_{0,\alpha}, t_{0,\alpha}^{\dagger} t_{0,\alpha}^{\dagger}\right] \tag{5.5a}$$

$$= t_{0,\alpha} \underbrace{\left[t_{0,\alpha}, t_{0,\alpha}^{\dagger} t_{0,\alpha}^{\dagger}\right]}_{2t_{0,\alpha}^{\dagger}} + \underbrace{\left[t_{0,\alpha}, t_{0,\alpha}^{\dagger} t_{0,\alpha}^{\dagger}\right]}_{2t_{0,\alpha}^{\dagger}} t_{0,\alpha}$$

$$(5.5b)$$

$$=2t_{0,\alpha}t_{0,\alpha}^{\dagger}+2t_{0,\alpha}^{\dagger}t_{0,\alpha}=2+4\underbrace{t_{0,\alpha}^{\dagger}t_{0,\alpha}}_{\text{co}}$$
(5.5c)

$$\left[B_{\pi,\alpha}, B_{\pi,\alpha}^{\dagger}\right] = 2 + 4 \underbrace{t_{\pi,\alpha}^{\dagger} t_{\pi,\alpha}}_{\approx 0} . \tag{5.5d}$$

Die Operatoren zu k=0 und  $k=\pi$  müssen also mit einem Faktor  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  normiert werden, sodass die Definition 5.3 modifiziert wird

$$B_{0,\alpha} \coloneqq \frac{1}{\sqrt{2}} t_{0,\alpha} t_{0,\alpha} \quad B_{\pi,\alpha} \coloneqq \frac{1}{\sqrt{2}} t_{\pi,\alpha} t_{\pi,\alpha} \ . \tag{5.6}$$

Um nun den reinen Spinhamiltonoperator  $H_{\rm S}$  zu erhalten, wird die obige Näherung in  $H_{\rm S}$  aus Gleichung (3.12a) eingesetzt

$$H_{\rm S} = \sum_{k,\alpha} \omega_k t_{k,\alpha}^\dagger t_{k,\alpha} = \sum_{0 < k < \pi,\alpha} \omega_k (t_{k,\alpha}^\dagger t_{k,\alpha} + t_{-k,\alpha}^\dagger t_{-k,\alpha}) + \omega_0 t_{0,\alpha}^\dagger t_{0,\alpha} + \omega_\pi t_{\pi,\alpha}^\dagger t_{\pi,\alpha} \ . \tag{5.7}$$

Im Folgenden betrachten wir den Kommutator

$$[H_{\mathrm{S}}, B_{k,\alpha}^{\dagger}] = \begin{cases} \omega_{k}(\underbrace{[t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}, t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{-k,\alpha}^{\dagger}]}_{=t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{-k,\alpha}^{\dagger}} + \underbrace{[t_{-k,\alpha}^{\dagger}t_{-k,\alpha}, t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{-k,\alpha}^{\dagger}]}_{=t_{-k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}^{\dagger} = B_{k,\alpha}} \quad 0 < k < \pi \\ \underbrace{\frac{\omega_{0}}{\sqrt{2}}[t_{0,\alpha}^{\dagger}t_{0,\alpha}, t_{0,\alpha}^{\dagger}t_{0,\alpha}^{\dagger}]}_{=t_{0,\alpha}^{\dagger}t_{0,\alpha}^{\dagger}} = \underbrace{\frac{\omega_{0}}{\sqrt{2}}t_{0,\alpha}^{\dagger}t_{0,\alpha}^{\dagger}t_{0,\alpha}^{\dagger}}_{=2t_{0,\alpha}^{\dagger}} = 2\omega_{0}B_{0,\alpha}^{\dagger} \qquad k = 0 \\ \underbrace{\frac{\omega_{\pi}}{\sqrt{2}}\underbrace{[t_{\pi,\alpha}^{\dagger}t_{\pi,\alpha}, t_{\pi,\alpha}^{\dagger}t_{\pi,\alpha}^{\dagger}]}_{\text{s.o. und beachte } -\pi = \pi} = 2\omega_{\kappa}B_{k,\alpha}^{\dagger} \quad \forall k \geq 0 \end{cases} \qquad (5.8b)$$

sowie den Kommutator

$$[2\omega_k B_{k\alpha}^{\dagger}, B_{k\alpha}^{\dagger} B_{k\alpha}] = 2\omega_k B_{k\alpha}^{\dagger}. \tag{5.9}$$

Der Vergleich der beiden Kommutatoren lässt den Schluss zu, dass  $H_{\rm S}$  durch den Term  $2\sum_{0\leq k\leq \pi}\omega_k B_{k,\alpha}^\dagger B_{k,\alpha}$  beschrieben werden kann. Das stimmt für  $B_{k,\alpha}^\dagger$  sowie für  $B_{k,\alpha}$ .

Als letzten der drei wird der Wechselwirkungsterm  $H_{\rm SP}$  betrachtet. Dabei wird, wie in Abschnitt 4.3 besprochen, der  $t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}$ -Term der Spin-Phononkopplung vernachlässigt

$$H_{\rm SP} = \frac{g}{\sqrt{N}} (b_0 + b_0^\dagger) \sum_{k,\alpha} y_k \underbrace{t_{k,\alpha}^\dagger t_{k,\alpha}}_{\text{vernachlässigt}} + \frac{y_k'}{2} (t_{k,\alpha}^\dagger t_{-k,\alpha}^\dagger + t_{k,\alpha} t_{-k,\alpha}) + \text{const.}$$
 (5.10a)

$$\approx \frac{g}{\sqrt{N}}(b_{0} + b_{0}^{\dagger}) \left( \sum_{k,\alpha} \left[ \frac{y_{k}'}{2} (B_{k,\alpha}^{\dagger} + B_{k,\alpha}) \right] + \sum_{\alpha} \left[ \frac{y_{0}'}{2\sqrt{2}} (B_{0,\alpha}^{\dagger} + B_{0,\alpha}) + \frac{y_{\pi}'}{2\sqrt{2}} (B_{\pi,\alpha}^{\dagger} + B_{\pi,\alpha}) \right] \right)$$
(5.10b)

Da die k-Punkte in dem Intervall  $k \in (-\pi, \pi]$  liegen und  $y'_k$ ,  $B_{k,\alpha}$  sowie  $B^{\dagger}_{k,\alpha}$  symmetrisch in k sind, kann  $H_{\rm SP}$  in das Intervall  $k \in [0, \pi]$  verlagert werden, indem mit einem Faktor 2 für alle k außer k = 0 und  $k = \pi$  multipliziert wird. Es ergibt sich

$$H_{\rm SP} = \frac{g}{\sqrt{N}} (b_0 + b_0^{\dagger}) \left( \sum_{0 < k < \pi, \alpha} \left[ y_k' (B_{k,\alpha}^{\dagger} + B_{k,\alpha}) \right] + \sum_{\alpha} \left[ \frac{y_0'}{\sqrt{2}} (B_{0,\alpha}^{\dagger} + B_{0,\alpha}) + \frac{y_\pi'}{\sqrt{2}} (B_{\pi,\alpha}^{\dagger} + B_{\pi,\alpha}) \right] \right) \tag{5.11}$$

Da der Hamiltonoperator in dieser Näherung vollständig bilinear ist, kann er als bilineare Form in der folgenden Operatorbasis aufgeschrieben werden

$$\beta = (b_0, B_0, B_0, \cdots, B_{\pi}, B_{\pi}, B_{\pi}, B_{\eta}, b_0^{\dagger}, B_0^{\dagger}, B_0^{\dagger}, B_0^{\dagger}, \cdots, B_{\pi}^{\dagger}, B_{\pi}^{\dagger}, B_{\pi}^{\dagger})^T.$$
 (5.12)

Dabei wird jeder Triplonflavour  $\alpha$  separat aufgeführt. Dadurch kann der Hamiltonoperator über eine quadratische Matrix  $\underline{M}$  ausgedrückt werden

$$H = \frac{1}{2} \underline{\beta}^{\dagger} \underline{\underline{M}} \underline{\beta} . \tag{5.13}$$

Diese Matrix ist in dieser Form jedoch nicht hermitesch und daher noch relativ kompliziert zu diagonalisieren. In Ref. [52] wird, basierend auf Ref. [53], eine Möglichlkeit beschrieben, diesen Hamiltonoperator direkt zu symmetrisieren und anschließend zu diagonalisieren. Diese Arbeit nutzt eine einfachere Diagonalisierung und merkt lediglich an, dass die direkte Diagonalisierung des Hamiltonoperators (5.13), so wie sie im Laufe dieses Projekts ebenfalls durchgeführt wurde, auf dieselben Ergebnisse führt.

Die Basis (5.12) wird nun erneut einer Transformation unterzogen, durch welche diese durch die Orts- und Impulsoperatoren

$$x := \frac{1}{\sqrt{2}}(b^{\dagger} + b)$$
  $p := \frac{i}{\sqrt{2}}(b^{\dagger} - b)$ , (5.14)

sowie

$$X_{k,\alpha}\coloneqq \frac{1}{\sqrt{2}}(B_{k,\alpha}^{\dagger}+B_{k,\alpha}) \qquad \qquad P_{k,\alpha}\coloneqq \frac{i}{\sqrt{2}}(B_{k,\alpha}^{\dagger}-B_{k,\alpha}) \qquad \qquad (5.15)$$

ausgedrückt werden, wie sie vom quantenmechanischen harmonischen Oszillator bekannt sind. Sie erfüllen deren kanonische Kommutatorrelationen

$$[X_{k,\alpha}, X_{k',\beta}] = [P_{k,\alpha}, P_{k',\beta}] = 0 [X_{k,\alpha}, P_{k',\beta}] = i\delta_{k,k'}\delta_{\alpha,\beta} . (5.16)$$

Darauf aufbauend gilt

$$x^2 + p^2 = 2b^{\dagger}b + 1 \ . \tag{5.17}$$

Eine analoge Relation gilt auch für  $X_{k,\alpha}^2 + P_{k,\alpha}^2$ . Bis auf additive Konstanten gilt nun also

$$b^{\dagger}b = \frac{1}{2}(x^2 + p^2) \quad B_{k,\alpha}^{\dagger}B_{k,\alpha} = \frac{1}{2}(X_{k,\alpha}^2 + P_{k,\alpha}^2) \ . \tag{5.18}$$

Der vollständige Hamiltonoperator lautet nun

$$\begin{split} H = & \frac{\omega_{\text{Ph}}}{2} (x^2 + p^2) + \sum_{0 < k < \pi, \alpha} \omega_k \left( X_{k, \alpha}^2 + P_{k, \alpha}^2 \right) \\ & + gx \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\alpha} \left( y_0' X_{0, \alpha} + y_\pi' X_{\pi, \alpha} + \sqrt{2} \sum_{0 < k < \pi} y_k' X_{k, \alpha} \right) \; . \end{split} \tag{5.19}$$

Unter der Reskalierung

$$p \to \frac{p}{\sqrt{\omega_{\rm Ph}}}$$
  $x \to x\sqrt{\omega_{\rm Ph}}$  (5.20a)

$$P_{k,\alpha} \to \frac{P_{k,\alpha}}{\sqrt{2\omega_k}}$$
  $X_{k,\alpha} \to X_{k,\alpha} \sqrt{2\omega_k}$ , (5.20b)

welche die Vertauschungsrelationen erhält, nimmt der Hamiltonoperator die Form

$$H = \frac{p^2}{2} + \sum_{0 < k < \pi, \alpha} \frac{P_{k,\alpha}^2}{2} + \frac{\omega_{\text{Ph}}^2}{2} x^2 + \sum_{0 < k < \pi, \alpha} \frac{4\omega_k^2}{2} X_{k,\alpha}^2$$

$$+ \sqrt{\frac{2\omega_{\text{Ph}}}{N}} gx \sum_{\alpha} \left( y_0' \sqrt{2\omega_0} X_{0,\alpha} + y_\pi' \sqrt{2\omega_\pi} X_{\pi,\alpha} + 2 \sum_{0 < k < \pi} y_k' \sqrt{\omega_k} X_{k,\alpha} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \underline{P}^2 + \frac{1}{2} \underline{X}^{\dagger} \underline{\underline{M}} \underline{X}$$

$$(5.21a)$$

an. Dabei wird die reelle, symmetrische Matrix  $\underline{M}$ 

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} \omega_{\mathrm{Ph}}^2 & 2\frac{\tilde{g}_0}{\sqrt{N}} & 2\frac{\tilde{g}_0}{\sqrt{N}} & 2\frac{\tilde{g}_0}{\sqrt{N}} & 2\frac{\tilde{g}_k}{\sqrt{N}} & 2\frac{\tilde{g}_k}{\sqrt{N}} & \cdots \\ 2\frac{\tilde{g}_0}{\sqrt{N}} & 4\omega_0^2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 2\frac{\tilde{g}_0}{\sqrt{N}} & 0 & 4\omega_0^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 2\frac{\tilde{g}_0}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 4\omega_0^2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \\ 2\frac{\tilde{g}_k}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 4\omega_k^2 & 0 & 0 & \cdots \\ 2\frac{\tilde{g}_k}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 4\omega_k^2 & 0 & \cdots \\ 2\frac{\tilde{g}_k}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 4\omega_k^2 & \cdots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$
 (5.22)

 $_{
m mit}$ 

$$\tilde{g}_k = \begin{cases} gy_k'\sqrt{\omega_{\text{Ph}}\omega_k} & k \in \{0, \pi\} \\ gy_k'\sqrt{2\omega_{\text{Ph}}\omega_k} & k \notin \{0, \pi\} \end{cases}$$

$$(5.23)$$

verwendet. Durch zweifaches Anwenden der Heisenbergschen Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2}{dt^2}A_H = \frac{-1}{\hbar^2} [H, [H, A_H]]$$
 (5.24)

sowie den kanonischen Vertauschungsrelationen (5.16) folgt

$$\frac{d^2}{dt^2}\underline{X} = \frac{-1}{\hbar^2} \left[ H, \underbrace{[H, \underline{X}]}_{[\underline{P}^2/2, \underline{X}] = -i\hbar\underline{P}} \right] = \frac{i}{\hbar} [H, \underline{P}] = \frac{i}{2\hbar} \left[ \underline{X}^{\dagger} \underline{\underline{M}} \underline{X}, \underline{P} \right] = -\underline{\underline{M}} \underline{X} . \tag{5.25}$$

Diese Bewegungsgleichung wird gelöst durch

$$\underline{X}(t) = \underline{X}_0 \cos(\sqrt{\underline{\underline{M}}}t) + \frac{\underline{P}_0}{\sqrt{\underline{\underline{M}}}} \sin(\sqrt{\underline{\underline{M}}}t) . \qquad (5.26)$$

Dabei sind  $\underline{X}_0$  und  $\underline{P}_0$  die Kurzschreibweise der zeitunabhängigen Orts- und Impulsoperatoren im Schrödingerbild  $\underline{X}(t=0)$  und  $\underline{P}(t=0)$ . Es handelt sich bei diesem System um gekoppelte harmonische Oszillatoren mit den Wurzeln der Eigenwerte von  $\underline{\underline{M}}$  als den Eigenfrequenzen. Als reelle, symmetrische Matrix lässt sich  $\underline{\underline{M}}$  numerisch diagonalisieren. Das sich daraus ergebende Spektrum wird in Abschnitt 5.2 untersucht. Eine analytische Lösung dieses Ansatzes findet sich in Abschnitt 5.3

## 5.2 Analyse des Spektrums

Hier wird nun das Spektrum von  $\sqrt{\underline{\underline{M}}}$  untersucht. Dieses ist für g=0.5J und  $\omega_0=1.45J$  in Abbildung 5.1 zu sehen. So gut wie alle Moden liegen, wie zu erwarten, im Spinband und auch die Wurzeldivergenzen an den Bandkanten sind zu erkennen. Die Verteilung ist der DOS in Abbildung 3.2 sehr ähnlich. Die einzige nenneswerte Abweichung ist eine einzelne Mode außerhalb des Bandes bei  $\omega \approx 1.35 J$ , welche durch die rot gestrichelte Linie hervorgehoben ist. Es ist an dieser Stelle wichtig zu erwähnen, dass es sich hier um ungewichtete Moden handelt. Wie stark diese wiederum besetzt sind, geht aus dieser Abbildung nicht hervor.

