
Magnetische Anregungen einer Quantenspinleiter in einem optischen Resonator

Bachelorarbeit aus der Physik

vorgelegt von
Marie Hofmann
am 06.08.2020

Institut für Theoretische Physik I
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg



Betreuer: Prof. Dr. Kai Phillip Schmidt

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Antiferromagnetische Quantenspinleiter	3
2.1	Isolierte Heisenberg-Dimere	3
2.2	Dimerisierte Quantenspinleiter	4
2.3	Perturbative Berechnung der Energiekorrekturen	5
2.3.1	Null-Triplon-Zustand	5
2.3.2	Ein-Triplon-Zustände	5
2.3.3	Zwei-Triplon-Zustände	7
3	Quantenspinleiter in einem optischen Resonator	11
3.1	Modell	11
3.2	Perturbative Berechnung der Energiekorrekturen	13
3.2.1	Null-Triplon-Zustand	13
3.2.2	Ein-Triplon-Zustände	14
3.2.3	Zwei-Triplon-Zustände	17
3.3	Betrachtung im thermodynamischen Limes	20
3.3.1	Null-Triplon-Zustand	21
3.3.2	Ein-Triplon-Zustände	21
3.3.3	Zwei-Triplon-Zustände	23
4	Optimierte Basiswahl der bosonischen Operatoren	24
4.1	Bogoliubov-Transformation von \mathcal{H}_{Ph}	24
4.2	Unitäre Transformation des effektiven Hamiltonians (pCUT)	27
4.3	Berechnung der führenden Energiekorrekturen	30
5	Zusammenfassung und Ausblick	35
	Literatur	37
A	Anhang: Meanfield-Approximation	39
A.1	Licht im kohärenten Zustand	39
A.2	Licht im squeezed (coherent) state	40
B	Anhang: pCUT der Observable in erster Ordnung	41

1 Einleitung

Schon seit dem frühen 20. Jahrhundert beschäftigt sich die Forschung mit der quantenmechanischen Beschreibung von Materie und Licht. Dabei wurden die beiden Bereiche anfänglich eher gesondert betrachtet. In der modernen Physik wird der Fokus zunehmend auf das Zusammenspiel verschiedener Wechselwirkungen gelegt: So ist die Betrachtung korrelierter Quanten-Materie in Verbindung mit Licht ein aktuelles Forschungsgebiet. Dabei finden sich bemerkenswerte Auswirkungen der Licht-Materie-Kopplung auf die elektrischen und magnetischen Eigenschaften von Materie. Bisher bekannte interessante Effekte reichen von der Erhöhung der Sprungtemperaturen in Supraleitern [1] bis hin zu neuartigen Quantenphasen in entarteten Quantengasen, die sich in einem optischen Resonator befinden [2].

Zu den aktuellen Veröffentlichungen zählt auch die Transformation des um Quanten-Licht erweiterten Hubbard-Modells zu einem Heisenberg-Modell im Starkkopplungslimes [3]. Das Hubbard-Modell stellt eines der grundlegendsten Modelle in der Festkörperphysik dar, um korrelierte Elektronensysteme zu beschreiben [4]. Der sich aus der Transformation ergebende Hamiltonian wurde jedoch bisher nur auf einen Dimer angewendet.

In dieser Arbeit soll stattdessen das Heisenberg-Modell einer antiferromagnetischen Quantenspinleiter betrachtet werden. Bislang wurde eine solche Spinleiter noch nicht im Wechselspiel mit Licht untersucht. Das Verhalten der elementaren Anregungen ohne Licht ist hingegen gut erforscht.

Die Quantenspinleiter stellt ein System ohne langreichweitige Ordnung dar, das zwischen der eindimensionalen Heisenberg-Kette und einem zweidimensionalen Heisenberg-Modell auf einem Quadratgitter liegt. Es gibt unterschiedliche Realisierungen einer Spinleiter; in dieser Arbeit sollen die Sprossen-Kopplungen stark und die Kopplungen entlang der beiden Holme der Leiter schwach sein. Im Gegensatz zur Heisenberg-Kette erhält man für die Anregungen bei einer Quantenspinleiter eine Energielücke zum Grundzustand für beliebige Kopplungsverhältnisse. Die lückenbehafteten magnetischen Anregungen über dem Singulett-Grundzustand tragen den Spin 1 und entsprechen einem Triplet mit einer Polarisationswolke. Letztere Quasiteilchen werden Triplonen¹ genannt, die je nach Gesamt-Spin attraktiv oder repulsiv wechselwirken. Quantenspinleitern sind zudem relevant für das Verständnis von Hochtemperatur-Supraleitung in Kupraten [6].

Um einen Überblick über die Energien einer Spin- $\frac{1}{2}$ -Leiter ohne Licht-Kopplung

¹Der Begriff Triplon wurde zum ersten Mal in [5] genannt.

zu bekommen, werden in Abschnitt 2, nachdem das Modell eingeführt wurde, perturbativ die Energiekorrekturen für Null-, Ein- und Zwei-Triplon-Zustände berechnet.

Anschließend wird das aus dem Hubbard-Modell resultierende Heisenberg-Modell einer Quantenspinleiter in einem optischen Resonator eingeführt (Abschnitt 3). Die Energiekorrekturen können dann für dieses erweiterte Modell erneut berechnet und mit dem Fall ohne Licht-Materie-Kopplung verglichen werden. Des Weiteren werden die Ergebnisse für den thermodynamischen Limes evaluiert.

In Abschnitt 4 werden Photon-Operatoren durch Bogoliubov-Transformation sowie Triplett-Operatoren durch perturbative CUT (pCUT) in geeignete Basen gedreht, sodass bereits bekannte Resultate für die Quantenspinleiter ohne Licht benutzt und die Effekte der Licht-Materie-Kopplung auf die Energien abgeschätzt werden können.

Zuletzt werden in Abschnitt 5 die Ergebnisse der vorigen Kapitel zusammengefasst. Weiterhin soll ein Ausblick darauf gegeben werden, welche Fragestellungen für zukünftige Untersuchungen offenstehen.