Das Spektrum wird für verschiedene q ausgewertet und die Position der äußeren Moden notiert. Diese ist in Abbildung 5.2 gegen die Spin-Phononkopplung aufgetragen. Da die Motivation dieses Ansatzes darin liegt, die Schwebung aus Abschnitt 4.5 zu beschreiben, wird eine in q lineare Abhängigkeit gemäß Abbildung 4.17 erwartet. Wie hier jedoch zu sehen ist, ist der gefundene Zusammenhang nicht linear in g, so wie die Frequenz der Schwebung es sein sollte, sondern, wie an dem Fit zu erkennen, zumindest bis  $q \approx 0.5J$  näherungsweise quadratisch in q.

Daher wird erneut ein Blick auf das Phonon-Bitriplon in Abschnitt 4.4.1 geworfen, welches ein ähnliches, in q quadratisches Verhalten aufweist. Beim Vergleichen von Abbildung 5.2 und den entsprechenden Cyan-farbenen Punkten in Abbildung 4.10 ist jedoch ersichtlich, dass sich die Mode des Phonon-Bitriplons wesentlich schneller von der unteren Bandkante entfernt, als die äußere Mode des neuen Modells. Allerdings muss hier beachtet werden, dass der Phonon-Bitriplonansatz Unterschiede zum ursprünglichen Modell aufweist. Ein entscheidender Unterschied ist, dass das neue System nicht von einem Laser getrieben wird. Um es mit dem alten Modell vergleichen zu können, muss hier  $a_l \to 0$  betrachtet werden. Ein weiterer Unterschied ist der  $t^{\dagger}t$ -Term, welcher in Gleichung (5.10a) zum Erreichen der Bilinearität des neuen Modells vernachlässigt wurde. Letzterer Unterschied wurde zwar in Abschnitt 4.3 als vernachlässigbar dargestellt, jedoch zeigt sich in diesem Fall, dass diese Annahme nur eine eingeschränkte Gültigkeit besitzt.

Zunächst wird der benannte  $t^{\dagger}t$ -Term aus dem alten Modell entfernt. Dies geschieht, indem in dessen Bewegungsgleichungen (3.22e) und (3.22f) die Änderung  $(\omega_k + gy_k q(t)) \to \omega_k$  vorgenommen wird, sodass folgendes gilt

$$\frac{d}{dt}v_k(t) = -2\omega_k w_k(t) - \gamma_s v_k(t) \tag{5.27a} \label{eq:5.27a}$$

$$\begin{split} \frac{d}{dt}v_k(t) &= -2\omega_k w_k(t) - \gamma_s v_k(t) \\ \frac{d}{dt}w_k(t) &= 2\omega_k v_k(t) + 2gq(t)y_k' \left[u_k(t) + \frac{3}{2}\right] - \gamma_s w_k(t) \;. \end{split} \tag{5.27a}$$

Mit diesen veränderten Bewegungsgleichungen lassen sich Daten analog zu Abbildung 4.9 generieren, so wie sie nun in Abbildung 5.3 zu sehen sind. Beim Vergleich der Daten lässt sich erkennen, das die Resonanzpeaks, die ohne den  $t^{\dagger}t$ -Term erstellt werden, zu höheren Frequenzen verschoben sind. Dadurch rückt die Mode unterhalb des Bandes näher an dieses heran.

In Abbildung 5.4 ist nun das Verhalten der entsprechenden Phonon-Bitriplonmode für verschiedene, kleine Laseramplituden  $a_l$  sowie die äußere Mode des Phonon-Bitriplonansatzes zu sehen. Für  $a_l \sim 0.001 \omega_0$  ist hier nahezu eine Übereinstimmung beider Moden zu sehen. Für  $a_l \to 0$  kann es sein, dass sich die Mode des Phonon-Bitriplons nun ein wenig unterhalb der Mode des Phonon-Bitriplonansatzes befindet, dies ist jedoch nicht weiter bedenklich, da für beide Rechnungen grundsätzlich verschiedene Näherungen gemacht werden. Vielmehr kann diese Übereinstimmung als Beleg dafür gesehen werden, dass es sich hier um dieselbe Mode handelt, welche mit beiden

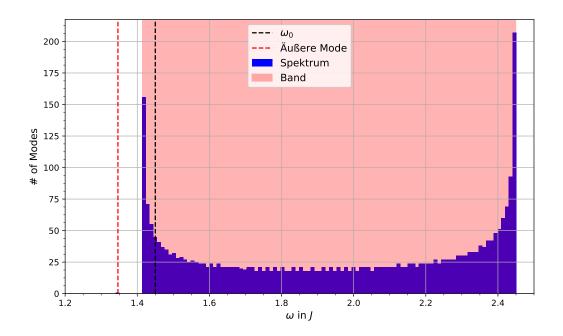
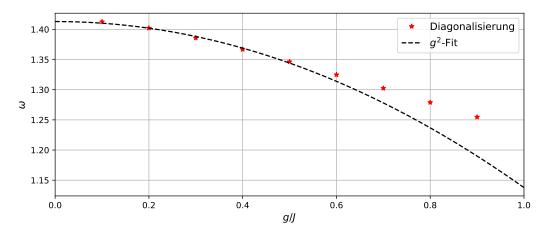


Abbildung 5.1: Frequenzspektrum des Phonon-Bitriplon Systems. Die Eigenmoden  $\sqrt{\underline{M}}$  sind als Histogramm für g=0.5J und N=1000 k-Punkte dargestellt. Die äußere Mode ist durch die rote gestrichelte Linie hervorgehoben. Das Band ist in rot hinterlegt, die Phononfrequenz durch die gestrichelte, schwarze Linie gekennzeichnet.



**Abbildung 5.2:** g-Abhängigkeit der äußeren Mode aus Abbildung 5.1 In schwarz ein 'least-square'-Fit der Form  $ag^2+b$  an die Werte bis g=0.5J mit  $a\approx -0.2753\pm 0.0138$  und  $b\approx 1.4130\pm 0.0019\approx \sqrt{2}$ 

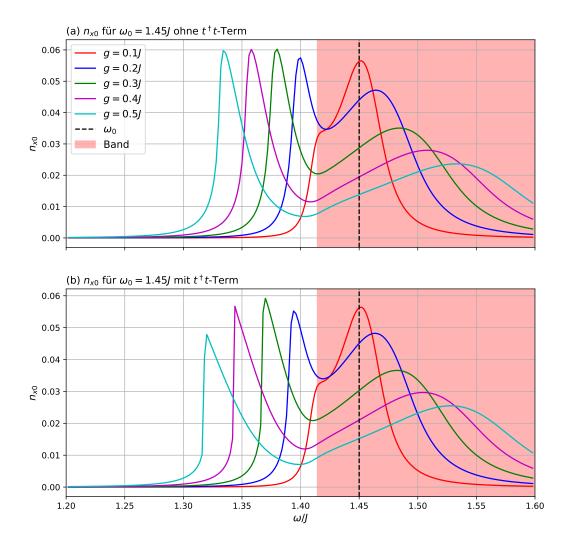


Abbildung 5.3: Triplonbesetzung des Systems in Abhängigkeit der Laserfrequenz für  $\omega_0=1,45J$  und Spin-Phononkopplungen. In (a) unter Vernachlässigung des  $t^\dagger t$ -Terms aus der Spin-Phononkopplung (3.14). In (b) zum Vergleich noch einmal mit dem  $t^\dagger t$ -Term. Das Spinband ist je in rot hervorgehoben, die Phononmode durch eine gestrichelte, schwarze Linie gekennzeichnet.

Ansätzen gefunden wurde. Die fast quantitative Übereinstimmung beider Modelle liefert zudem eine gute Rechtfertigung derjenigen Näherungen, in welchen sich die Modelle unterscheiden.

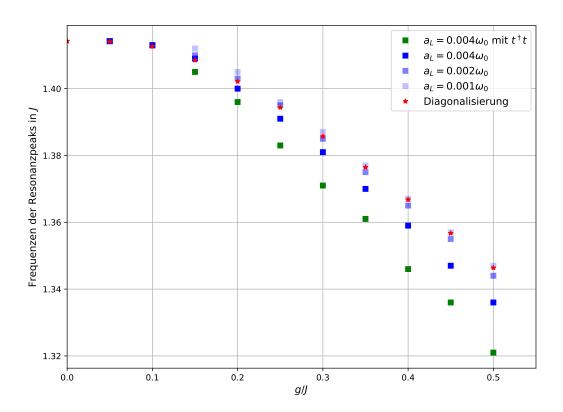


Abbildung 5.4: Vergleich der Phonon-Bitriplonmode ohne den  $t^{\dagger}t$ -Term in der Spin-Phononwechselwirkung (blaue Quadrate), und der äußeren Mode des Phonon-Bitriplonansatzes (rote Sternchen). Zur besseren Einordnung die Phonon-Bitriplonmode mit  $t^{\dagger}t$ -Term (grüne Quadrate).

#### 5.2.1 Das Verhalten der Moden

Die direkte Diagonalisierung zeigt einige interessante Eigenschaften des Phonon-Bitriplons auf, welche in diesem Abschnitt besprochen werden. Um die Entwicklung einzelner Moden besser verfolgen zu können, werden dafür zunächst kleine Systeme betrachtet. Das Spektrum für g=0 und eine Phononmode  $\omega_{\rm Ph}$  innerhalb des Bandes {} hat für N=5 die Form

$$\left\{ [\omega_0, \omega_0, \omega_0] [\omega_{k_1}, \omega_{k_1}, \omega_{k_1}] \omega_{\mathrm{Ph}} [\omega_{k_2}, \omega_{k_2}, \omega_{k_2}] [\omega_{k_3}, \omega_{k_3}, \omega_{k_3}] [\omega_{\pi}, \omega_{\pi}, \omega_{\pi}] \right\} , \qquad (5.28)$$

wobei die Moden aufsteigend nach Frequenz sortiert sind. Der Platz der Phononmode ist hier zu Anschauungszwecken relativ mittig gewählt. Sie liegt einzeln zwischen den Triplonmoden  $[\omega_k, \omega_k, \omega_k]$ , welche aufgrund der Konstruktion der Basis (5.12) dreifach entartet sind. Bei Einschalten der Spin-Phononkopplung, sprich g > 0, ändert das Spektrum seine Form wiefolgt

$$[\omega_0'] \left\{ [\omega_0, \omega_0] [\omega_{k_1}'] [\omega_{k_1}, \omega_{k_1}] \omega_{\text{Ph}}' [\omega_{k_2}, \omega_{k_2}] [\omega_{k_2}'] [\omega_{k_3}, \omega_{k_3}] [\omega_{k_3}'] [\omega_{k_4}, \omega_{k_4}] [\omega_{k_4}'] [\omega_{\pi}, \omega_{\pi}] \right\} [\omega_{\pi}'] . \quad (5.29)$$

Die dreifache Entartung der Triplonmoden wird hier teilweise aufgehoben, da sich je eine der drei Moden von den anderen beiden abspaltet

$$[\omega_k, \omega_k, \omega_k] \stackrel{g>0}{\to} [\omega_k'][\omega_k, \omega_k]$$
 (5.30)

Die Frequenz der abgespaltenen Mode wird dabei stets von der Phononmode  $\omega'_{\rm Ph}$  weggeschoben. Die Frequenzen der übrigen beiden Moden ändern sich nicht von ihrem Wert für g=0. Dies ist ein sehr interessantes Verhalten, da unter den 3 Moden, welche den Triplonflavours  $\alpha \in \{x,y,z\}$  entsprechen, keine Mode in irgendeiner Form bevorzugt wird. Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass das Flavour in eine natürlichere Basis  $\{x',y',z'\}$  übergeht, welche aus den Superpositionen

$$x' \coloneqq x + y + z \tag{5.31a}$$

$$y' \coloneqq x - y \tag{5.31b}$$

$$z' := x + y - 2z \tag{5.31c}$$

der ursprünglichen Flavourbasis  $\{x,y,z\}$  besteht. x' kann hier als absolutes Flavour verstanden werden, während y' und z' die Relationen der Flavours untereinander beschreiben. Die x'-Mode ist dementsprechend deutlich von den beiden anderen Moden hervorgehoben.

Eine weitere interessante Eigenschaft von dem Ausdruck (5.29) ist, dass je exakt eine Mode die untere beziehungsweise die obere Bandkante überschreitet. Hierbei handelt es sich um die Moden  $\omega_{0,x'}$  und  $\omega_{\pi,x'}$ . Dies erscheint in dieser Konfiguration zunächst nicht weiter verwunderlich, da die Ursprünge dieser Moden  $\omega_0$  beziehungsweise  $\omega_{\pi}$  direkt auf der Bandkante liegen und wie bereits erwähnt von der Phononmode  $\omega_{\rm Ph}$  im Inneren des Bandes weggeschoben werden. Hier wird es allerdings interessant für große Werte von g und N. Für große Werte von g werden die beiden äußeren Moden weit vom Band weggeschoben. Für große N wiederum liegen viele Moden sehr nah an der Bandkante. Es wäre dementsprechend zu erwarten, dass ab irgendeinem Punkt für große g und N weitere Moden die Bandkante überschreiten. Dies ist jedoch nicht der Fall. Die anderen Moden stauen sich stattdessen an der Bandkante auf. Bei der äußeren Phonon-Bitriplonmode handelt es sich somit um eine einzelne, nicht entartete Mode. Liegt  $\omega_{\rm Ph}$  dabei außerhalb des Bandes, so wird die entsprechende Triplonmode ins Innere des Bandes geschoben. Dass es sich bei den äußeren Moden um einzelne, nicht entartete Moden handelt, ist somit vollständig unabhängig von den Werten für g, N und  $\omega_{\rm Ph}$ , solange g>0 ist.

Neben den  $\alpha=x'$  Triplonmoden verändert sich für g>0 auch der Wert von  $\omega_{\rm Ph}\to\omega'_{\rm Ph}$ . Es ist jedoch vor allem für große N schwierig die Entwicklung spezifischer Moden innerhalb des Bandes zu verfolgen. Für kleine N wiederum ist das Verhalten dieser Moden noch stark abhängig von N und somit nicht representativ für das System. Unter anderem aus diesem Grund wird im folgenden Abschnitt ein analytischer Ansatz gemacht, welcher es ermöglicht auch diese Moden weiter zu Untersuchen.

## 5.3 Berechnung der Selbstenergie der Phonon-Bitriplonmode

In diesem Abschnitt wird ein analytischer Ansatz über die lineare Antworttheorie [19] verfolgt, um die Eigenmoden aus Gleichung (5.26) zu bestimmen. Aus diesem sollen weitere Kenntnisse über das Phonon-Bitriplon gewonnen werden. Zunächt wird die Greensfunktion über den Kubo Formalismus [19], wie er in Gleichung (2.49) zu sehen ist, bestimmt

$$\underline{\underline{\underline{G}}}^{\text{ret}} = -i \left\langle \left[ \underline{\underline{X}}(t), \underline{\underline{X}}_0^T \right] \right\rangle \Theta(t) . \tag{5.32}$$

Nun kann für  $\underline{X}(t)$  die Lösung (5.26) verwendet werden, wobei aufgrund der Kommutatorrelation (5.16) nur der sinus-Term beiträgt

$$\underline{\underline{\underline{G}}}^{\text{ret}} = \frac{-i}{\sqrt{\underline{\underline{M}}}} \sin(\sqrt{\underline{\underline{\underline{M}}}}t) \underbrace{\langle [\underline{\underline{P}}_0, \underline{\underline{X}}_0^T] \rangle}_{-i\mathbb{1}} \Theta(t). \tag{5.33}$$

Gemäß Gleichung (2.16) kann nun die Fouriertransformierte der Greensfunktion bestimmt werden

$$\underline{\underline{G}}(\omega + i0^{+}) = \frac{-1}{\sqrt{\underline{\underline{M}}}} \int_{-\infty}^{\infty} \sin(\sqrt{\underline{\underline{M}}}t) \Theta(t) e^{i(\omega + i0^{+})t} dt$$

$$= \frac{i}{2\sqrt{\underline{\underline{M}}}} \int_{0}^{\infty} e^{i(\omega + i0^{+})t} \left( e^{i\sqrt{\underline{\underline{M}}}t} - e^{-i\sqrt{\underline{\underline{M}}}t} \right) dt$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\underline{\underline{M}}}} \left( \frac{1}{\omega + i0^{+} - \sqrt{\underline{\underline{M}}}} - \frac{1}{\omega + i0^{+} + \sqrt{\underline{\underline{M}}}} \right)$$

$$= \frac{1}{(\omega + i0^{+})^{2} - \underline{\underline{M}}}.$$
(5.34)

Um die Inverse von  $\underline{\underline{M}}$  behandeln zu können, wird die Matrix aufgeteilt in den Diagonalteil  $\underline{\underline{M_0}}$  und den Nichtdiagonalteil  $\underline{N}$ 

$$\underline{\underline{M}} = \underline{M_0} + \underline{\underline{N}} \ . \tag{5.35}$$

Somit gilt

$$\underline{\underline{R}} = \frac{1}{(\omega + i0^{+})^{2} - (\underline{\underline{M}_{0}} + \underline{\underline{N}})} = \frac{1}{(\omega + i0^{+})^{2} - \underline{\underline{M}_{0}}} \frac{1}{1 - \underline{\underline{\underline{M}}_{0}}}$$

$$= \underline{\underline{R}_{0}} \frac{1}{1 - \underline{\underline{N}}\underline{\underline{R}_{0}}} = \underline{\underline{R}_{0}} \sum_{n=0}^{\infty} (\underline{\underline{N}}\underline{\underline{R}_{0}})^{n}$$

$$= \underline{\underline{R}_{0}} + \underline{\underline{R}_{0}}\underline{\underline{N}}\underline{\underline{R}_{0}} + \underline{\underline{R}_{0}}\underline{\underline{N}}\underline{\underline{R}_{0}} + \cdots$$
(5.36a)

mit

$$\underline{\underline{R_0}} := \frac{1}{(\omega + i0^+)^2 - \underline{\underline{M_0}}} , \qquad (5.37)$$

wobei die geometrische Reihe

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x} \qquad \forall |x| < 1 \tag{5.38}$$

für Matrizen verwendet wurde. Da  $\underline{\underline{M_0}}$  eine Diagonalmatrix ist, ist  $\underline{\underline{R_0}}$  ebenfalls diagonal. Der Nichtdiagonalteil  $\underline{N}$  kann nach Gleichung (5.22) auch geschrieben werden als

$$\underline{N} = \underline{e_1}\underline{v}^T + \underline{v}\underline{e_1}^T = \begin{pmatrix}
0 & 2\frac{\tilde{g_0}}{\sqrt{N}} & 2\frac{\tilde{g_0}}{\sqrt{N}} & 2\frac{\tilde{g_0}}{\sqrt{N}} & \cdots & 2\frac{\tilde{g_k}}{\sqrt{N}} & 2\frac{\tilde{g_k}}{\sqrt{N}} & 2\frac{\tilde{g_k}}{\sqrt{N}} & \cdots \\
2\frac{\tilde{g_0}}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\
2\frac{\tilde{g_0}}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\
2\frac{\tilde{g_0}}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \\
2\frac{\tilde{g_k}}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\
2\frac{\tilde{g_k}}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\
2\frac{\tilde{g_k}}{\sqrt{N}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots \\
\vdots & \ddots
\end{pmatrix} (5.39)$$

mit dem Wechselwirkungsvektor

$$\underline{v} = \frac{2}{\sqrt{N}} (0, \tilde{g}_0, \tilde{g}_0, \tilde{g}_0, \cdots, \tilde{g}_k, \tilde{g}_k, \tilde{g}_k, \cdots)^T \qquad \forall k \in [0, \pi] \ . \tag{5.40}$$

Aufgrund der Form von  $\underline{\underline{N}}$  und der Diagonalität von  $\underline{\underline{R_0}}$  haben alle Summanden in Gleichung (5.36b), welche eine ungerade Anzahl von  $\underline{\underline{N}}$  beinhalten, nur dort endliche Beiträge, wo  $\underline{\underline{N}}$  selber endlich ist. Alle Summanden mit gerader Anzahl von  $\underline{\underline{N}}$  können nur dort endlich Beiträge haben, wo die Beiträge von  $\underline{\underline{N}}$  null sind und sind somit blockdiagonal.

Wir beschränken uns hier darauf die Änderung der ursprünglichen Phononmode, sprich das (1,1)-Element von  $\underline{R}$ , zu betrachten. Da  $(\underline{N})_{1,1}=0$  ist, tragen hier also nur Terme mit gerader Anzahl von  $\underline{N}$  bei. Aus diesem Grund kann direkt ein Term der Form

$$\underline{\underline{N}} \underline{R_0} \underline{\underline{N}} = (\underline{e_1} \underline{v}^T + \underline{v} \underline{e_1}^T) \underline{R_0} (\underline{e_1} \underline{v}^T + \underline{v} \underline{e_1}^T)$$
(5.41a)

$$= \underline{e_1}\underline{v}^T R_0 \underline{e_1}\underline{v}^T + \underline{e_1}\underline{v}^T R_0 \underline{v}\underline{e_1}^T + \underline{v}\underline{e_1}^T R_0 \underline{e_1}\underline{v}^T + \underline{v}\underline{e_1}^T R_0 \underline{v}\underline{e_1}^T$$
 (5.41b)

betrachtet werden. Die beiden äußeren Vektoren der Terme aus Gleichung (5.41b) bestimmen dabei die Position des Terms innerhalb der Matrix. Das (1,1)-Element lautet dementsprechend

$$(\underline{\underline{N}}\underline{R_0}\underline{\underline{N}})_{1,1} = \underline{\underline{v}}^T\underline{R_0}\underline{\underline{v}} =: \sigma(\omega). \tag{5.42}$$

Das (1, 1)-Element der Resolvente lautet demnach

$$(\underline{\underline{R}})_{1,1} = r_0 + r_0 \sigma(\omega) r_0 + r_0 \sigma(\omega) r_0 \sigma(\omega) r_0 = r_0 \sum_{n=0}^{\infty} (\sigma(\omega) r_0)^n = \frac{1}{\frac{1}{r_0} - \sigma(\omega)}, \qquad (5.43)$$

wobei

$$r_0 = \frac{1}{(\omega + i0^+)^2 - \omega_{\rm Ph}^2} \tag{5.44}$$

nach Gleichung (5.37) das (1,1)-Element von  $\underline{\underline{R_0}}$  ist. Bei  $\sigma(\omega)$  handelt es sich somit, entsprechend der Dyson-Gleichung (2.50), um die Selbstenergie der transformierten Phononmode.

## 5.3.1 Berechnung der Selbstenergie

Zur weiteren Analyse soll nun die Selbstenergie  $\sigma(\omega)$  analytisch berechnet werden. Mittels

$$\underline{\underline{R_0}} = \operatorname{diag}\left(\frac{1}{(\omega + i0^+)^2 - \omega_{Ph}^2}, \cdots, \frac{1}{(\omega + i0^+)^2 - 4\omega_k^2}, \frac{1}{(\omega + i0^+)^2 - 4\omega_k^2}, \frac{1}{(\omega + i0^+)^2 - 4\omega_k^2}, \cdots\right)$$
(5.45)

und dem Ausdruck (5.40) lässt sich die Selbstenergie (5.42) als

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{k,\alpha} \frac{(2\tilde{g}_k)^2}{(\omega + i0^+)^2 - 4\omega_k^2} = \frac{3}{N} \sum_k \frac{(2\tilde{g}_k)^2}{(\omega + i0^+)^2 - 4\omega_k^2}$$
 (5.46)

schreiben. Dieser Ausdruck wird im Kontinuumslimes

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{\pi} \to \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\pi} dq \tag{5.47}$$

zu

$$\sigma(\omega) = \frac{3}{2\pi} \int_0^{\pi} dq \frac{(2\tilde{g}_q)^2}{(\omega + i0^+)^2 - 4\omega_q^2} \ . \tag{5.48}$$

Durch  $\tilde{g}_q$  tritt ein Faktor von  $\frac{1}{2}$  an den Intergrationsgrenzen auf, was im Sinne des Kontinuumslimes eine gute Eigenschaft ist. Daher wird im Weiteren mit

$$g_q = gy_q'\sqrt{2\omega_{\rm Ph}\omega_q} \qquad \forall q \tag{5.49}$$

gerechnet. Zudem wird die Substitution

$$u = \cos(q)$$
  $\frac{du}{dq} = -\sin(q) = -\sqrt{1 - u^2}$  (5.50a)

$$\Rightarrow \int_0^{\pi} dq = -\int_{\cos(0)=1}^{\cos(\pi)=-1} \frac{du}{\sqrt{1-u^2}} = \int_{-1}^1 \frac{du}{\sqrt{1-u^2}}$$
 (5.50b)

verwendet. Daher folgt für die Dispersion und  $y_q^\prime$ 

$$\omega_q = J\sqrt{1 - \lambda u} \qquad y_q' = \frac{\lambda}{2} \frac{u}{\sqrt{1 - \lambda u}}.$$
 (5.51)

Wird dies in  $\sigma(\omega)$  eingesetzt, ergibt sich

$$\sigma(\omega) = \frac{3g^2 \omega_{Ph}}{\pi} \int_{-1}^{1} \frac{du}{\sqrt{1 - u^2}} \left(\frac{\lambda}{2}\right)^2 \frac{u^2}{|1 - \lambda u|} J\sqrt{1 - \lambda u} \frac{1}{\left(\frac{\omega + i0^+}{2}\right)^2 - J^2(1 - \lambda u)}$$
 (5.52a)

$$=:A \int_{-1}^{1} \frac{du}{\sqrt{1-u^2}} \frac{u^2}{\sqrt{1-\lambda u}} \frac{1}{a+u}$$
 (5.52b)

mit

$$A := \frac{3\lambda g^2 \omega_{Ph}}{4\pi J} \qquad a := \frac{(\omega + i0^+)^2 - 4J^2}{4J^2 \lambda} \ . \tag{5.52c}$$

Über

$$\frac{u^2}{a+u} = u - a + \frac{a^2}{a+u} \tag{5.53}$$

wird die Integration in Gleichung (5.52c) in drei einfachere Integrale aufgeteilt

$$\sigma(\omega) = -aI_1 + I_2 + a^2I_3 \tag{5.54a}$$

mit

$$I_{1} = \int_{-1}^{1} \frac{du}{\sqrt{(1 - \lambda u)(1 - u^{2})}} = \frac{2}{\sqrt{1 + \lambda}} K\left(\frac{2\lambda}{1 + \lambda}\right)$$
 (5.54b)

$$I_2 = \int_{-1}^1 \frac{u du}{\sqrt{(1-\lambda u)(1-u^2)}} = \frac{2}{\lambda \sqrt{1+\lambda}} \left[ K\left(\frac{2\lambda}{1+\lambda}\right) - (1+\lambda) E\left(\frac{2\lambda}{1+\lambda}\right) \right] \tag{5.54c}$$

$$I_{3} = \int_{-1}^{1} \frac{du}{\sqrt{(1 - \lambda u)(1 - u^{2})}(a + u)} = \frac{2}{\sqrt{1 + \lambda}(a - 1)} \Pi\left(\frac{2}{1 - a}, \frac{2\lambda}{1 + \lambda}\right) \ . \tag{5.54d}$$

Die Umformung in die Elliptischen Integrale

$$K(m) = \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{(1 - mt^2)(1 - t^2)}}$$
 (5.55a)

$$E(m) = \int_0^1 \sqrt{\frac{(1 - mt^2)}{(1 - t^2)}} dt$$
 (5.55b)

$$\Pi(n,m) = \int_0^1 \frac{dt}{(1-nt^2)\sqrt{(1-mt^2)(1-t^2)}}$$
 (5.55c)

ist durch die Substitution

$$u = 2t^2 - 1 \qquad \Leftrightarrow \qquad t = \sqrt{\frac{1}{2}(x+1)}$$
 (5.56a)

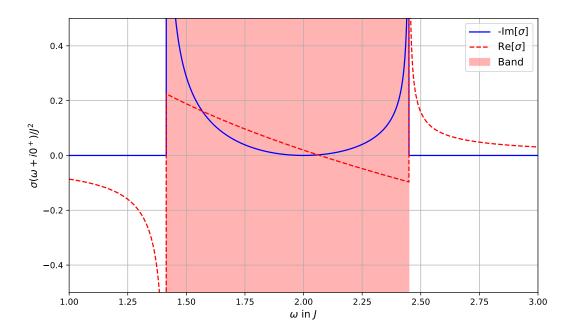
$$du = 4tdt$$
  $t(x = -1) = 0$   $t(x = 1) = 1$  (5.56b)

möglich. Bei den elliptischen Integralen handelt es sich um Standardintegrale zur Beschreibung von Systemen mit elliptischer Geometrie [54], welche in der Physik häufiger auftauchen. Die Selbstenergie wird über die elliptischen Integrale, welche gemäß Abschnitt 2.8 berechnet werden, bestimmt. Sie ist in Abbildung 5.5 zu sehen. Als verschwindenender Imaginärteil wird dabei  $0^+ = 1 \cdot 10^{-13}$  verwendet.

Die Signaturen des Phonon-Bitriplons lassen sich nun als die Polstellen der Resolvente (5.43) bestimmen beziehungsweise als die Nullstellen der inversen Resolvente

$$\frac{1}{r(\omega + i0^{+})} = (\omega + i0^{+})^{2} - \omega_{\rm Ph}^{2} - \text{Re}[\sigma(\omega + i0^{+})] \stackrel{!}{=} 0.$$
 (5.57)

Die Nullstelle unterhalb der Bandkante muss somit der zuvor betrachteten äußeren Mode des Systems entsprechen. Daher ist in Abbildung 5.6 diese Nullstelle in Abhängigkeit von g im Vergleich mit der Phonon-Bitriplonmode aus der Diagonalisierung in Abschnitt 5.2 zu sehen. Wie zu erwarten, stimmt die Nullstelle der inversen Resolvente mit den Ergebnissen aus der Diagonalisierung überein.



**Abbildung 5.5:** Exemplarischer Verlauf der Selbstenergie  $\sigma(\omega+i0^+)$  für  $\omega_0=1,45J,\ g=0,5J$  und  $0^+=1\cdot 10^{-13}$ . Der Realteil ist in rot, der Imaginärteil in blau dargestellt. Das Spinband ist rot hinterlegt.

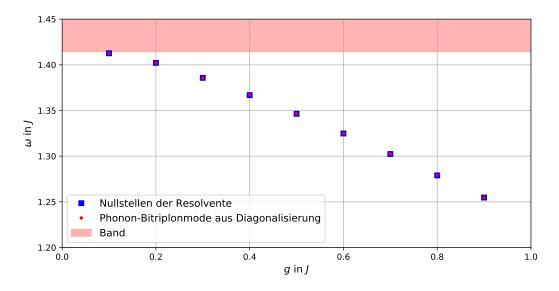


Abbildung 5.6: Die Nullstellen der Resolvente sind in blau gegen g aufgetragen, die äußere Phonon-Bitriplonmode aus der Diagonalisierung aus Abschnitt 5.2 in rot. Das Spinband ist rot hinterlegt.