2 Antiferromagnetische Quantenspinleiter

Bevor auf die magnetischen Anregungen einer an Licht gekoppelten Quantenspinleiter eingegangen wird, sollen hier zunächst nur die Anregungen der reinen Quantenspinleiter beleuchtet werden. Um die Energien für Null-, Ein- und Zwei-Triplon-Zustände zu berechnen wird in die zweite Quantisierung übergegangen.

2.1 Isolierte Heisenberg-Dimere

Um die Quantenspinleiter zu verstehen, wird die Heisenberg-Kopplung zunächst an einem einzelnen Dimer untersucht. Der Halmiltonian lautet:

$$\mathcal{H} = J_{\perp} \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2. \quad (2.1)$$

Die Eigenzustände sind gegeben durch:

$$\begin{aligned} |s\rangle &= |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle) \\ |t_1\rangle &= |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |t_0\rangle &= |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) \\ |t_{-1}\rangle &= |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (2.2)$$

Dabei werden die Tripletzustände $|t_{\alpha}\rangle$, die den Gesamt-Spin 1 haben, über den Wert der magnetischen Spin-Quantenzahl unterschieden. Die Eigenenergie des Singulett-Zustandes $|s\rangle$ mit Gesamtspin 0 beträgt $E_{|s\rangle} = -\frac{3}{4}J_{\perp}$. Die Eigenenergie der Triplon-Zustände ergibt sich zu $E_{|t_{\alpha}\rangle} = \frac{1}{4}J_{\perp}$ und ist somit 3-fach entartet. Es sei angemerkt, dass \hbar in dieser Arbeit auf 1 gesetzt wird.

Für N Dimere, welche gegenseitig nicht wechselwirken, sind die Eigenzustände Produktzustände:

$$|\cdots\rangle_1 \otimes \dots \otimes |\cdots\rangle_N,$$

wobei jedes der Dimere in einem Zustand aus Gleichung 2.2 sein kann. Die Eigenenergie zu einem solchen Zustand mit $N_{t_{\alpha}}$ Dimeren im Triplet-Zustand $|t_{\alpha}\rangle$ ist

$$\begin{aligned} \epsilon &= E_S + J_{\perp} \sum_{\alpha \in \{\pm 1, 0\}} N_{t_{\alpha}} \\ \text{mit } E_S &= -\frac{3}{4}J_{\perp} \cdot N \end{aligned} \quad (2.3)$$

E_S ist hierbei die Energie des reinen Singulett-Zustandes, der dem exakten Grundzustand für $J_{\parallel} = 0$ entspricht.

2.2 Dimerisierte Quantenspinleiter

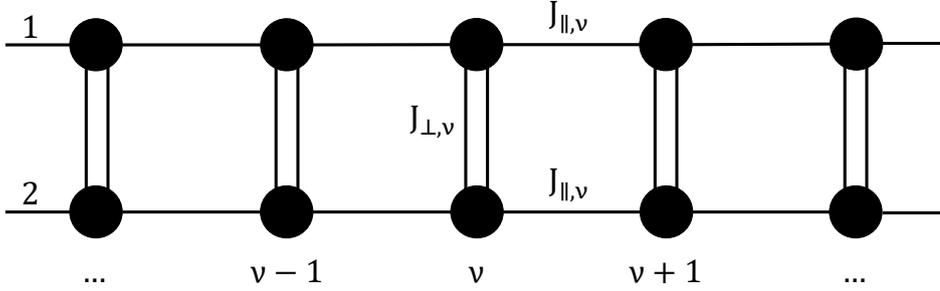


Abbildung 1: Skizze einer Quantenspinleiter. Die *Sprossen* bestehen jeweils aus zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (Dimere). Auf der Sprosse ν sind die Spins senkrecht mit der Stärke $J_{\perp,\nu}$ gekoppelt. Die schwächeren parallelen Kopplungen $J_{\parallel,\nu}$ bilden die *Holme* der Leiter.

Nun kann man einen Schritt weiter gehen und die N Dimere schwach koppeln, sodass sie eine Quantenspinleiter wie in Abbildung 1 bilden. Die Dimere (senkrecht) bilden die Sprossen, deren Position mit $\nu = 1, \dots, N$ gekennzeichnet ist. Die Kopplungsstärke zwischen zwei Spins eines Dimers beträgt analog zu Unterabschnitt 2.1 $J_{\perp,\nu}$. Die Sprossen werden über die Wechselwirkung der Stärke $J_{\parallel,\nu}$ verbunden. Im Folgenden werden platzunabhängige senkrechte und parallele Kopplungsstärken betrachtet: $J_{\perp,\nu} = J_{\perp}$ sowie $J_{\parallel,\nu} = J_{\parallel} \forall \nu$. Zudem soll die Wechselwirkung innerhalb eines Dimers wesentlich stärker sein als die zwischen den einzelnen Dimeren, d.h. $J_{\parallel} \ll J_{\perp}$. Der Hamilton-Operator für die Spinleiter ist dann gegeben durch

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\perp} + \mathcal{H}_{\parallel} = J_{\perp} \sum_{\nu} \hat{S}_{1,\nu} \cdot \hat{S}_{2,\nu} + J_{\parallel} \sum_{\nu} \left(\hat{S}_{1,\nu} \cdot \hat{S}_{1,\nu+1} + \hat{S}_{2,\nu} \cdot \hat{S}_{2,\nu+1} \right), \quad (2.4)$$

wobei der Spinoperator $\hat{S}_{i,\nu}$ auf den Spin an der Stelle $\{i, \nu\}$ wirkt; $i \in \{1, 2\}$ indiziert die Holme der Leiter, siehe Abbildung 1. In dieser Arbeit wird eine Spinleiter mit periodischen Randbedingungen betrachtet. Das bedeutet, dass der Dimer an Position N wieder mit dem bei $\nu = 1$ gekoppelt ist.

Die Energien zu \mathcal{H}_{\perp} aus Gleichung 2.4 sind gerade durch Gleichung 2.3 gegeben. Auf die Berechnung der Energien zu \mathcal{H}_{\parallel} wird in Unterabschnitt 2.3 eingegangen.