Die Zustandsdichte  $\rho$  des Phonon-Bitriplons kann nun analog zu (2.52) über

$$\rho(\omega + i0^{+}) = -\text{Im}[r(\omega + i0^{+})] \tag{5.58}$$

bestimmt werden. Sie ist für verschiedene Werte von g in Abbildung 5.7(a) zu sehen. Dabei entspricht  $0^+$  in diesem Fall der typischen Zerfallsrate beziehungsweise der Linienbreite  $\gamma$  des Phonons  $0^+ = 0.02\omega_0$ . Außerhalb des Bandes bilden sich, wie zu erwarten, Peaks in der Nähe der jeweiligen Nullstelle der Resolvente. Für  $0^+ \to 0$  gehen diese in  $\delta$ -Peaks an den Nullstellen der Resolvente über. Durch die Wahl  $0^+ \equiv \gamma$  werden in diesem Fall jedoch dissipative Phononen betrachtet, welche denen aus dem J-Modell ähnlich sind. Im Bandinneren ist ein breiteres Kontinuum an Zuständen zu sehen, dessen Maximum sich für größer werdende g von der Phononfrequenz  $\omega_0 = 1,45J$  entfernt, wie es bereits vom Phonon-Bitriplon in Abbildung 4.9 bekannt ist. Aus diesem Grund wird in Abbildung 5.7(b) die Zustandsdichte  $\rho(\omega+i0^+)$  mit der entsprechenden Phononbesetzung  $n_{\rm Ph0}$  Daten des Phonon-Bitriplons verglichen. Gemäß der Ergebnisse aus Abbildung 5.4 werden dabei die Bewegungsgleichungen, welche den  $t^\dagger t$ -Term in  $H_{\rm SP}$  vernachlässigen, für eine Laseramplitude von  $a_l=0,001\omega_0$  verwendet.

In der Abbildung 5.7 ist zu sehen, dass der Phonon-Bitriplonansatz sich vor allem qualitativ sehr gut eignet um das Phonon-Bitriplon zu beschreiben. Die Peakpositionen außerhalb des Spinbandes stimmen für den Phonon-Bitriplonansatz und das Phonon-Bitriplon aus den Bewegungsgleichungen relativ gut überein. Die Maxima im Inneren des Bandes liegen für das Phonon-Bitriplon aus den Bewegungsgleichungen bei etwas höheren Frequenzen als die entsprechenden Maxima der Zustandsdichte  $\rho(\omega+i0^+)$ . Aufgrund der unterschiedlichen Näherungen sowie der Tatsache, dass in einem Fall Zustände im Gleichgewicht und im anderen Fall die Besetzung von Zuständen im Nicht-Gleichgewicht betrachtet werden, ist es allerdings nicht verwunderlich, dass es zu leichten quantitativen unterschieden kommt.

Alles in allem wurde mit dem Phonon-Bitriplonansatz eine starke Näherung gefunden, die das Spin-Phononsystem in seinem Gleichgewicht beschreibt. Durch Vergleich mit dem Ansatz der Bewegungsgleichungen aus Ref. [1] und [2] kann zudem sehr gut der direkte Einfluss des Treibens auf das System weiter erforscht werden.

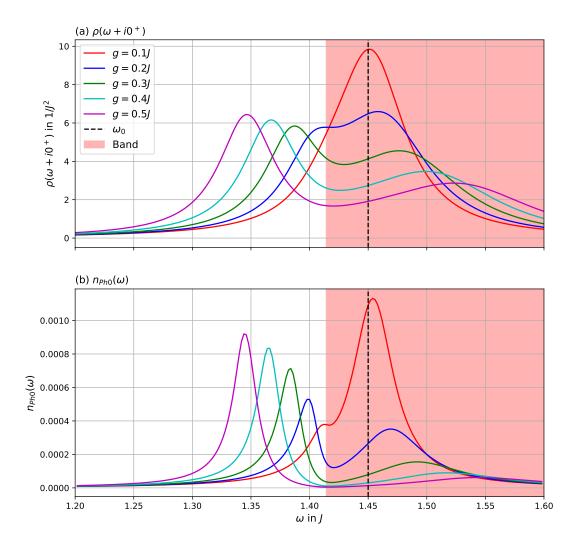


Abbildung 5.7: Die Zustandsdichte  $\rho(\omega+i0^+)$  in (a) sowie die mittlere Phononbesetzung  $n_{\rm Ph0}$  des Phonon-Bitriplon in (b) sind für verschiedene g gegen die Frequenz aufgetragen. Die Phononfrequenz  $\omega_0=1,45J$  ist durch die schwarz gestrichelte Linie gekennzeichnet. Als verschwindender Imaginärteil wird für die Zustandsdichte in (a)  $0^+=0,02\omega_0$  verwendet. Das Phonon-Bitriplon in (b) wird, wie in Abbildung 5.3(a), unter Vernachlässigung des  $t^\dagger t$ -Terms betrachtet. Um Vergleichbare Daten zu generieren wird gemäß Abbildung 5.4  $a_l=0,001\omega_0$  verwendet.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde die Eigenschaften einer getriebenen dimerisierten Spin-1/2 Kette auf verschiedene Arten untersucht. Zunächst wurden in Abschnitt 4.1 und 4.2 die grundlegenden bisherigen Untersuchungen aus Ref. [2] und [1] zum besseren Verständnis der folgenden Ergebnisse wiederholt. Zudem wurde in Abschnitt 4.3 das J'-Modell angeschnitten, welches eine zum J-Modell verschiedene Kopplung des Spinsystems durch das infrarot-aktive Phonon hat. Es zeigt größtenteils ähnliche Eigenschaften wie das J-Modell. Dennoch kann es, wie in Ref. [51] gezeigt, zu erheblichen Unterschieden zwischen J- und J'-Modell in den Resonanzmoden des Systems kommen. Es erscheint daher durchaus sinnvoll, ein kombiniertes Modell in Betracht zu ziehen. In Abschnitt 4.4 wurde analog zu Ref. [3] eine Untersuchung des Systems für den Bereich starker Spin-Phononkopplung  $g \in [0,1,0,5]$  durchgeführt. Zudem wurde die ebenfalls in Ref. [3] entdeckte Phonon-Bitriplon Mode vorgestellt, welche viele interessante Eigenschaften im Bereich starker Spin-Phononkopplung aufweist.

In Abschnitt 4.5 wird das System anstelle des Treibens durch ein stationäres Laserfeld mit Laserpulsen aus seinem Gleichgewicht gebracht. Dieser Ansatz ist vollständig neu und hat auf eine interessante, langsame Oszillation zwischen Spin- und Phononsystem aufmerksam gemacht. Aufgrund ihrer linearen Abhängigkeit von g wird von dieser Oszillation angenommen, dass es sich um eine Schwebung intrinsischer Moden des Spin-Phonon Systems handelt. Ein Nachweis dafür, dass es sich um solch eine Schwebung handelt, steht jedoch noch aus. Ein vielversprechender Ansatz scheint hier der Vergleich mit der langsamen Oszillation im Einschwingvorgang des stationär getriebenen Systems zu sein, wie er zu Beginn von Abschnitt 4.5 erwähnt wurde. Dieser Zusammenhang sollte genauer untersucht werden, ebenso wie die Abhängigkeit dieser Schwebung von der Anregungsfrequenz  $\omega_0$ .

In Abschnitt 5 wird ein neuartiger Ansatz über die Bitriplonoperatoren  $B_k$  und  $B_k^{\dagger}$  gemacht. Usprünglich war dieser Ansatz ebenfalls zur Erklärung der Schwebung gedacht, jedoch scheint er sich wesentlich besser dazu zu eignen, das Phonon-Bitriplon aus Abschnitt 4.4.1 genauer zu untersuchen. Dass dieses im Phonon-Bitriplonansatz mit einer nahezu quantitativen Übereinstimmung (siehe Abbildung 5.4) im Vergleich mit den Ergebnissen aus dem J-Modell zu finden ist, ist zunächst eine starke Rechtfertigung für diejenigen Näherungen, in denen die beiden Ansätze unterscheiden. Zudem konnten in Abschnitt 5.2.1 interessante neue Einsichten über die Entartung und das allgemeine Verhalten der Moden unter Änderung der Spin-Phononkopplung gewonnen werden. Mit dem analytischen Ansatz aus Abschnitt 5.3 wurde zudem ein weiterer vielversprechender Ansatz zur Beschreibung des Phonon-Bitriplon gemacht. Durch diesen ist es möglich, die Zustandsdichte der Phonon-Bitriplonmode zu berechenen und einen direkten Vergleich zu den Ergebnissen des Phonon-Bitriplons aus Abschnitt 4.4.1 zu schaffen. Da die Phonon-Bitriplonnäherung das System im Gleichgewicht betrachtet, lässt sich durch den Vergleich mit dem J-Modell im Nicht-Gleichgewicht ein Eindruck davon gewinnen, wie sich das Treiben auf die Eigenschaften des Systems auswirkt. In diese Richtung bietet die Phonon-Bitriplonnäherung ein großes Potential für weiterführende Forschung. Der größte Unterschied zwischen dem J-Modell und der Phonon-Bitriplonnäherung ist der  $t^{\dagger}t$ -Beitrag in der Spin-Phononkopplung. Es kann daher durchaus intressant sein, die Phonon-Bitriplonnäherung auch auf das J'-Modell anzuwenden,

da dieses von seiner Natur aus einen kleineren  $t^{\dagger}t$ -Beitrag in der Spin-Phononkopplung mit sich bringt.

Die Ergebnisse dieser Arbeit wurden für T=0 generiert. Dies ist in der realen Welt nicht möglich, daher erscheint es sinnvoll, das System auf kleine, jedoch endliche Temperauren zu erweitern. Ein möglicher Ansatz dazu ist ein zusätzliches Wärmebad, wie es in Ref. [2] bereits verwendet wird.

Die Lindbladoperatoren  $t_k$  und  $t_k^{\dagger}$ , welche für die  $A_l$  aus Abschnitt 2.5 gewählt werden, erhalten den Spin nicht. In dieser Arbeit wurde argumentiert, dass dies für das betrachtete System vernachlässigbar, wenn auch nicht physikalisch akkurat, ist. Die Spin erhaltenden Alternativen wie beispielsweise  $t_k^{\dagger}t_q$  und  $t_q^{\dagger}t_k$  sind jedoch vor allem von der numerischen Seite wesentlich aufwendiger, da die Menge der zu lösenden Bewegungsgleichungen hier mit  $N^2$  anstatt mit N steigt. Dennoch sollte in weiterführenden Arbeiten auch ein solches, physikalisch akkurateres Modell in Betracht gezogen werden.

Alles in allem hat diese Arbeit durch die Betrachtung der Gaußförmigen Pulse und vor allem durch den Phonon-Bitriplonansatz interessante neue Einsichten in die Dynamik der getriebenen, dissipativen, dimerisierten Spin-1/2 Kette gebracht und zudem neue Möglichkeiten für anknüpfende Arbeiten geschaffen.

# A Vollständige Rechnung zur Diagonalisierung des Spinanteils

In diesem Abschnitt wird die vollständigen Berechnung des Hamiltonoperators gezeigt. Zunächst werden dazu der Intradimeranteil  $\vec{S}_{1,j}\vec{S}_{2,j}$  und der Interdimeranteil  $\vec{S}_{2,j}\vec{S}_{1,j+1}$  der Spinabhängigkeit durch die Triplonoperatoren ausgedrückt.

## A.1 Die Spinoperatoren als Triplonoperatoren

Begonnen wird mit der Intradimerkopplung, für welche nach (2.26)

$$\sum_{j} J \vec{S}_{1,j} \vec{S}_{2,j} = -J \frac{3N}{4} + \sum_{\alpha,j} J t_{\alpha,j}^{\dagger} t_{\alpha,j}$$
 (A.1)

gilt. Unter der Fouriertransformation (2.17) mit der Identität (2.18) gilt somit

$$\sum_{j} J \vec{S}_{1,j} \vec{S}_{2,j} = -J \frac{3N}{4} + \sum_{k,\alpha} J t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha}$$
 (A.2)

Eine explizite Rechnung dazu kann in Ref. [1] Anhang A bzw. Ref. [2] Anhang A gefunden werden. Für die Interdimerkopplung gilt

$$\vec{S}_{2,j}\vec{S}_{1,j+1} = \sum_{\alpha} S_{2,j}^{\alpha} S_{1,j+1}^{\alpha} \tag{A.3a}$$

$$\begin{split} &= \frac{1}{4} \sum_{\alpha} \left( -(t_{\alpha,j} + t_{\alpha,j}^{\dagger}) - i \sum_{\beta \zeta} \epsilon_{\alpha\beta\zeta} t_{\beta,j}^{\dagger} t_{\zeta,j} \right) \\ & \left( (t_{\alpha,j+1} + t_{\alpha,j+1}^{\dagger}) - i \sum_{\beta \zeta} \epsilon_{\alpha\beta\zeta} t_{\beta,j+1}^{\dagger} t_{\zeta,j+1} \right) \; . \end{split} \tag{A.3b}$$

Hier werden jeweils nur die bilinearen Terme

$$=\frac{1}{4}\sum_{\alpha}-(t_{\alpha,j}+t_{\alpha,j}^{\dagger})(t_{\alpha,j+1}+t_{\alpha,j+1}^{\dagger}) \tag{A.3c}$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{\alpha} -t_{\alpha,j} t_{\alpha,j+1} - t_{\alpha,j}^{\dagger} t_{\alpha,j+1} - t_{\alpha,j} t_{\alpha,j+1}^{\dagger} - t_{\alpha,j}^{\dagger} t_{\alpha,j+1}^{\dagger}$$
 (A.3d)

verwendet. Nun wird dieser Ausdruck ebenfalls fouriertransformiert. Dabei wird die Gitterkonstante auf 1 gesetzt, sodass  $r_{j+1}=r_j+1$  gilt. Dadurch folgt

$$\sum_{j} \vec{S}_{2,j} \vec{S}_{2,j+1} = \sum_{j} \frac{1}{4} \sum_{\alpha} -t_{\alpha,j} t_{\alpha,j+1} - t_{\alpha,j}^{\dagger} t_{\alpha,j+1} - t_{\alpha,j} t_{\alpha,j+1}^{\dagger} - t_{\alpha,j}^{\dagger} t_{\alpha,j+1}^{\dagger}$$
(A.4a)

$$= -\frac{1}{4N} \sum_{j,\alpha,k,k'} t_{k,\alpha} t_{k',\alpha} e^{i(k+k')r_j} e^{ik'} + t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k',\alpha} e^{i(-k+k')r_j} e^{ik'}$$
(A.4b)

$$+t_{k,\alpha}t_{k',\alpha}^{\dagger}e^{i(k-k')r_{j}}e^{-ik'}+t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k',\alpha}^{\dagger}e^{-i(k+k')r_{j}}e^{-ik'}$$

$$=-\frac{1}{4}\sum_{\alpha,k}t_{k,\alpha}t_{-k,\alpha}e^{ik}+t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}e^{ik}+\underbrace{t_{k,\alpha}t_{k,\alpha}^{\dagger}}_{t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha}+1}e^{-ik}+t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{-k,\alpha}e^{-ik}\;. \tag{A.4c}$$

Aufgrund der Symmetrie in k kann  $e^{\pm ik} = \frac{1}{2}(e^{ik} + e^{-ik}) = \cos(k)$  verwendet werden

$$\sum_{j} \vec{S}_{2,j} \vec{S}_{2,j+1} = -\frac{1}{4} \sum_{\alpha,k} t_{k,\alpha} t_{-k,\alpha} \cos(k) + 2t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha} \cos(k) + \cos(k) + t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha} \cos(k) \quad (A.4d)$$

$$= -\frac{1}{4}\sum_{\alpha,k}\cos(k)\left(2t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha} + t_{k,\alpha}t_{-k,\alpha} + t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{-k,\alpha}^{\dagger}\right) - \frac{3}{4}\sum_{k}\cos(k)\ . \tag{A.4e}$$