Für spätere Betrachtungen ist es nützlich, den Hamilton-Operator im Teilchenbild darzustellen. Dafür wird der Operator $\hat{t}_{\alpha,\nu}^{\dagger}$ eingeführt. Dieser erzeugt lokal am Dimer ν aus einem Singulett-Zustand einen Triplet-Zustand mit Flavour α . Der entsprechende Vernichtungs-Operator ist $\hat{t}_{\alpha,\nu}$.

Es gilt:

$$\begin{aligned} |t_\alpha\rangle_\nu &= \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger |s\rangle_\nu \\ [\hat{t}_{\alpha,\nu}, \hat{t}_{\alpha,\nu'}^\dagger] &= \delta_{\nu\nu'} (1 - \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu} - \sum_\beta \hat{t}_{\beta,\nu}^\dagger \hat{t}_{\beta,\nu}) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Mithilfe dieser Operatoren lässt sich \mathcal{H}_\perp aus Gleichung 2.4 in zweiter Quantisierung darstellen:

$$\mathcal{H}_\perp = E_S + J_\perp \sum_\nu \sum_\alpha \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu} \quad (2.6)$$

2.3 Perturbative Berechnung der Energiekorrekturen

Die Eigenenergien zu Gleichung 2.4 lassen sich perturbativ bestimmen. \mathcal{H}_\perp ist der ungestörte Hamiltonian; \mathcal{H}_\parallel wird als Störung V angesehen. Der Störparameter ist $x = J_\parallel/J_\perp$. Wir beschränken uns auf Zustände mit maximal zwei Dimeren im Triplon-Zustand. Die Anregungen werden im Folgenden auch als Quasiteilchen (englisch: quasiparticle, QP) bezeichnet. Die Energiekorrektur des Null-Triplon-Zustandes wird in zweiter Ordnung, die der Ein- und Zwei-Triplon-Zustände nur in erster Ordnung berechnet.

2.3.1 Null-Triplon-Zustand

Der Grundzustand bzw. Null-Triplon-Zustand $|0\rangle := |s\rangle_1 \otimes \dots \otimes |s\rangle_N$ mit der ungestörten Energie E_S (siehe Gleichung 2.3) ist nicht entartet. Die Störungsrechnung liefert in erster Ordnung keinen Beitrag. In zweiter Ordnung ergibt sich nach der Berechnung von $\langle 0|VSV|0\rangle$, wobei S die Resolvente aus der Takahashi-Störungstheorie ist [7], eine Grundzustandsenergie pro Dimer von

$$\frac{E_2^{0QP}}{N} = -\frac{3}{4}J_\perp - \frac{3}{8}\frac{J_\parallel^2}{J_\perp}. \quad (2.7)$$

2.3.2 Ein-Triplon-Zustände

Die Energie $\epsilon = E_S + J_\perp$ ist aufgrund der drei unterschiedlichen Triplon-Flavours $\alpha \in \{-1, 0, 1\}$ $3N$ -fach entartet. Wegen der $SU(2)$ -Symmetrie des Hamilton-Operators sind der Gesamt-Spin sowie Gesamt- S_z erhalten, weshalb die Energie nur vom Gesamt-Spin abhängt. Daher genügt es, nur einen Flavour-Block mit einer N -fachen Entartung zu betrachten. Hierfür definieren wir Zustände $|\nu\rangle$, welche an der Stelle $\nu \in \{1, \dots, N\}$ ein Triplet, ansonsten nur Singulets haben.

In dieser Basis sieht die Störung wie folgt aus:

$$\underline{V} = \frac{J_{\parallel}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & & & & & 0 \\ 0 & & & & & \vdots \\ \vdots & & & & & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & & & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Die Einträge oben rechts und unten links ergeben sich dabei aus den periodischen Randbedingungen. In Gleichung 2.8 kann man erkennen, dass die Störung ein Hüpfen der Triplet-Zustände um einen Platz bewirkt. In zweiter Quantisierung lässt sich der Ein-Triplon-Hamiltonian $\mathcal{H}_{1\text{QP}}$ in erster Ordnung schreiben als

$$\mathcal{H}_{1\text{QP}} = E_S + J_{\perp} \sum_{\nu} \sum_{\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha,\nu} + \frac{J_{\parallel}}{2} \sum_{\nu} \sum_{\alpha} (\hat{t}_{\alpha,\nu}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha,\nu+1} + \text{h.c.}) \quad (2.9)$$

Wegen der Translations-Invarianz ist der Impuls erhalten und eignet sich gut als Quantenzahl. Die Ein-Triplon-Zustände werden wie folgt in den k -Raum fourier-transformiert:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} e^{ik\nu} |\nu\rangle \quad (2.10)$$

Die Teilchen-Operatoren, die auf die Impuls-Zustände $|k\rangle$ wirken, sind als

$$\hat{t}_{\alpha,k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} e^{ik\nu} \hat{t}_{\alpha,\nu} \quad \hat{t}_{\alpha,k}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} e^{-ik\nu} \hat{t}_{\alpha,\nu}^{\dagger} \quad (2.11)$$

definiert, sodass sich Gleichung 2.9 in den Impulsraum transformieren lässt:

$$\mathcal{H}_{1\text{QP}} = E_S + \sum_k \sum_{\alpha} \omega_{1\text{QP}}(k) \hat{t}_{\alpha,k}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha,k} \quad (2.12)$$

mit $\omega_{1\text{QP}}(k) = J_{\perp} + J_{\parallel} \cos(k)$

Im 1QP-Kanal sind also sowohl \mathcal{H}_{\perp} als auch die Störung V im Impulsraum diagonal. Die Ein-Triplon-Dispersion $\omega_{1\text{QP}}$ nimmt den konstanten Wert J_{\perp} im Fall $J_{\parallel} = 0$ an. Für $J_{\parallel} > 0$ liegt die minimale Anregungsenergie bei $k = \pi$, für $J_{\parallel} < 0$ bei $k = 0$.

2.3.3 Zwei-Triplon-Zustände

Da der Hamilton-Operator den Gesamt-Spin S und die magnetische Quantenzahl m erhält, werden die 2QP-Zustände mit der Energie $\epsilon = E_S + 2J_\perp$ wie in [6, S. 44] als $|S, m\rangle$ definiert:

$$\begin{aligned}
 |2, 2\rangle &= |t_1, t_1\rangle \\
 |2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_1, t_0\rangle + |t_0, t_1\rangle) \\
 |2, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(|t_{-1}, t_1\rangle + 2|t_0, t_0\rangle + |t_1, t_{-1}\rangle) \\
 |2, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_{-1}, t_0\rangle + |t_0, t_{-1}\rangle) \\
 |2, -2\rangle &= |t_{-1}, t_{-1}\rangle \\
 |1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_1, t_0\rangle - |t_0, t_1\rangle) \\
 |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_1, t_{-1}\rangle - |t_{-1}, t_1\rangle) \\
 |1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|t_0, t_{-1}\rangle - |t_{-1}, t_0\rangle) \\
 |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|t_0, t_0\rangle - |t_1, t_{-1}\rangle - |t_{-1}, t_1\rangle)
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Zunächst kann man sich die Wirkung der Störung V auf diese Zustände anschauen. Man findet:

$$\begin{aligned}
 V |2, m\rangle &= \frac{J_\parallel}{2} |2, m\rangle \\
 V |1, m\rangle &= -\frac{J_\parallel}{2} |1, m\rangle \\
 V |0, 0\rangle &= J_\parallel(-|0, 0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} |s, s\rangle)
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

Wie zu erkennen ist, ist die Störung in erster Ordnung in der Basis der Zwei-Triplon-Zustände diagonal. Der Hamiltonian aus Gleichung 2.9 muss nun noch um einen Term erweitert werden, der nur einen Beitrag liefert, wenn sich die Triplon-Zustände auf benachbarten Plätzen $\nu, \nu + 1$ befinden. Es ergibt sich der effektive Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\text{eff}} &= E_S + J_\perp \sum_{\nu, \alpha} \hat{t}_{\alpha, \nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha, \nu} + \frac{J_\parallel}{2} \sum_{\nu, \alpha} (\hat{t}_{\alpha, \nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha, \nu+1} + \text{h.c.}) \\
 &\quad + J_\parallel \sum_{\nu} \sum_{S, S_z} V_S (\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S, S_z} (\hat{t}_\nu \hat{t}_{\nu+1})_{S, S_z}
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

2 Antiferromagnetische Quantenspinleiter

Aus Gleichung 2.14 ist ersichtlich, dass die Wechselwirkung V_S aufgrund der $SU(2)$ -Symmetrie nur vom Gesamt-Spin S abhängt.

$$V_S = \begin{cases} +\frac{1}{2} & S = 2 \\ -\frac{1}{2} & S = 1 \\ -1 & S = 0 \end{cases} \quad (2.16)$$

Um die Energiekorrektur zu erhalten, müssen die Eigenenergien von \mathcal{H}_{eff} berechnet werden. Diese entsprechen für periodische Randbedingungen denen einer unendlich langen Leiter. Analog zur Vorgehensweise bei den Ein-Triplon-Zuständen wird der Hamilton-Operator in den Impulsraum transformiert. Allerdings ist in diesem Fall nur noch der Schwerpunktsimpuls erhalten, weshalb die Fourier-Transformation von folgender Form ist:

$$|k, d\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} e^{ik(\nu + \frac{d}{2})} |\nu, \nu + d\rangle_S, \quad (2.17)$$

wobei $|\nu, \nu + d\rangle_S$ den Zustand bezeichnet, bei dem sich die zwei Triplets mit Gesamtspin S auf den Sprossen ν und $\nu + d$ befinden. Der Abstand zwischen den Triplets ist also $d \in [1, \infty[$. Die Rechnung (analog zu [8, Kap. 5]) ergibt \mathcal{H}_{eff} in der Basis $|k, d\rangle_S$:

$$\underline{\underline{\mathcal{H}_{\text{eff}}}} = \begin{pmatrix} E_S + 2J_{\perp} + J_{\parallel}V_S & J_{\parallel} \cos(\frac{k}{2}) & & & 0 \\ J_{\parallel} \cos(\frac{k}{2}) & E_S + 2J_{\perp} & J_{\parallel} \cos(\frac{k}{2}) & & \\ J_{\parallel} \cos(\frac{k}{2}) & E_S + 2J_{\perp} & J_{\parallel} \cos(\frac{k}{2}) & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Wie schon erwähnt, liefert der V_S -Term nur einen Beitrag für $d = 1$. Die Störung ist folglich $J_{\parallel} \cdot \underline{\underline{V}}_{2T}$ mit

$$\underline{\underline{V}}_{2T} = \begin{pmatrix} V_S & \cos(\frac{k}{2}) & & & 0 \\ \cos(\frac{k}{2}) & 0 & \cos(\frac{k}{2}) & & \\ & \cos(\frac{k}{2}) & 0 & \cos(\frac{k}{2}) & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Um die Eigenwerte dieser unendlich-dimensionalen Matrix zu berechnen, wird zunächst eine $n \times n$ -Matrix betrachtet; am Ende lässt man n gegen unendlich laufen. Das charakteristische Polynom der Störungsmatrix lautet (vgl. [8, Kap. 5]):

$$\chi(\lambda) = (V_S - \lambda) \det(A_{n-1} - \lambda \mathbf{1}) - \cos^2\left(\frac{k}{2}\right) \det(A_{n-2} - \lambda \mathbf{1}) \stackrel{!}{=} 0, \quad (2.20)$$

wobei A_n eine $n \times n$ -Matrix ist, die außer $\cos(\frac{k}{2})$ auf den beiden ersten Nebendiagonalen nur Einträge gleich Null aufweist. Sie hat die Form einer Tridiagonal-Toeplitz-Matrix, deren Eigenwerte bekannt sind:

$$\lambda_i = 2 \cos\left(\frac{k}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi i}{n+1}\right), \quad i = 1, \dots, n \quad (2.21)$$