### A.2 Diagonalisierung durch die Bogoliubovtransformation

Über die Ausdrücke (A.2) und (A.4e) lässt sich nun der reine Spin Hamiltonoperator  $H_S$  nach Gleichung (3.3) schreiben als

$$H_S = J \sum_{k,\alpha} t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha} - \frac{1}{4} \sum_{k,\alpha} \cos(k) \left( 2t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha} + t_{k,\alpha} t_{-k,\alpha} + t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha}^{\dagger} \right) . \tag{A.5}$$

Hierbei wurden die Konstanten vernachlässigt, da für die Bewegungsgleichungen nur der Kommutator mit H betrachtet wird.  $H_S$  kann nun mit Hilfe einer Bogoliubovtransformation wie in Abschnitt 2.2.2 diagonalisiert werden

$$\begin{split} H_S = &J \sum_{k,\alpha} (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{-k,\alpha} \sinh(\Theta_k)) (\tilde{t}_{k,\alpha} \cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \sinh(\Theta_k)) \\ &- \frac{J'}{4} \sum_{k,\alpha} \cos(k) \left[ 2 (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{-k,\alpha} \sinh(\Theta_k)) (\tilde{t}_{k,\alpha} \cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \sinh(\Theta_k)) \\ &+ (\tilde{t}_{k,\alpha} \cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \sinh(\Theta_k)) (\tilde{t}_{-k,\alpha} \cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \sinh(\Theta_k)) \\ &+ (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{-k,\alpha} \sinh(\Theta_k)) (\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{k,\alpha} \sinh(\Theta_k)) \right] \\ &+ (\lambda.6a) \end{split}$$

$$=:H_{\text{Zeile 1, 2}} + H_{\text{Zeile 3, 4}}$$
 (A.6b)

Dabei lassen sich die ersten beiden Zeilen aus Gleichung (A.6a) umschreiben zu

$$H_{\text{Zeile 1, 2}} = \sum_{k,\alpha} \left( J - \frac{J' \cos(k)}{2} \right)$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} \cosh^{2}(\Theta_{k}) + \tilde{t}_{-k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \sinh^{2}(\Theta_{k}) \\ + (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) \sinh(\Theta_{k}) \cosh(\Theta_{k}) \end{bmatrix} , \tag{A.7}$$

während die letzten beiden Zeilen zu

$$\begin{split} H_{\text{Zeile }3,\,4} = & \sum_{k,\alpha} -\frac{J'\cos(k)}{4} \left[ (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) (\sinh^{2}(\Theta_{k}) + \cosh^{2}(\Theta_{k})) \right. \\ & \left. + (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{-k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}) \sinh(\Theta_{k}) \cosh(\Theta_{k}) \right] \end{split} \tag{A.8}$$

werden. Zur Diagonalisierung des Hamiltonoperators müssen die  $(\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}+\tilde{t}_{k,\alpha}\tilde{t}_{-k,\alpha})$ -Terme aus Gleichung (A.7) und (A.8) zusammen verschwinden. Dies führt zu der Bedingung

$$\begin{split} \left(J - \frac{J'\cos(k)}{2}\right) \sinh(\Theta_k) \cosh(\Theta_k) & \stackrel{!}{=} \frac{J'\cos(k)}{4} (\sinh^2(\Theta_k) + \cosh^2(\Theta_k)) \\ \Leftrightarrow \sinh(\Theta_k) \cosh(\Theta_k) & \stackrel{!}{=} \frac{\lambda \cos(k)}{4} (\sinh^2(\Theta_k) + 2\sinh(\Theta_k) \cosh(\Theta_k) + \cosh^2(\Theta_k)) \\ & = (\sinh(\Theta_k) + \cosh(\Theta_k))^2 \end{split} \tag{A.9a}$$

$$\Leftrightarrow (e^{\Theta_k} - e^{-\Theta_k})(e^{\Theta_k} + e^{-\Theta_k}) \stackrel{!}{=} \frac{\lambda \cos(k)}{4} (e^{\Theta_k} + e^{-\Theta_k} + e^{\Theta_k} - e^{-\Theta_k})^2 \tag{A.9c}$$

$$\Leftrightarrow (e^{2\Theta_k} - e^{-2\Theta_k}) \stackrel{!}{=} \lambda \cos(k) e^{2\Theta_k} \tag{A.9d}$$

$$e^{-2\Theta_k} \stackrel{!}{=} \sqrt{1 - \lambda \cos(k)} \ . \tag{A.9e}$$

Durch diese Bedingung können nun wiederum die Ausdrücke

$$\begin{split} (\sinh^2(\Theta_k) + \cosh^2(\Theta_k)) &= \frac{1}{4} (e^{\Theta_k} - e^{-\Theta_k})^2 + e^{\Theta_k} + e^{-\Theta_k})^2) \\ &= \frac{1}{2} (e^{2\Theta_k} + e^{-2\Theta_k}) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{1 - \lambda \cos(k)}} + \sqrt{1 - \lambda \cos(k)} \right) \\ &= \frac{1 - \frac{\lambda}{2} \cos(k)}{\sqrt{1 - \lambda \cos(k)}} =: y_k \end{split} \tag{A.10}$$

sowie

$$\begin{split} \sinh(\Theta_k)\cosh(\Theta_k) &= \frac{1}{4}(e^{\Theta_k} - e^{-\Theta_k})(e^{\Theta_k} + e^{-\Theta_k}) \\ &= \frac{1}{4}(e^{2\Theta}_k - e^{-2\Theta_k}) = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{1 - \lambda\cos(k)}} - \sqrt{1 - \lambda\cos(k)}\right) \\ &= \frac{1}{2}\frac{\frac{\lambda}{2}\cos(k)}{\sqrt{1 - \lambda\cos(k)}} =: \frac{1}{2}y_k' \end{split} \tag{A.11}$$

für  $\sinh(\Theta_k)$  und  $\cosh(\Theta_k)$  gefunden werden. Dadurch können, unter Berücksichtigung der Symmetrie in k, die Diagonalelemente aus Gleichung (A.7)

$$\begin{split} H_{\text{Zeile 1, 2; diagonal}} &= \sum_{k,\alpha} \left( J - \frac{J' \cos(k)}{2} \right) \left( \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} \cosh^2(\Theta_k) + \tilde{t}_{-k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \sinh^2(\Theta_k) \right) \\ &= \sum_{k,\alpha} \left( J - \frac{J' \cos(k)}{2} \right) \left( \sinh^2(\Theta_k) + \cosh^2(\Theta_k) \right) \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \text{const.} \\ &= \sum_{k,\alpha} y_k \left( J - \frac{J' \cos(k)}{2} \right) \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} \end{split} \tag{A.12}$$

und aus Gleichung (A.8)

$$\begin{split} H_{\text{Zeile 3, 4; diagonal}} &= \sum_{k,\alpha} -\frac{J' \cos(k)}{4} (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{-k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}) \sinh(\Theta_k) \cosh(\Theta_k) \\ &= \sum_{k,\alpha} -J' \cos(k) \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} \frac{y_k'}{2} + \text{const.} \\ &= \sum_{k,\alpha} -y_k' \frac{J' \cos(k)}{2} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \text{const.} \end{split}$$

$$(A.13)$$

gefunden werden. Damit ergibt sich für den gesamten Spin Hamiltonoperator

$$\begin{split} H_{\mathrm{S}} &= \sum_{k,\alpha} J \left( y_k - \frac{\lambda \cos(k)}{2} (y_k + y_k') \right) \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \mathrm{const.} \\ &=: \sum_{k,\alpha} \omega_k \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \mathrm{const.} \end{split} \tag{A.14}$$

mit der Dispersion

$$\begin{split} \omega_k &= J \left( \frac{1 - \frac{\lambda}{2} \cos(k)}{\sqrt{1 - \lambda \cos(k)}} - \frac{\lambda \cos(k)}{2} \left( \frac{1 - \frac{\lambda}{2} \cos(k)}{\sqrt{1 - \lambda \cos(k)}} + \frac{\frac{\lambda}{2} \cos(k)}{\sqrt{1 - \lambda \cos(k)}} \right) \right) \\ &= J \sqrt{1 - \lambda \cos(k)} \ . \end{split} \tag{A.15}$$

## A.3 Die Spin-Phonon Kopplung

Neben dem reinen Spin Hamitonoperator ist auch der Hamiltonoperator der Spin-Phonon Kopplung abhängig von den Spinoperatoren. Daher wird dieser ebenfalls durch die Triplonoperatoren ausgedrückt. Dies geschieht zunächst für die Spin-Phonon Kopplung im J-Modell und dann für die im J'-Modell

#### A.3.1 Spin-Phonon Kopplung im *J*-Modell

Im J-Modell lautet der Hamiltonoperator der Spin-Phonon Kopplung

$$H_{\rm SP} = g \sum_{j} (b_j^{\dagger} + b_j) \vec{S}_{1,j} \vec{S}_{2,j} = gd \sum_{j} \vec{S}_{1,j} \vec{S}_{2,j} \ . \tag{A.16}$$

Über den Audruck (A.2) für die Intradimerkopplung ergibt sich

$$H_{\rm SP} = gd \sum_{k,\alpha} t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha} + {\rm const.}$$
 (A.17)

Dieser verhält sich unter der Bogoliubovtransformation analog zu Gleichung (A.7) wie

$$\begin{split} H_{\mathrm{SP}} = & gd \sum_{k,\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} \cosh^{2}(\Theta_{k}) + \tilde{t}_{-k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \sinh^{2}(\Theta_{k}) \\ & + (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) \sinh(\Theta_{k}) \cosh(\Theta_{k}) + \mathrm{const.} \\ = & gd \sum_{k,\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} (\sinh^{2}(\Theta_{k}) + \cosh^{2}(\Theta_{k})) \\ & + (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) \sinh(\Theta_{k}) \cosh(\Theta_{k}) + \mathrm{const.} \\ = & gd \sum_{k,\alpha} y_{k} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \frac{y_{k}'}{2} (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) + \mathrm{const.} \end{split}$$

### A.3.2 Spin-Phonon Kopplung im J'-Modell

Im J'-Modell lautet der Hamiltonoperator der Spin-Phonon Kopplung

$$H_{\rm SP} = g \sum_{j} (b_j^{\dagger} + b_j) \vec{S}_{2,j} \vec{S}_{1,j+1} = gd \sum_{j} \vec{S}_{2,j} \vec{S}_{1,j+1} . \tag{A.19}$$

Über den Audruck (A.4e) für die Interdimerkopplung ergibt sich

$$H_{\rm SP} = \frac{-gd}{4} \sum_{k,\alpha} \cos(k) (2t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{k,\alpha} + t_{k,\alpha}^{\dagger} t_{-k,\alpha}^{\dagger} + t_{k,\alpha} t_{-k,\alpha}) + \text{const.} . \tag{A.20}$$

Dabei ergibt sich analog zu (A.18)

$$t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{k,\alpha} = y_{k}\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{k,\alpha} + \frac{y_{k}^{\prime}}{2}(\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha}\tilde{t}_{-k,\alpha}) + \text{const.}$$
 (A.21)

und zudem

$$\begin{split} t_{k,\alpha}t_{-k,\alpha} + t_{k,\alpha}^{\dagger}t_{-k,\alpha}^{\dagger} = & (\tilde{t}_{k,\alpha}\cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\sinh(\Theta_k))(\tilde{t}_{-k,\alpha}\cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\sinh(\Theta_k)) \\ & + (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{-k,\alpha}\sinh(\Theta_k))(\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\cosh(\Theta_k) + \tilde{t}_{k,\alpha}\sinh(\Theta_k)) \\ = & (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha}\tilde{t}_{-k,\alpha})(\sinh^2(\Theta_k) + \cosh^2(\Theta_k)) \\ & + (\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{k,\alpha} + \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha} + \tilde{t}_{k,\alpha}\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{-k,\alpha}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger})\sinh(\Theta_k)\cosh(\Theta_k) \\ = & y_k(\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha}\tilde{t}_{-k,\alpha}) + 2y_k'\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{k,\alpha} + \text{const.} \; . \end{split} \tag{A.22}$$

Somit ergibt sich für die Spin-Phonon Kopplung

$$\begin{split} H_{\mathrm{SP}} &= \frac{-gd}{4} \sum_{k,\alpha} \cos(k) (y_k + y_k') (2 \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) \\ &= -\sum_{k,\alpha} \frac{gd}{2\lambda} y_k' (2 \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) \;. \end{split} \tag{A.23}$$

# B Vollständige Rechnung zur Bestimmung der Bewegungsgleichungen des *J*-Modells

In diesem Abschnitt ist die Vollständige mathematische Berechnung der Bewegungsgleichungen des J-Modells zu sehen. Diese werden nach Abschnitt 2.5 über die Lindblad Master Gleichungen

$$\begin{split} \frac{d}{dt} \left\langle O_{\mathrm{H}}(t) \right\rangle &= i \left\langle [H, O_{\mathrm{H}}(t)] \right\rangle \\ &+ \sum_{l} \gamma_{l} \left[ \left\langle A_{l}^{\dagger} O_{\mathrm{H}}(t) A_{l} \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle A_{l}^{\dagger} A_{l} O_{\mathrm{H}}(t) \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle O_{\mathrm{H}}(t) A_{l}^{\dagger} A_{l} \right\rangle \right] \end{split} \tag{B.1}$$

bestimmt. Die verwendeten Erwartungswert lauten

$$q(t) = \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} (b_0 + b_0^{\dagger}) \right\rangle (t) \tag{B.2a}$$

$$p(t) = \left\langle \frac{i}{\sqrt{N}} (b_0^{\dagger} - b_0) \right\rangle (t) \tag{B.2b}$$

$$n_{\rm Ph}(t) = \left\langle \frac{1}{N} b_0^{\dagger} b_0 \right\rangle(t) \tag{B.2c}$$

für das Phononsystem und

$$u_{k}(t)=\left\langle u_{k}\right\rangle (t)=\left\langle \sum_{\alpha}\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{k,\alpha}\right\rangle (t)\tag{B.3a}$$

$$v_k(t) = \langle v_k \rangle (t) = \operatorname{Re} \left[ \langle \tilde{v}_k \rangle \right] (t) = \operatorname{Re} \left[ \left\langle \sum_{\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \right\rangle \right] (t) = \frac{1}{2} (\tilde{v}_k + \tilde{v}_k^{\dagger})$$
 (B.3b)

$$w_k(t) = \langle w_k \rangle (t) = \operatorname{Im} \left[ \langle \tilde{v}_k \rangle \right] (t) = \operatorname{Im} \left[ \left\langle \sum_{\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \right\rangle \right] (t) = \frac{1}{2i} (\tilde{v}_k - \tilde{v}_k^{\dagger}) . \tag{B.3c}$$

für das Spinsystem, wie aus Abschnitt 3.2.2 zu entnehmen. Zudem gilt

$$U(t) \coloneqq \sum_{k} y_k u_k(t) \tag{B.4a}$$

$$V(t) := \sum_{k=1}^{n} y_k' v_k(t) . \tag{B.4b}$$

Begonnen wird mit den Bewegungsgleichungen des Phononsystems.