Die Eigenwerte liegen für $n \rightarrow \infty$ dicht im Intervall $I = (-|2 \cos(\frac{k}{2})|, |2 \cos(\frac{k}{2})|)$ und sind auch Eigenwerte von \underline{V}_{2T} . Der Eigenwert λ_0 zum (anti-)gebundenen Zustand ist kein Eigenwert der Matrix A_n . Um λ_0 zu ermitteln, wird die Rekursion

$$\det(A_n - \lambda \mathbf{1}) = \frac{\cos^2\left(\frac{k}{2}\right)}{V_S - \lambda} \det(A_{n-1} - \lambda \mathbf{1}), \quad (2.22)$$

die aus Gleichung 2.20 folgt, zusammen mit der Rekursion

$$\det(A_n - \lambda \mathbf{1}) = -\lambda \det(A_{n-1} - \lambda \mathbf{1}) - \cos^2\left(\frac{k}{2}\right) \det(A_{n-2} - \lambda \mathbf{1}), \quad (2.23)$$

welche weiterhin für A_n gilt, gelöst unter der Bedingung, dass $\det(A_n - \lambda_0 \mathbf{1}) \neq 0$. Man erhält:

$$\lambda_0 = V_S + \frac{1}{V_S} \cos^2\left(\frac{k}{2}\right) \quad (2.24)$$

Dabei liegt λ_0 nur außerhalb des Kontinuums bzw. des Intervalls I , falls

$$k \in \left(2 \arccos\left(|V_S|\right), 2 \arccos\left(-|V_S|\right)\right). \quad (2.25)$$

In Abbildung 2 ist λ_0 für die verschiedenen Wechselwirkungen V_S in Abhängigkeit von k dargestellt. Zusätzlich zur analytischen Lösung aus Gleichung 2.24 wurde das Eigenwertspektrum numerisch ermittelt. Die Eigenwerte der Matrix \underline{V}_{2T} für $n = 1000$ wurden für diskrete k berechnet und stimmen gut mit den analytischen Ergebnissen überein.

2 Antiferromagnetische Quantenspinleiter

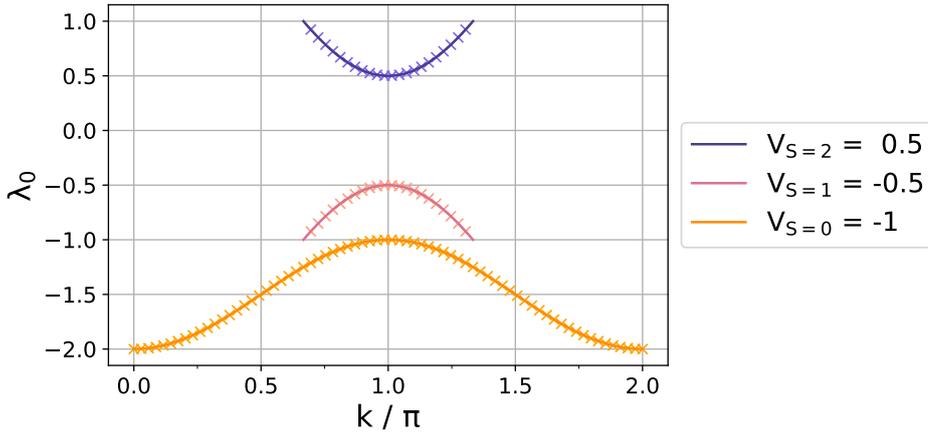


Abbildung 2: Eigenwerte außerhalb des Kontinuums für unterschiedlichen Gesamt-Spin. Numerisch (Kreuze) und analytisch (Linien) ermittelte Ergebnisse stimmen überein.

Zusammenfassend ergibt sich schließlich für die Zwei-Triplon-Zustände eine Dispersion des (anti-)gebundenen Zustandes von

$$\omega_{2\text{QP},0}(k) = 2J_{\perp} + J_{\parallel} \left(V_S + \frac{1}{V_S} \cos^2 \left(\frac{k}{2} \right) \right). \quad (2.26)$$

Mit der 1QP-Dispersion aus Gleichung 2.12 hat das Zwei-Triplon-Kontinuum die Form

$$\omega_{2\text{QP}}(k) = \omega_{1\text{QP}} \left(\frac{k}{2} + k' \right) + \omega_{1\text{QP}} \left(\frac{k}{2} - k' \right) \quad (2.27)$$

mit $k' \in [0, 2\pi]$. Die Dispersionen sind in Abbildung 3 für $x = \frac{J_{\parallel}}{J_{\perp}} = 0.2$ dargestellt.

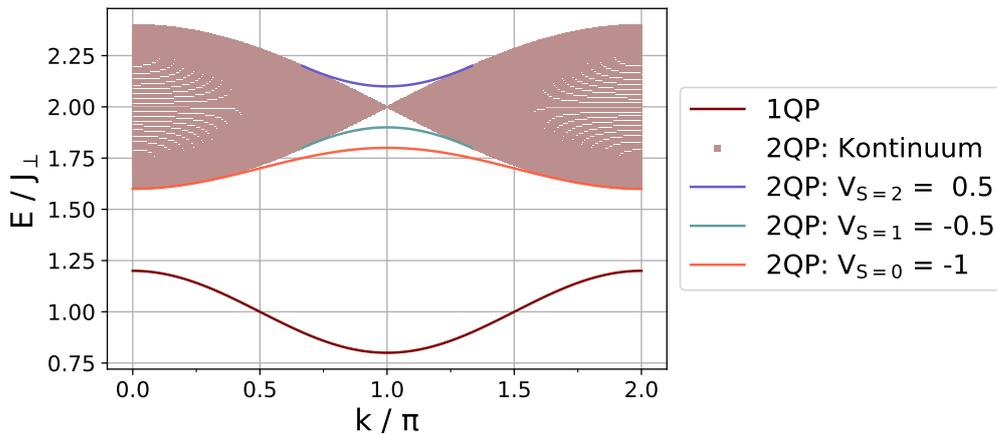


Abbildung 3: Abhängigkeit der Energie von k für 1QP- und 2QP-Zustände bei $x = J_{\parallel}/J_{\perp} = 0.2$. Der gebundene Zustand mit $V_{S=0} = -1$ schmiegt sich an das Kontinuum an, wohingegen der (anti-)gebundene Zustand mit $|V_S| = 0.5$ bei $k = \pi \pm \frac{\pi}{3}$ in das Kontinuum eintaucht.

3 Quantenspinleiter in einem optischen Resonator

In diesem Kapitel soll das bisher diskutierte Modell der Quantenspinleiter um Licht erweitert werden. Bei dem Modell, welches in Unterabschnitt 3.1 präsentiert wird, handelt es sich um das Photon-Spin-Heisenberg-Modell, das aus der Transformation des Hubbard-Modells in einem Resonator resultiert [3], bei kleiner Licht-Materie-Kopplungsstärke. Durch Störungsrechnung in parallelen Spin- (J^{\parallel}) und Licht-Materie-Kopplungen (g_{\perp}, g_{\parallel}) lässt sich der Effekt, den die Licht-Materie-Kopplung auf die magnetischen Anregungen hat, diskutieren.

3.1 Modell

Zunächst werden die Operatoren, die auf Zustände des photonischen Anteils des Hilbertraums wirken, eingeführt. Dabei wird nur eine Licht-Mode betrachtet. Die Anzahl der Photonen n_{Ph} im Resonator kann durch die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren $\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}$ verändert werden. Für diese Operatoren gelten die bosonischen Kommutatorrelationen:

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1 \quad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}^{\dagger}] = 0 \quad (3.1)$$

Die Wirkung der Operatoren auf photonische Zustände $|n_{\text{Ph}}\rangle$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \hat{a} |n_{\text{Ph}}\rangle &= \sqrt{n_{\text{Ph}}} |n_{\text{Ph}} - 1\rangle \\ \hat{a}^{\dagger} |n_{\text{Ph}}\rangle &= \sqrt{n_{\text{Ph}} + 1} |n_{\text{Ph}} + 1\rangle \end{aligned} \quad (3.2)$$

Hierbei ist $|n_{\text{Ph}}\rangle$ der Eigenvektor vom Teilchenzahloperator $\hat{N}_{\text{Ph}} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ mit Eigenwert n_{Ph} . Zusammen mit den bisher behandelten magnetischen Zuständen werden also nun Zustände der Form $|\text{magn}\rangle \otimes |n_{\text{Ph}}\rangle$ betrachtet.

Ausgangspunkt der Berechnungen ist das Spin-Photon-Heisenberg-Modell aus [3]:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle rs \rangle} \left(\hat{\vec{S}}_r \cdot \hat{\vec{S}}_s - \frac{1}{2} \right) \mathcal{J}_{\langle rs \rangle} (\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}) + \Omega \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \quad (3.3)$$

Die Kopplungskonstanten $J_{\perp/\parallel}$ werden also durch einen Operator $\mathcal{J}_{\langle rs \rangle}$ ersetzt, der auf die photonischen Zustände wirkt.

Für den in dieser Arbeit betrachteten Grenzfall kleiner Licht-Materie-Wechselwirkungen $g_{\perp/\parallel} \ll 1$ liest sich der Hamiltonian dann wie folgt

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} &= J_{\text{ex}}^{\perp} \sum_{\nu} \left(\hat{S}_{1,\nu} \cdot \hat{S}_{2,\nu} - \frac{1}{2} \right) + \Omega \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \\
 &+ \left((c_1^{\perp} + c_2^{\perp} \hat{a}^{\dagger} \hat{a}) + c_3^{\perp} (\hat{a}^{\dagger} \hat{a}^{\dagger} + \text{h.c.}) \right) \sum_{\nu} \left(\hat{S}_{1,\nu} \cdot \hat{S}_{2,\nu} - \frac{1}{2} \right) \\
 &+ \left(J_{\text{ex}}^{\parallel} + c_1^{\parallel} + c_2^{\parallel} \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + c_3^{\parallel} (\hat{a}^{\dagger} \hat{a}^{\dagger} + \text{h.c.}) \right) \sum_{\nu} \left(\hat{S}_{1,\nu} \cdot \hat{S}_{1,\nu+1} + \hat{S}_{2,\nu} \cdot \hat{S}_{2,\nu+1} - \frac{1}{2} \right) \\
 c_1^{\perp/\parallel} &= -J_{\text{ex}}^{\perp/\parallel} g_{\perp/\parallel}^2 \frac{\bar{\omega}}{1 + \bar{\omega}}, \quad c_2^{\perp/\parallel} = J_{\text{ex}}^{\perp/\parallel} g_{\perp/\parallel}^2 \frac{2\bar{\omega}^2}{1 - \bar{\omega}^2}, \\
 c_3^{\perp/\parallel} &= J_{\text{ex}}^{\perp/\parallel} g_{\perp/\parallel}^2 \frac{\bar{\omega}^2 + 2\bar{\omega}^4}{(1 - \bar{\omega}^2)(1 - 4\bar{\omega}^2)}
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Wie man erkennen kann kommen bis $\mathcal{O}(g^3)$ nur Terme vor, die die Photonenzahl erhalten oder sie um 2 verändern. Die Hubbard-Konstante U des Ursprungsmodells geht über $\bar{\omega} = \Omega/U$ in die Gleichungen ein.

Da sich die Dispersionen zu verschiedenen Photonenzahlen nicht überschneiden sollen, siehe Abbildung 4, gilt $\Omega \gg J_{\text{ex}}$. Nach wie vor sollen die intradimeren (senkrechten) Kopplungen wesentlich stärker als die interdimeren (parallelen) sein, d.h. $J_{\text{ex}}^{\perp} \gg J_{\text{ex}}^{\parallel}$.