# B.1 Berechnung der Phonon-Bewegungsgleichungen

Der Hamiltonoperator lautet

$$\begin{split} H &= H_{\rm P} + H_{\rm L} + H_{\rm SP,P} \\ &= \omega_0 b_0^\dagger b_0 + E(t) \sqrt{N} (b_0 + b_0^\dagger) + g \sqrt{N} (b_0 + b_0^\dagger) (U(t) + V(t)) \; . \end{split} \tag{B.5}$$

Dabei wurde

$$\sum_{k,\alpha} y_k \left( \left\langle \tilde{t}_{k,\alpha}^\dagger \tilde{t}_{k,\alpha} \right\rangle - n(\omega_k) \right) + \frac{1}{2} y_k' \left( \left\langle \tilde{t}_{k,\alpha}^\dagger \tilde{t}_{-k,\alpha}^\dagger \right\rangle + \left\langle \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha} \right\rangle \right) (t) = N(U(t) + V(t)) \tag{B.6}$$

verwendet. Mit den Lindbladoperatoren  $A_1=b_0^\dagger$  und  $A_2=b_0$  und den dazugehörigen Dämpfungskoeffizienten  $\gamma_1=\gamma n(\omega_0)=0$  und  $\gamma_2=\gamma(n(\omega_0)+1)=\gamma$  können nun die Bewgungsgleichungen berechnet werden. Die Berechnug der Bewegungsgleichungen wird auf vier Rechnungen aufgeteilt. Zunächst die drei Heisenbergteile

$$\begin{split} i \left\langle \left[ H_{\mathrm{P}}, q \right] \right\rangle (t) &= \frac{i}{\sqrt{N}} \omega_{0} \left\langle \left[ b_{0}^{\dagger} b_{0}, b_{0}^{\dagger} + b_{0} \right] \right\rangle (t) \\ &= \frac{i}{\sqrt{N}} \omega_{0} \left\langle b_{0}^{\dagger} \underbrace{\left[ b_{0}, b_{0}^{\dagger} + b_{0} \right]}_{=1} + \underbrace{\left[ b_{0}^{\dagger}, b_{0}^{\dagger} + b_{0} \right]}_{=-1} b_{0} \right\rangle (t) \\ &= \omega_{0} \left\langle \frac{i}{\sqrt{N}} (b_{0}^{\dagger} - b_{0}) \right\rangle (t) = \omega_{0} p(t) \\ i \left\langle \left[ H_{\mathrm{P}}, p \right] \right\rangle (t) &= \frac{-1}{\sqrt{N}} \omega_{0} \left\langle \left[ b_{0}^{\dagger} b_{0}, b_{0}^{\dagger} - b_{0} \right] \right\rangle (t) \\ &= \frac{-1}{\sqrt{N}} \omega_{0} \left\langle b_{0}^{\dagger} \underbrace{\left[ b_{0}, b_{0}^{\dagger} - b_{0} \right]}_{=1} + \underbrace{\left[ b_{0}^{\dagger}, b_{0}^{\dagger} - b_{0} \right]}_{=1} b_{0} \right\rangle (t) \\ &= -\omega_{0} \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} (b_{0} + b_{0}^{\dagger}) \right\rangle (t) = -\omega_{0} q(t) \\ i \left\langle \left[ H_{\mathrm{P}}, n_{\mathrm{Ph}} \right] \right\rangle (t) &= \frac{i}{N} \omega_{0} \left\langle \underbrace{\left[ b_{0}^{\dagger} b_{0}, b_{0}^{\dagger} b_{0} \right]}_{=0} \right\rangle (t) = 0 \end{split} \tag{B.7c}$$

sowie

$$\begin{split} i\left\langle \left[H_{\mathrm{L}},q\right]\right\rangle (t) &= iE(t)\left\langle\underbrace{\left[b_{0}^{\dagger}+b_{0},b_{0}^{\dagger}+b_{0}\right]}_{=0}\right\rangle (t) = 0 \\ i\left\langle \left[H_{\mathrm{L}},p\right]\right\rangle (t) &= -E(t)\left\langle\underbrace{\left[b_{0}^{\dagger}+b_{0},b_{0}^{\dagger}-b_{0}\right]}_{=2}\right\rangle (t) = -2E(t) \\ i\left\langle \left[H_{\mathrm{L}},n_{Ph}\right]\right\rangle (t) &= \frac{i}{\sqrt{N}}E(t)\left\langle\left[b_{0}^{\dagger}+b_{0},b_{0}^{\dagger}b_{0}\right]\right\rangle \\ &= \frac{i}{\sqrt{N}}E(t)\left\langle b_{0}^{\dagger}\underbrace{\left[b_{0}^{\dagger}+b_{0},b_{0}\right]}_{=-1} + \underbrace{\left[b_{0}^{\dagger}+b_{0},b_{0}^{\dagger}\right]}_{=1}b_{0}\right\rangle \\ &= -E(t)\left\langle\underbrace{\frac{i}{\sqrt{N}}(b_{0}^{\dagger}-b_{0})}_{=-1}\right\rangle = -E(t)p \end{split} \tag{B.8a}$$

und

$$i\langle [H_{\text{SP,P}}, q] \rangle(t) = 0 \quad |\text{analog zu (B.8a)}$$
 (B.9a)

$$i\left\langle \left[H_{\mathrm{SP,P}},p\right]\right\rangle (t) = -\left.g(U(t)+V(t))\left\langle \underbrace{\left[b_0^\dagger + b_0,b_0^\dagger - b_0\right]}_{=2}\right\rangle (t) = -2g(U(t)+V(t)) \tag{B.9b}$$

$$\begin{split} i \left\langle \left[ H_{\mathrm{SP,P}}, n_{Ph} \right] \right\rangle (t) &= \frac{i}{\sqrt{N}} g(U(t) + V(t)) \left\langle \left[ b_0^\dagger + b_0, b_0^\dagger b_0 \right] \right\rangle \\ &= \frac{i}{\sqrt{N}} g(U(t) + V(t)) \left\langle b_0^\dagger \underbrace{\left[ b_0^\dagger + b_0, b_0 \right]}_{=-1} + \underbrace{\left[ b_0^\dagger + b_0, b_0^\dagger \right]}_{=1} b_0 \right\rangle \\ &= -g(U(t) + V(t)) (t) \left\langle \frac{i}{\sqrt{N}} (b_0^\dagger - b_0) \right\rangle = -g(U(t) + V(t)) p \;. \end{split} \tag{B.9c}$$

Zuletzt der dissipative Teil

$$\begin{aligned} \text{Dissipator}[q(t)] &= \gamma \left[ \left\langle b_0^\dagger q b_0 \right\rangle(t) - \frac{1}{2} \left\langle b_0^\dagger b_0 q \right\rangle(t) - \frac{1}{2} \left\langle q b_0^\dagger b_0 \right\rangle(t) \right] \\ &= \gamma \frac{1}{\sqrt{N}} \left\langle b_0^\dagger (b_0^\dagger + b_0) b_0 - \frac{1}{2} (b_0^\dagger b_0 (b_0^\dagger + b_0) + (b_0^\dagger + b_0) b_0^\dagger b_0) \right\rangle(t) \\ &= \gamma \frac{1}{2\sqrt{N}} \left\langle b_0^\dagger b_0 b_0 - b_0 b_0^\dagger b_0 + b_0^\dagger b_0^\dagger b_0 - b_0^\dagger b_0 b_0^\dagger \right\rangle(t) \\ &= \gamma \frac{1}{2\sqrt{N}} \left\langle \left[ b_0^\dagger, b_0 \right] b_0 + b_0^\dagger \left[ b_0^\dagger, b_0 \right] \right\rangle(t) = -\frac{1}{2} \gamma \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} (b_0^\dagger + b_0) \right\rangle(t) = -\frac{1}{2} \gamma q(t) \end{aligned} \tag{B.10a}$$

Dissipator[
$$p(t)$$
] =  $\gamma \left[ \left\langle b_0^{\dagger} p b_0 \right\rangle (t) - \frac{1}{2} \left\langle b_0^{\dagger} b_0 p \right\rangle (t) - \frac{1}{2} \left\langle p b_0^{\dagger} b_0 \right\rangle (t) \right]$   
=  $\gamma \frac{i}{\sqrt{N}} \left\langle b_0^{\dagger} (b_0^{\dagger} - b_0) b_0 - \frac{1}{2} (b_0^{\dagger} b_0 (b_0^{\dagger} - b_0) + (b_0^{\dagger} - b_0) b_0^{\dagger} b_0) \right\rangle (t)$   
=  $\gamma \frac{i}{2\sqrt{N}} \left\langle b_0^{\dagger} b_0^{\dagger} b_0 - b_0^{\dagger} b_0 b_0^{\dagger} + b_0 b_0^{\dagger} b_0 - b_0^{\dagger} b_0 b_0 \right\rangle (t)$   
=  $\gamma \frac{i}{2\sqrt{N}} \left\langle b_0^{\dagger} [b_0^{\dagger}, b_0] + [b_0, b_0^{\dagger}] b_0 \right\rangle (t) = -\frac{1}{2} \gamma \left\langle \frac{i}{\sqrt{N}} (b_0^{\dagger} - b_0) \right\rangle (t) = -\frac{1}{2} \gamma p(t)$   
(B.10b)

$$\begin{split} \text{Dissipator}[n_{\text{Ph}}(t)] &= \gamma \left[ \left\langle b_0^{\dagger} n_{\text{Ph}} b_0 \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle b_0^{\dagger} b_0 n_{\text{Ph}} \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle n_{\text{Ph}} b_0^{\dagger} b_0 \right\rangle \right] \\ &= \gamma \frac{1}{N} \left\langle b_0^{\dagger} b_0^{\dagger} b_0 b_0 - b_0^{\dagger} b_0 b_0^{\dagger} b_0 \right\rangle (t) \\ &= \gamma \frac{1}{N} \left\langle b_0^{\dagger} [b_0^{\dagger}, b_0] b_0 \right\rangle (t) \\ &= \gamma \left\langle \frac{1}{N} b_0^{\dagger} b_0 \right\rangle (t) = -\gamma n_{\text{Ph}}(t) \; . \end{split} \tag{B.10c}$$

Dies führt für das Phonon auf die Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}q(t) = \omega_0 p(t) - \frac{1}{2}\gamma q(t) \tag{B.11a} \label{eq:B.11a}$$

$$\frac{d}{dt}p(t) = -\omega_0 q(t) - \frac{1}{2}\gamma p(t) - 2[E(t) + g(U(t) + V(t))] \tag{B.11b} \label{eq:B.11b}$$

$$\frac{d}{dt}n_{\rm Ph}(t) = -[E(t) + g(U(t) + V(t))]p(t) - \gamma n_{\rm Ph}(t) \ . \tag{B.11c}$$

### B.2 Berechnung der Spin-Bewegungsgleichungen

Der Hamiltonoperator für das Spinsystem lautet

$$\begin{split} H = & H_{\rm S} + H_{\rm SP,S} \\ = & \sum_{k,\alpha} \omega_k \tilde{t}_{k,\alpha}^\dagger \tilde{t}_{k,\alpha} + gq(t) \sum_{k,\alpha} \left[ y_k (\tilde{t}_{k,\alpha}^\dagger \tilde{t}_{k,\alpha} - n(\omega_k)) + y_k' \frac{1}{2} (\tilde{t}_{k,\alpha}^\dagger \tilde{t}_{-k,\alpha}^\dagger + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) \right] \; . \end{split} \tag{B.12}$$

Die Lindbladoperatoren sind  $A_{k,1}=\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}$  und  $A_{k,2}=\tilde{t}_{k,\alpha}$  mit den Dämpfungen  $\gamma_{1,k}=\gamma_s n(\omega_k)=0$  und  $\gamma_{2,k}=\gamma_s(1+n(\omega_k))=\gamma_s$ . Die Berechnung der Bewegungsgleichungen teilt sich in diesem Fall in drei Rechnungen auf. Zunächst werden die beiden Terme aus dem Heisenbergteil

$$\begin{split} i \left\langle [H_{\mathrm{S}}, u_{k}] \right\rangle (t) = & i \sum_{k', \alpha', \alpha} \omega_{k'} \left\langle \left[ \tilde{t}_{k', \alpha'}^{\dagger} \tilde{t}_{k', \alpha'}, \tilde{t}_{k, \alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k, \alpha} \right] \right\rangle (t) = 0 \\ i \left\langle [H_{\mathrm{S}}, \tilde{v}_{k}] \right\rangle (t) = & i \sum_{k', \alpha', \alpha} \omega_{k'} \left\langle \left[ \tilde{t}_{k', \alpha'}^{\dagger} \tilde{t}_{k', \alpha'}, \tilde{t}_{k, \alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k, \alpha}^{\dagger} \right] \right\rangle (t) \\ = & i \sum_{k', \alpha', \alpha} \omega_{k'} \left\langle \tilde{t}_{k', \alpha'}^{\dagger} \left[ \tilde{t}_{k', \alpha'}, \tilde{t}_{k, \alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k, \alpha}^{\dagger} \right] \right\rangle (t) \\ = & i \sum_{k', \alpha', \alpha} \omega_{k'} \left\langle \tilde{t}_{k', \alpha'}^{\dagger} \tilde{t}_{k, \alpha}^{\dagger} \left[ \tilde{t}_{k', \alpha'}, \tilde{t}_{-k, \alpha}^{\dagger} \right] + \tilde{t}_{k', \alpha'}^{\dagger} \left[ \tilde{t}_{k', \alpha'}, \tilde{t}_{k, \alpha}^{\dagger} \right] \tilde{t}_{-k, \alpha}^{\dagger} \right\rangle (t) \\ = & i \sum_{k', \alpha', \alpha} \omega_{k'} \left\langle \tilde{t}_{k, \alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k, \alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k, \alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k, \alpha}^{\dagger} \right\rangle (t) = i 2 \omega_{k} \tilde{v}_{k}(t) \end{split} \tag{B.13b}$$

$$\begin{split} i\left\langle\left[H_{\mathrm{SP,S}},u_{k}\right]\right\rangle(t) = &igq(t)\sum_{k',\alpha',\alpha}y_{k'}\left(\left\langle\underbrace{\left[\tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger}\tilde{t}_{k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{k,\alpha}}\right]}_{=0}\right\rangle(t) \\ &+\frac{y_{k'}'}{2}\left\langle\underbrace{\left[\tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger}\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{k,\alpha}\right]}_{\rightarrow-2\tilde{v}_{k}(t)\text{ analog zu }(\mathrm{B.13b})}\right\rangle(t) \\ &+\frac{y_{k'}'}{2}\left\langle\left[\tilde{t}_{k',\alpha'}\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{k,\alpha}\right]\right\rangle(t)\right) \\ = &-igq(t)y_{k}'\tilde{v}_{k}(t)+igq(t)\sum_{k',\alpha',\alpha}\frac{y_{k'}'}{2}\left\langle\left[\tilde{t}_{k',\alpha'}\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\right]\tilde{t}_{k,\alpha}\right\rangle(t) \\ = &-igq(t)y_{k}'\tilde{v}_{k}(t)+igq(t)\sum_{k',\alpha'\alpha}\frac{y_{k'}'}{2}\left\langle\tilde{t}_{k',\alpha'}\delta_{k',-k}\delta_{\alpha',\alpha}\tilde{t}_{k,\alpha}+\delta_{k',k}\delta_{\alpha',\alpha}\tilde{t}_{-k',\alpha'}\tilde{t}_{k,\alpha}\right\rangle(t) \\ = &-igq(t)y_{k}'\tilde{v}_{k}(t)+igq(t)\sum_{\alpha}\frac{y_{k}'}{2}\left\langle\tilde{t}_{k,\alpha}\tilde{t}_{-k,\alpha}+\tilde{t}_{k,\alpha}\tilde{t}_{-k,\alpha}\right\rangle(t) \\ = &-igq(t)y_{k}'(\tilde{v}_{k}^{\dagger}(t)-\tilde{v}_{k}(t)) \end{split}$$

(B.14a)

$$\begin{split} i\left\langle\left[H_{\mathrm{SP,S}},\tilde{v}_{k}\right]\right\rangle(t) = &igq(t)\sum_{k',\alpha',\alpha}y_{k'}\left(\left\langle\underbrace{\left[\tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger}\tilde{t}_{k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\right]}_{\rightarrow2\tilde{v}_{k}(t)\text{ analog zu (B.13b)}}\right\rangle(t) \\ &+\frac{y'_{k'}}{2}\left\langle\underbrace{\left[\tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger}\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\right]}_{=0}\right\rangle(t) \\ &+\frac{y'_{k'}}{2}\left\langle\left[\tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger}\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\right]\right\rangle(t)\right) \\ = &i2gq(t)y_{k}\tilde{v}_{k}(t) + igq(t)\sum_{k',\alpha',\alpha}\frac{y'_{k'}}{2}\left\langle\left[\tilde{t}_{k',\alpha'}\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\right]\right\rangle(t) \\ = &i2gq(t)y_{k}\tilde{v}_{k}(t) \\ &+igq(t)\sum_{k',\alpha',\alpha}\frac{y'_{k'}}{2}\left\langle\tilde{t}_{k',\alpha'}\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\underbrace{\left[\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\right]}_{\delta_{k',k}\delta_{\alpha',\alpha}} + \tilde{t}_{k',\alpha'}\underbrace{\left[\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger}\right]}_{\delta_{-k',k}\delta_{\alpha',\alpha}} + \tilde{t}_{k',\alpha}^{\dagger}\underbrace{\left[\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\right]}_{\delta_{-k',k}\delta_{\alpha',\alpha}} + \tilde{t}_{k',\alpha'}\underbrace{\left[\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger}\right]}_{\delta_{k',k}\delta_{\alpha',\alpha}} + \tilde{t}_{k',\alpha'}\underbrace{\left[\tilde{t}_{-k',\alpha'},\tilde{t}_{-k',\alpha'}^{\dagger}\right]}_{\delta_{k',k}\delta_{\alpha',\alpha}} + 2\right\rangle(t) \\ = &i2gq(t)y_{k}\tilde{v}_{k}(t) + i2gq(t)y'_{k}\left(u_{k} + \frac{3}{2}\right) \end{split} \tag{B.14b}$$

und danach der dissipative Teil

$$\begin{split} \text{Dissipator}[u_k(t)] &= \gamma_s \sum_{k',\alpha'} \left[ \left\langle \tilde{t}_{k',\alpha'}^\dagger u_k \tilde{t}_{k',\alpha'} \right\rangle(t) - \frac{1}{2} \left\langle \tilde{t}_{k',\alpha'}^\dagger \tilde{t}_{k',\alpha'} u_k \right\rangle(t) - \frac{1}{2} \left\langle u_k \tilde{t}_{k',\alpha'}^\dagger \tilde{t}_{k',\alpha'} \tilde{t}_{k',\alpha'} \right\rangle(t) \right] \\ &= \gamma_s \sum_{k',\alpha',\alpha} \left\langle \tilde{t}_{k',\alpha'}^\dagger \tilde{t}_{k,\alpha}^\dagger \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{k',\alpha'} - \frac{1}{2} \tilde{t}_{k',\alpha'}^\dagger \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha} - \frac{1}{2} \tilde{t}_{k,\alpha}^\dagger \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{k',\alpha'} \tilde{t}_{k$$

(B.15a)

$$\begin{split} \text{Dissipator}[\tilde{v}_{k}(t)] = & \gamma_{s} \sum_{k',\alpha'} \left[ \left\langle \tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger} \tilde{v}_{k} \tilde{t}_{k',\alpha'} \right\rangle(t) - \frac{1}{2} \left\langle \tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger} \tilde{t}_{k',\alpha'} \tilde{v}_{k} \right\rangle(t) - \frac{1}{2} \left\langle \tilde{v}_{k} \tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger} \tilde{t}_{k',\alpha'} \tilde{t}_{k',\alpha'} \right\rangle(t) \right] \\ = & \gamma_{s} \sum_{k',\alpha',\alpha} \left\langle \tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k',\alpha'} - \frac{1}{2} \tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger} \tilde{t}_{k',\alpha'} \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k',\alpha'}^{\dagger} \tilde{t}$$

berechnet. Dies führt auf die Bewgungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}u_k(t) = 2gq(t)y_k'w_k(t) - \gamma_s u_k(t)$$
(B.16a)

$$\frac{d}{dt}v_k(t) = -2[\omega_k + gy_k q(t)]w_k(t) - \gamma_s v_k(t)$$
(B.16b)

$$\frac{d}{dt}w_k(t) = 2[\omega_k + gy_kq(t)]v_k(t) + 2gq(t)y_k'\left[u_k(t) + \frac{3}{2}\right] - \gamma_s w_k(t) \tag{B.16c}$$

für das Spinsystem.

# C Rechnung zur Bestimmung der Bewegungsgleichungen des $J^{'}$ -Modells

In diesem Abschnitt werden die Bewegungsgleichungen des J'-Modells hergeleitet. Da der Unterschied zwischen dem J-Modell und dem J'-Modell sich auf den Spin-Phononwechselwirkungsterm  $H_{\rm SP}$  des Hamiltonoperators beschränkt, muss lediglich der Kommutator der betrachteten Erwartungswerte mit diesem neu berechnet werden. Der Rest kann aus Abschnitt B recycelt werden.

Die Spin-Phononwechselwirkung des J'-Modell ist nach Abschnitt A gegeben durch

$$H_{\rm SP} = -\frac{g'}{2\lambda} \frac{1}{\sqrt{N}} (b_0^{\dagger} + b_0) \sum_{k,\alpha} y_k' (2\tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{k,\alpha} + \tilde{t}_{k,\alpha}^{\dagger} \tilde{t}_{-k,\alpha}^{\dagger} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) . \tag{C.1}$$

Mit den Neudefinitionen

$$U'(t) := \sum_{k} y'_k u_k(t) \tag{C.2a}$$

$$V'(t) \coloneqq \sum_{k} y'_k v_k(t) \tag{C.2b}$$

ergibt sich für den Phononanteil

$$H_{\rm SP} = -\frac{g'}{\lambda} \frac{1}{\sqrt{N}} (b_0^{\dagger} + b_0) (U'(t) + V'(t)) \ . \tag{C.3}$$

Bei einem Vergleich mit Gleichung (B.5) aus dem J-Modell ist leicht zu sehen, dass sich hier unter Beachtung der Neudefinitionen U'(t) und V'(t) lediglich der Vorfaktor

$$g \to -\frac{g'}{\lambda}$$
 (C.4)

ändert. Entsprechend Abschnitt B lassen sich somit die Kommutatorrelationen

$$i\left\langle \left[H_{\mathrm{SP,P}},q\right]\right\rangle (t)=0$$
 (C.5a)

$$i\left\langle [H_{\mathrm{SP,P}},p]\right\rangle (t)=2\frac{g'}{\lambda}(U'(t)+V'(t)) \tag{C.5b}$$

$$i\left\langle [H_{\mathrm{SP,P}},n_{Ph}]\right\rangle (t) = \frac{g'}{\lambda}(U'(t)+V'(t))p$$
 (C.5c)

bestimmen.

Der Spinanteil der Spin-Phononwechselwirkung lautet nun

$$H_{\rm SP} = -q(t)\frac{g'}{\lambda} \sum_{k,\alpha} y'_k \left( \tilde{t}^{\dagger}_{k,\alpha} \tilde{t}_{k,\alpha} + \frac{1}{2} (\tilde{t}^{\dagger}_{k,\alpha} \tilde{t}^{\dagger}_{-k,\alpha} + \tilde{t}_{k,\alpha} \tilde{t}_{-k,\alpha}) \right) . \tag{C.6}$$

Auch hier kommen die gleichen Triplonterme wie für das J-Modell mit lediglich anderen Vorfaktoren vor. Ein Koeffizientenvergleich mit Gleichung (B.12) ergibt dementsprechend

$$gq(t)y_k \rightarrow -\frac{g'}{\lambda}q(t)y_k'$$
 (C.7)

für den  $t^{\dagger}t$ -Term sowie

$$gq(t)y_k' \rightarrow -\frac{g'}{\lambda}q(t)y_k'$$
 (C.8)

für den Triplonpaarerzeuger- und den Triplonpaarvernichterterm. Dies führt auf die Kommutatorrelationen

$$i\left\langle [H_{\rm SP,S},u_k]\right\rangle(t) = -i\frac{g'}{\lambda}q(t)y_k'(\tilde{v}_k^\dagger(t) - \tilde{v}_k(t)) \tag{C.9a}$$

$$i \left\langle [H_{\rm SP,S}, \tilde{v}_k] \right\rangle(t) = - \, i 2 \frac{g'}{\lambda} q(t) y_k' \tilde{v}_k(t) - i 2 \frac{g'}{\lambda} q(t) y_k' \left( u_k + \frac{3}{2} \right) \; . \tag{C.9b} \label{eq:constraint}$$

Zusammen mit den restlichen Termen aus Abschnitt B ergeben sich nach der Lindblad Master Gleichung (B.1) die Bewegungsgleichungen des J'-Modells

$$\frac{d}{dt}q(t) = \omega_0 p(t) - \frac{1}{2}\gamma q(t) \tag{C.10a}$$

$$\frac{d}{dt}p(t) = -\omega_0 q(t) - \frac{1}{2}\gamma p(t) - 2[E(t) - \frac{g'}{\lambda}(U'(t) + V'(t))] \tag{C.10b} \label{eq:C.10b}$$

$$\frac{d}{dt}n_{\rm Ph}(t) = -[E(t) - \frac{g'}{\lambda}(U'(t) + V'(t))]p(t) - \gamma[n_{\rm Ph}(t) - n(\omega_0)] \tag{C.10c}$$

$$\frac{d}{dt}u_k(t) = -2\frac{g'}{\lambda}q(t)y'_kw_k(t) - \gamma_s[u_k(t) - 3n(\omega_k)] \tag{C.10d}$$

$$\frac{d}{dt}v_k(t) = -2[\omega_k - \frac{g'}{\lambda}y_k'q(t)]w_k(t) - \gamma_s v_k(t) \tag{C.10e} \label{eq:C.10e}$$

$$\frac{d}{dt}w_k(t) = 2[\omega_k - \frac{g'}{\lambda}y_k'q(t)]v_k(t) - 2\frac{g'}{\lambda}q(t)y_k'\left[u_k(t) + \frac{3}{2}\right] - \gamma_s w_k(t) \ . \tag{C.10f}$$

# D Analyse iterierter Pulse

Neben der Analyse einzelner Pulse wurde im Verlauf dieser Arbeit auch das Verhalten des Systems bei einer schnellen Abfolge von Pulsen betrachtet. Für die Standardparameter (4.7) ist dieses Verhalten in Abbildung D.1 zu sehen. Wie in der Abbildung zu erkennen, verstärkt dies die Reaktion des Spinsystems bei späteren Pulsen. Diese stärkere Reaktion des Spinsystems erreicht nach ungefähr fünf Pulsen eine Sättigung. Dies bedeutet für Messungen mit iterierten Pulsen, dass eine relativ geringe Anzahl an Pulsen reichen sollte, um alle nennenswerten Effekte zu berücksichtigen. Das ist gut, da das System somit nicht unnötig lange aufgeheizt werden muss.

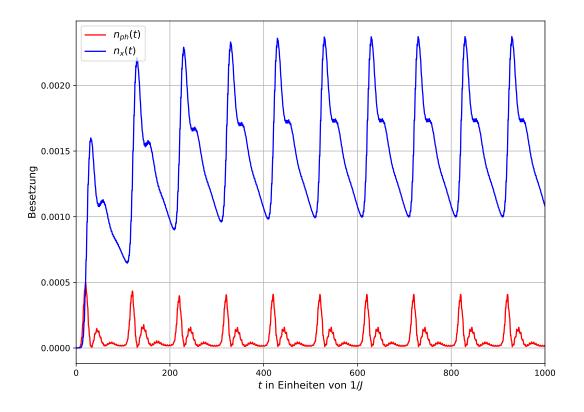
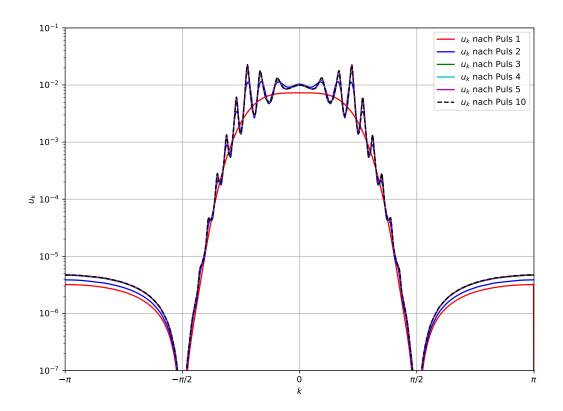


Abbildung D.1: Die Triplonbesetzung  $n_x(t)$  in blau, die Phononbesetzung  $n_{\rm Ph}$  in rot für iterierte Pulse. Die Pulsdauer beträgt  $6\sigma=30/J$ , die Pulstaktung 100/J. Die Parameter betragen  $\omega_0=1,5J$  und g=0,5J sowie die restlichen Standardparameter (4.7) für Pulse.

Es wird erwartet, dass sich die Frequenz der Pulstaktung  $2\pi/100~J$  in den Moden des Systems widerspiegelt. Dazu werden zunächst die Besetzungen der Moden  $u_k$  einzeln betrachtet, wie in

Abbildung D.2 zu sehen ist. Es lässt sich erkennen, dass sich nach dem 2. Puls einige Moden ausbilden, die für weitere Pulse noch stärker hervortreten. Auch dieser Effekt erreicht eine Sättigung nach etwa fünf Pulsen.



**Abbildung D.2:** Besetzung der einzelnen Triplonmoden  $u_k$  gegen den Wellenvektor k nach den verschiedenen Pulsen aufgetragen. Die Parameter sind dieselben wie in Abbildung D.1.

Um zu überprüfen, ob der Abstand dieser Moden der Taktungsfrequenz entspricht, wird in Abbildung D.3 der Wellenvektor k über die Dispersion (3.12b) in eine reale Kreisfrequenz umgewandelt. Zudem sind, beginnend am Peak der niedrigsten Frequenz, äquidistante Linien mit einem Abstand der Taktungsfrequenz zu sehen. Wie zu erkennen treten die Peaks in exakt diesem Abstand auf. Dies kann in Experimenten von Vorteil sein, da durch diesen Effekt beispielsweise das Problem einer endlichen Impulsauflösung besser behandelt werden kann. Informationen, welche sich aus den relativen Peakhöhen ergeben, sind somit besser messbar.

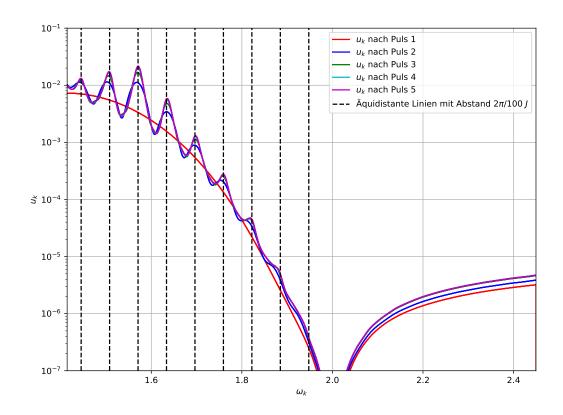


Abbildung D.3: Dieselben Daten wie in Abbildung D.2, diesmal jedoch gegen die Kreisfrequenz  $\omega$  aufgetragen. Zudem äquidistante schwarz gestrichelte Linien mit einer Distanz von  $2\pi/100~J$ . Dies entspricht der Taktungsrate der Pulse.