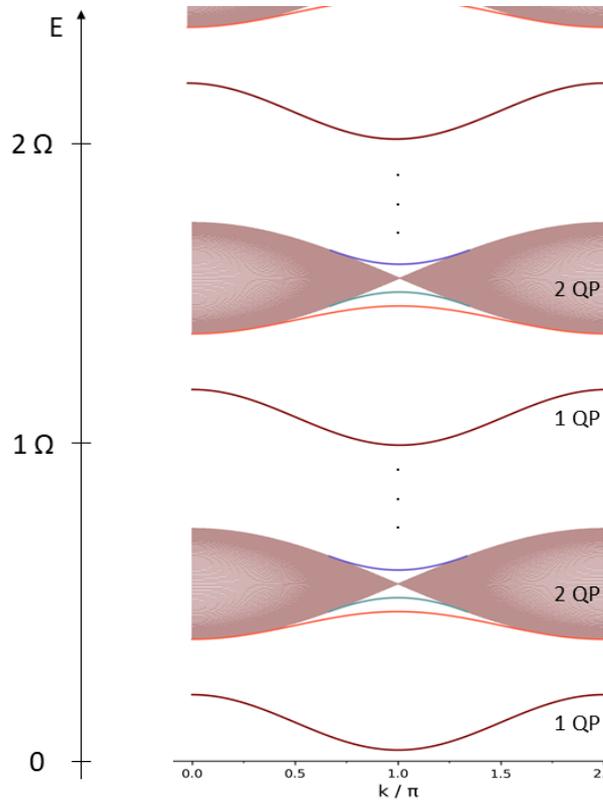


Abbildung 4: Skizze der Energiespektren. Für $g = 0$ sollen sich die magnetischen Anregungen für verschiedene Photonenzahlen nicht überschneiden, d.h. $\Omega \gg J_{\text{ex}}^{\perp}$.

3.2 Perturbative Berechnung der Energiekorrekturen

Analog zu den Berechnungen in Unterabschnitt 2.3 werden hier die Energiekorrekturen der an Licht gekoppelten Quantenspinleiter berechnet und analysiert. Der ungestörte Hamiltonian

$$\mathcal{H}_0 = J_{\text{ex}}^\perp \sum_{\nu} \left(\hat{S}_{1,\nu} \cdot \hat{S}_{2,\nu} - \frac{1}{2} \right) + \Omega \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (3.5)$$

wirkt auf die magnetischen und die photonischen Zustände in den unterschiedlichen Unterhilberträumen einzeln.

Die Eigenenergien sind deshalb gegeben durch

$$E_0 = J_{\text{ex}}^\perp \left(-\frac{5}{4}N + N_t \right) + n_{\text{Ph}}\Omega, \quad (3.6)$$

wobei N wieder die Anzahl der Dimere ist und N_t die Anzahl der Triplon-Anregungen auf der Quantenspinleiter. Die restlichen Terme aus Gleichung 3.4 können als Störung angesehen werden.

Die folgende Störungsrechnung wird gleichzeitig in den Parametern $x = J_{\text{ex}}^\parallel / J_{\text{ex}}^\perp$, g_\perp und g_\parallel durchgeführt. Hierbei werden die Energiekorrekturen für Null-, Ein- und Zwei-Triplon-Zustände mit n_{Ph} Photonen in zweiter Ordnung berechnet.

3.2.1 Null-Triplon-Zustand

Zunächst werden die Energiekorrekturen des Null-Triplon-Zustandes $|0\rangle \otimes |n_{\text{Ph}}\rangle$ berechnet. Der effektive Hamiltonian ist im Teilchenbild gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{0QP}} = E_0 - \frac{5}{4}N & \left(c_1^\perp + c_2^\perp \hat{a}^\dagger \hat{a} + c_3^\perp (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) \right) \\ & + \frac{1}{2} \left(J_{\text{ex}}^\parallel + c_1^\parallel + c_2^\parallel \hat{a}^\dagger \hat{a} + c_3^\parallel (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) \right) \cdot \left[-N + \sqrt{3} \sum_{\nu} (\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

Die Korrektur erster Ordnung liefert im Unterschied zum Fall ohne Licht nun einen Beitrag und beinhaltet die Beiträge aus Triplon- und Photonenzahl erhaltenden Termen

$$E_1^{\text{0QP}, n_{\text{Ph}}} = -\frac{5}{4}N(c_1^\perp + c_2^\perp n_{\text{Ph}}) - \left(J_{\text{ex}}^\parallel + c_1^\parallel + c_2^\parallel n_{\text{Ph}} \right) \frac{N}{2}. \quad (3.8)$$

In zweiter Ordnung zeigt sich der führende Effekt der Triplon- und Photonenzahl verändernden Terme, siehe Gleichung 3.9.

$$\begin{aligned}
 E_2^{0\text{QP},n_{\text{Ph}}} &= -3N \left(\frac{J_{\text{ex}}^{\parallel} + c_1^{\parallel} + c_2^{\parallel} n_{\text{Ph}}}{2} \right)^2 \frac{1}{2J_{\text{ex}}^{\perp}} \\
 &+ 3N \left(\frac{c_3^{\parallel}}{2} \right)^2 \left[\frac{(n_{\text{Ph}} - 1)n_{\text{Ph}}}{-2J_{\text{ex}}^{\perp} + 2\Omega} - \frac{(n_{\text{Ph}} + 1)(n_{\text{Ph}} + 2)}{2J_{\text{ex}}^{\perp} + 2\Omega} \right] \\
 &+ N^2 [(n_{\text{Ph}} - 1)n_{\text{Ph}} - (n_{\text{Ph}} + 1)(n_{\text{Ph}} + 2)] \left(-\frac{5}{4}c_3^{\perp} - \frac{1}{2}c_3^{\parallel} \right)^2 \frac{1}{2\Omega}
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Die Energie des 0QP-Zustandes wird folglich verringert - je mehr Dimere und je mehr Photonen, desto stärker zeigt sich der Effekt.

3.2.2 Ein-Triplon-Zustände

Als Nächstes folgt die Berechnung für die Ein-Triplon-Zustände $|\nu\rangle \otimes |n_{\text{Ph}}\rangle$.