## Literatur

- [1] C. Meyer. "Dynamics of a Dimerized S=1/2 Chain Continuously Driven via a Coupled Phonon". Masterarbeit. Technische Universität Dortmund, 2018.
- [2] M. Yarmohammadi, C. Meyer, B. Fauseweh, B. Normand und G. S. Uhrig. "Dynamical properties of a driven dissipative dimerized S= 1/2 chain". In: *Physical Review B* 103.4 (2021), S. 1–32. ISSN: 24699969. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.045132. arXiv: 2009.14805.
- [3] M. Yarmohammadi, M. Krebs, G. S. Uhrig und B. Normand. "Giant Resonant Self-Blocking in Magnetophononically Driven Quantum Magnets". In: (2021).
- [4] A. de la Torre, D. M. Kennes, M. Claassen, S. Gerber, J. W. McIver und M. A. Sentef. "Colloquium: Nonthermal pathways to ultrafast control in quantum materials". In: *Rev. Mod. Phys.* 93 (4 2021), S. 041002. DOI: 10.1103/RevModPhys.93.041002. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.93.041002.
- [5] J. D. Rameau, S. Freutel, A. F. Kemper, M. A. Sentef, J. K. Freericks, I. Avigo, M. Ligges, L. Rettig, Y. Yoshida, H. Eisaki, J. Schneeloch, R. D. Zhong, Z. J. Xu, G. D. Gu, P. D. Johnson und U. Bovensiepen. "Energy dissipation from a correlated system driven out of equilibrium". In: *Nature Communications* 7 (2016), S. 13761. DOI: 10.1038/ncomms13761. URL: https://doi.org/10.1038/ncomms13761.
- [6] P. Salén, M. Basini, S. Bonetti, J. Hebling, M. Krasilnikov, A. Y. Nikitin, G. Shamuilov, Z. Tibai, V. Zhaunerchyk und V. Goryashko. "Matter manipulation with extreme terahertz light: Progress in the enabling THz technology". In: *Physics Reports* 836-837 (2019), S. 1-74. ISSN: 0370-1573. DOI: https://doi.org/10.1016/j.physrep.2019.09.002. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157319302649.
- [7] T. Kampfrath, K. Tanaka und K. A. Nelson. Resonant and nonresonant control over matter and light by intense terahertz transients. Bd. 7. 2013, S. 680-690. DOI: 10.1038/nphoton. 2013.184. URL: https://doi.org/10.1038/nphoton.2013.184.
- [8] T. Kampfrath, A. Sell, G. Klatt, A. Pashkin, S. Mährlein, T. Dekorsy, M. Wolf, M. Fiebig, A. Leitenstorfer und R. Huber. *Coherent terahertz control of antiferromagnetic spin waves.* Bd. 5. 2011, S. 31–34. DOI: 10.1038/nphoton.2010.259. URL: https://doi.org/10.1038/nphoton.2010.259.
- [9] F. Giorgianni, B. Wehinger, S. Allenspach, N. Colonna, C. Vicario, P. Puphal, E. Pom-jakushina, B. Normand und C. Rüegg. *Ultrafast Frustration-Breaking and Magnetopho-nonic Driving of Singlet Excitations in a Quantum Magnet.* 2022. arXiv: 2101.01189 [cond-mat.str-el].
- [10] N. H. Lindner, G. Refael und V. Galitski. "Floquet topological insulator in semiconductor quantum wells". In: *Nature Physics* 7 (6 2011), S. 490–495. DOI: 10.1038/nphys1926. URL: https://doi.org/10.1038/nphys1926.
- A. Cavalleri. "Photo-induced superconductivity". In: Contemporary Physics 59.1 (2018),
   S. 31-46. DOI: 10.1080/00107514.2017.1406623. eprint: https://doi.org/10.1080/00107514.2017.1406623.
   URL: https://doi.org/10.1080/00107514.2017.1406623.

- [12] K. M. Shen und J. C. S. Davis. "Cuprate high-Tc superconductors". In: *Materials Today* 11.9 (2008), S. 14-21. ISSN: 1369-7021. DOI: https://doi.org/10.1016/S1369-7021(08)70175-5. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1369702108701755.
- [13] G. S. Uhrig. "Nonadiabatic approach to spin-Peierls transitions via flow equations". In: *Phys. Rev. B* 57 (22 1998), R14004–R14007. DOI: 10.1103/PhysRevB.57.R14004. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.57.R14004.
- [14] G. S. Uhrig. "Symmetry and Dimension of the Magnon Dispersion of Inorganic Spin-Peierls Systems". In: *Phys. Rev. Lett.* 79 (1 1997), S. 163–166. DOI: 10.1103/PhysRevLett.79.163. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.79.163.
- [15] I. Loa, S. Gronemeyer, C. Thomsen und R. K. Kremer. "Spin gap and spin-phonon interaction in CuGeO3". In: Solid State Communications 99.4 (1996), S. 231-235. ISSN: 0038-1098. DOI: https://doi.org/10.1016/0038-1098(96)00303-1. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0038109896003031.
- [16] M. Hase, I. Terasaki und K. Uchinokura. "Observation of the spin-Peierls transition in linear Cu<sup>2+</sup> (spin-1/2) chains in an inorganic compound CuGeO<sub>3</sub>". In: *Phys. Rev. Lett.* 70 (23 1993), S. 3651–3654. DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.3651. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.70.3651.
- [17] D. Bossini, S. Dal Conte, M. Terschanski, G. Springholz, A. Bonanni, K. Deltenre, F. Anders, G. S. Uhrig, G. Cerullo und M. Cinchetti. "Femtosecond phononic coupling to both spins and charges in a room-temperature antiferromagnetic semiconductor". In: *Phys. Rev. B* 104 (22 2021), S. 224424. DOI: 10.1103/PhysRevB.104.224424. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.104.224424.
- [18] W. Nolting. Grundkurs Theoretische Physik 5/1: Quantenmechanik Grundlagen. 8. Auflage. Springer Spektrum Berlin, Heidelberg, 2013. ISBN: 978-3-642-25402-4. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-642-25403-1.
- [19] W. Nolting. Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie. 8. Auflage. Springer Spektrum Berlin, Heidelberg, 2015. ISBN: 978-3-662-49552-0. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-642-25808-4.
- [20] M. Born und P. Jordan. "Zur Quantenmechanik". In: Zeitschrift für Physik 34 (1 1925),
   S. 858–888. DOI: 10.1007/BF01328531. URL: https://doi.org/10.1007/BF01328531.
- [21] M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan. "Zur Quantenmechanik II". In: Zeitschrift für Physik 35 (8 1926), S. 557–615. DOI: 10.1007/BF01379806. URL: https://doi.org/10.1007/BF01379806.
- [22] S. Sachdev und R. Bhatt. "Bond-operator representation of quantum spins: Mean-Field theory of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets". In: *Phys.Rev.B* 41 (1990).
- [23] G. Ferkinghoff. "Kontinuierliche unitäre Transformationen für Hardcore-Bosonen im Ising-Modell im transversalen Feld". Masterarbeit. Technische Universität Dortmund, 2017.
- [24] C. Knetter und G. S. Uhrig. "Perturbation theory by flow equations: dimerized and frustrated S = 1/2 chain". In: *The European Physical Journal B Condensed Matter and Complex Systems* 13 (2 2000), S. 209–225. DOI: 10.1007/s100510050026. URL: https://doi.org/10.1007/s100510050026.
- [25] S. Gopalan, T. M. Rice und M. Sigrist. "Spin ladders with spin gaps: A description of a class of cuprates". In: *Phys.Rev.B* 49 (1994).

- [26] H. Krull, N. A. Drescher und G. S. Uhrig. "Enhanced perturbative continuous unitary transformations". In: *Physical Review B* 86.12 (2012). DOI: 10.1103/physrevb.86.125113. URL: https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.86.125113.
- [27] M. Fox. "10. Phononen". In: Optische Eigenschaften von Festkörpern. De Gruyter Oldenbourg, 2020, S. 351–380. DOI: doi:10.1515/9783110669138-011. URL: https://doi.org/10.1515/9783110669138-011.
- [28] J. X. Cheng und X. S. Xie. Coherent Raman Scattering Microscopy. Series in Cellular and Clinical Imaging. CRC Press, 2016. ISBN: 9781439867662. URL: https://books.google.de/books?id=IPfRBQAAQBAJ.
- [29] K. Deltenre, D. Bossini, F. B. Anders und G. S. Uhrig. "Lattice-driven femtosecond magnon dynamics in α-MnTe". In: *Phys. Rev. B* 104 (18 2021), S. 184419. DOI: 10.1103/PhysRevB. 104.184419. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.104.184419.
- [30] M. Först, R. I. Tobey, S. Wall, H. Bromberger, V. Khanna, A. L. Cavalieri, Y-D. Chuang, W. S. Lee, R. Moore, W. F. Schlotter, J. J. Turner, O. Krupin, M. Trigo, H. Zheng, J. F. Mitchell, S. S. Dhesi, J. P. Hill und A. Cavalleri. "Driving magnetic order in a manganite by ultrafast lattice excitation". In: *Phys. Rev. B* 84 (24 2011), S. 241104. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.241104. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.241104.
- [31] M. Först et al. "Spatially resolved ultrafast magnetic dynamics initiated at a complex oxide heterointerface". In: *Nature Materials* 14 (9 2015), S. 883–888. DOI: 10.1038/nmat4341. URL: https://rdcu.be/cMhgI.
- [32] M. Fechner, A. Sukhov, L. Chotorlishvili, C. Kenel, J. Berakdar und N. A. Spaldin. "Magnetophononics: Ultrafast spin control through the lattice". In: *Phys. Rev. Materials* 2 (6 2018), S. 064401. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.2.064401. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevMaterials.2.064401.
- [33] G. Lindblad. "Mathematical Physics On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups". In: Commun. math. Phys 48 (1976), S. 119–130.
- [34] H-P. Breuer und F. Petruccione. *The Theory of Open Quantum Systems*. 1. Auflage. Oxford University Press, 2002.
- [35] J. A. Gyamfi. "Fundamentals of quantum mechanics in Liouville space". In: European Journal of Physics 41.6 (2020), S. 063002. DOI: 10.1088/1361-6404/ab9fdd. URL: https://doi.org/10.1088%2F1361-6404%2Fab9fdd.
- [36] M. A. Sentef, M. Claassen, A. F. Kemper, B. Moritz, T. Oka, J. K. Freericks und T. P. Devereaux. "Theory of Floquet band formation and local pseudospin textures in pump-probe photoemission of graphene". In: *Nature Communications* 6 (2015). 7047. DOI: 10.1038/ncomms8047. URL: https://doi.org/10.1038/ncomms8047.
- [37] M. A. Sentef, A. F. Kemper, A. Georges und C. Kollath. "Theory of light-enhanced phonon-mediated superconductivity". In: *Phys. Rev. B* 93 (14 2016), S. 144506. DOI: 10.1103/PhysRevB.93.144506. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.144506.
- [38] C. Runge. "Ueber die numerische Auflösung von Differentialgleichungen". In: *Mathematische Annalen* 46 (2 1895), S. 167–178. DOI: 10.1007/BF01446807. URL: https://doi.org/10.1007/BF01446807.
- [39] W. Kutta. "Beitrag zur näherungsweisen Integration totaler Differentialgleichungen". In: Zeit. Math. Phys. 46 (1901), S. 435–53.

- [40] W. H. Press, Teukolsky S. A., W. T. Vetterling und B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. 2. Auflage. Cambridge University Press, 2002. ISBN: 0 521 43108 5.
- [41] E. Gabriel, G. E. Fagg, G. Bosilca, T. Angskun, J. J. Dongarra, J. M. Squyres, V. Sahay, P. Kambadur, B. Barrett, A. Lumsdaine, R. H. Castain, D. J. Daniel, R. L. Graham und T. S. Woodall. "Open MPI: Goals, Concept, and Design of a Next Generation MPI Implementation". In: Proceedings, 11th European PVM/MPI Users' Group Meeting. Budapest, Hungary, 2004, S. 97–104.
- [42] G. Guennebaud, B. Jacob et al. Eigen v3. http://eigen.tuxfamily.org. 2010.
- [43] C. R. Harris et al. "Array programming with NumPy". In: Nature 585.7825 (2020), S. 357–362. DOI: 10.1038/s41586-020-2649-2. URL: https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2.
- [44] Wolfram Research Inc. Mathematica, Version 13.0.0. Champaign, IL, 2021. URL: https://www.wolfram.com/mathematica.
- [45] P. Virtanen et al. "SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python". In: *Nature Methods* 17 (2020), S. 261–272. DOI: 10.1038/s41592-019-0686-2.
- [46] T. Barnes und J. Riera. "Susceptibility and excitation spectrum of (VO)<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub> in ladder and dimer-chain models". In: *Phys. Rev. B* 50 (10 1994), S. 6817–6822. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.6817. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.6817.
- [47] G. S. Uhrig und B. Normand. "Magnetic properties of (VO)<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>7</sub>: Two-plane structure and spin-phonon interactions". In: *Phys. Rev. B* 63 (13 2001), S. 134418. DOI: 10.1103/PhysRevB. 63.134418. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.134418.
- [48] G. S. Uhrig und B. Normand. "Magnetic properties of  $(VO)_2P_2O_7$  from frustrated interchain coupling". In: *Phys. Rev. B* 58 (22 1998), R14705–R14708. DOI: 10.1103/PhysRevB.58. R14705. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.R14705.
- [49] R. Werner, C. Gros und M. Braden. "Microscopic spin-phonon coupling constants in CuGeO<sub>3</sub>". In: *Phys. Rev. B* 59 (22 1999), S. 14356–14366. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.14356. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.14356.
- [50] D. C. Johnston, J. W. Johnson, D. P. Goshorn und A. J. Jacobson. "Magnetic susceptibility of  $(VO)_2P_2O_7$ : A one-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with a ladder spin configuration and a singlet ground state". In: *Phys. Rev. B* 35 (1 1987), S. 219–222. DOI: 10.1103/PhysRevB.35.219. URL: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.35.219.
- [51] M. Yarmohammadi. "Non-equilibrium dynamics of a driven-dissipative dimerized spin-1/2-chain". Dissertation. Technische Universität Dortmund, 2022. URL: http://dx.doi.org/10.17877/DE290R-22643.
- [52] L. B. Müller. "Quasiparticle decay induced by spin anisotropies in the frustrated spin ladder system BiCu2PO6". Dissertation. Technische Universität Dortmund, 2021. URL: http://dx.doi.org/10.17877/DE290R-22021.
- [53] J-P. Blaizot und G. Ripka. Quantum Theory of finite Systems. 1. Auflage. MIT Press, 1986. ISBN: 0-262-02241-1.

[54] "Index of Functions and Constants". In: Table of Integrals, Series, and Products (Sixth Edition). Hrsg. von A. Jeffrey und D. Zwillinger. Sixth Edition. San Diego: Academic Press, 2000, S. 1143–1151. ISBN: 978-0-12-294757-5. DOI: https://doi.org/10.1016/B978-012294757-5/50024-6. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780122947575500246.

# **Danksagung**

An dieser Stelle möchte ich mich nocheinmal bei allen bedanken, welche mir auf dem Weg zu meinem Master geholfen habe.

Zunächst ist da natürlich Prof. Dr. Götz Uhrig, der mir dieses interessante Thema gegeben hat und mir bei Fragen immer schnell und verlässlich helfen konnte. Zudem möchte ich mich auch bei Dr. Bruce Normand bedanken, welcher mich in diesem Projekt ebenfalls einige Male unterstützt hat und mir zudem bei meinem Besuch am Paul-Scherrer Institut einige interessante Einblicke in die experimentelle Seite dieses Projekts geben konnte. Ein besonderer Dank gilt diesen beiden zudem, da sie sich bereit erklärt haben diese Arbeit zu begutachten.

Ein weiteres Danke geht an all die Kollegen meines Lehrstuhls, welche mir mit Rat und Tat zur Seite standen. Zunächst wäre da Dr. Mohsen Yarmohammadi, welcher an dem selben Projekt gearbeitet und mir einige Male weitergeholfen hat. Aber auch Dr. Carsten Nase, Dr. Phillip Schering, Gary Schmiedinghoff, Timo Grässer und Sinja Behrensmeier welche mir sowohl numerisch als auch inhaltlich das ein oder andere Mal geholfen haben.

Insbesondere Danken möchte ich auch jenen, die diese Arbeit vor der Abgabe nocheinmal korrekturgelesen haben. Dabei handelt es sich um Prof. Dr. Götz Uhrig, Dr. Mohsen Yarmohammadi Dag Hering, Sinja Behrensmeier und meine Eltern.

### **Eidesstattliche Versicherung**

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Abschlussarbeit mit dem Titel "Dynamik einer gepulsten, dimerisierten Spinkette" 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 € 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.

Dortmund, OS.06.2022

Unterschrift