Der effektive Hamilton-Operator lautet für diese

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\text{eff}}^{1\text{QP}} &= E_0 + \left(c_1^{\perp} + c_2^{\perp} \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + c_3^{\perp} (\hat{a}^{\dagger} \hat{a}^{\dagger} + \hat{a} \hat{a}) \right) \left[-\frac{5}{4}N + \sum_{\nu,\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha,\nu} \right] \\
 &+ \frac{1}{2} \left(J_{\text{ex}}^{\parallel} + c_1^{\parallel} + c_2^{\parallel} \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + c_3^{\parallel} (\hat{a}^{\dagger} \hat{a}^{\dagger} + \hat{a} \hat{a}) \right) \left[-N + \sqrt{3} \sum_{\nu} (\hat{t}_{\nu}^{\dagger} \hat{t}_{\nu+1}^{\dagger})_{S=0} \right. \\
 &\left. + \sum_{\alpha,\nu} (\hat{t}_{\alpha,\nu}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha,\nu+1} + \text{h.c.}) \right]
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Die erste Ordnung kann analog zu Unterabschnitt 2.3.2 durch Transformation in den Impulsraum berechnet werden. Das ergibt

$$E_1^{1\text{QP},n_{\text{Ph}}}(k) = (c_1^{\perp} + c_2^{\perp} n_{\text{Ph}}) \left(-\frac{5}{4}N + 1 \right) + \left(J_{\text{ex}}^{\parallel} + c_1^{\parallel} + c_2^{\parallel} n_{\text{Ph}} \right) \left(\cos(k) - \frac{N}{2} \right) \tag{3.11}$$

Für die zweite Ordnung erhält man für jeden α -Block eine Matrix mit Einträgen auf der Diagonale (D_0) und Einträgen auf den ersten (D_1) und zweiten Nebendiagonalen (D_2), vgl. Gleichung 3.12. Die Einträge auf der zweiten Nebendiagonalen kommen durch das Triplett-Hüpfen um 2 Plätze zustande.

$$\begin{pmatrix}
 D_0 & D_1 & D_2 & & \mathbf{0} \\
 D_1 & D_0 & D_1 & D_2 & \\
 D_2 & D_1 & D_0 & D_1 & D_2 \\
 & D_2 & D_1 & \ddots & \ddots \\
 & & D_2 & \ddots & \ddots \\
 \mathbf{0} & & & & \ddots
 \end{pmatrix} \tag{3.12}$$

Die Diagonaleinträge der Matrix aus 3.12 sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
 D_0 = & (n_{\text{Ph}} + 1)(n_{\text{Ph}} + 2) \left(\frac{c_3^{\parallel}}{2} \right)^2 \left[-\frac{1}{\Omega} - 3(N - 2) \frac{1}{2J_{\text{ex}}^{\perp} + 2\Omega} \right] \\
 & + (n_{\text{Ph}} - 1)n_{\text{Ph}} \left(\frac{c_3^{\parallel}}{2} \right)^2 \left[\frac{1}{\Omega} + 3(N - 2) \frac{1}{-2J_{\text{ex}}^{\perp} + 2\Omega} \right] \\
 & - 3(N - 2) \left(\frac{J_{\text{ex}}^{\parallel} + c_1^{\parallel} + c_2^{\parallel} n_{\text{Ph}}}{2} \right)^2 \frac{1}{2J_{\text{ex}}^{\perp}} \\
 & + \left(c_3^{\perp} - \frac{5}{4} N c_3^{\perp} - \frac{1}{2} N c_3^{\parallel} \right)^2 \left[-(n_{\text{Ph}} + 1)(n_{\text{Ph}} + 2) + (n_{\text{Ph}} - 1)n_{\text{Ph}} \right] \frac{1}{2\Omega}.
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Weiterhin gilt:

$$D_1 = -c_3^{\parallel} \frac{2n_{\text{Ph}} + 1}{\Omega} \left[c_3^{\perp} \left(-\frac{5}{4} N + 1 \right) - c_3^{\parallel} \frac{N}{2} \right]. \tag{3.14}$$

Für die zweiten Nebendiagonalen lassen sich die folgenden Einträge finden:

$$\begin{aligned}
 D_2 = & (n_{\text{Ph}} + 1)(n_{\text{Ph}} + 2) \left(\frac{c_3^{\parallel}}{2} \right)^2 \left[-\frac{1}{2\Omega} - \frac{1}{2J_{\text{ex}}^{\perp} + 2\Omega} \right] \\
 & + (n_{\text{Ph}} - 1)n_{\text{Ph}} \left(\frac{c_3^{\parallel}}{2} \right)^2 \left[\frac{1}{2\Omega} + \frac{1}{-2J_{\text{ex}}^{\perp} + 2\Omega} \right] \\
 & - \left(\frac{J_{\text{ex}}^{\parallel} + c_1^{\parallel} + c_2^{\parallel} n_{\text{Ph}}}{2} \right)^2 \frac{1}{2J_{\text{ex}}^{\perp}}.
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Die Matrixelemente aus Gleichung 3.13 bis 3.15 kommen durch Prozesse zustande, in denen zwei Photonen erzeugt bzw. vernichtet werden ($\propto \frac{1}{\Omega}$) und durch solche, in denen zwei Triplonen erzeugt bzw. vernichtet werden ($\propto \frac{1}{J_{\text{ex}}^{\perp}}$). Zudem gibt es Terme, die aus Photonen- und Triplonzahl verändernden Prozessen stammen. Um die Matrix zu diagonalisieren wird wieder eine Fourier-Transformation durchgeführt. Man erhält

$$E_2^{1\text{QP}, n_{\text{Ph}}}(k) = D_0 + 2D_1 \cos(k) + 2D_2 \cos(2k) \tag{3.16}$$

Die sich so in zweiter Ordnung Störungsrechnung ergebende Energie ist in Abbildung 5 für die Licht-Materie-Kopplungen $g = g_{\perp/\parallel} = 0.1$ und in Abbildung 6 für $g = g_{\perp/\parallel} = 0.4$ für verschiedene N und n_{Ph} dargestellt. Dabei wurde die Energie des Grundzustands $|0\rangle \otimes |0\rangle$ (kein Triplon, keine Photonen) zuvor subtrahiert. Der Offset $+n_{\text{Ph}}\Omega$ aus E_0 wurde hier nicht berücksichtigt, um die Dispersionsverformung aufgrund des kleineren Wertebereichs besser erkennen zu können.

Die Licht-Materie-Kopplung verursacht einen Offset, der die Energie für größere N und n_{Ph} nach oben verschiebt. In Abbildung 6 wird aufgrund der größeren

3 Quantenspinleiter in einem optischen Resonator

Licht-Materie-Wechselwirkung weiterhin ein Effekt sichtbar, der in Abbildung 5 noch nicht zu erkennen ist: Die Dispersion verformt sich mit verschiedenen Photonenzahlen. Für kleine Photonenzahlen ist die k -Abhängigkeit nicht so gewichtig wie für größere.

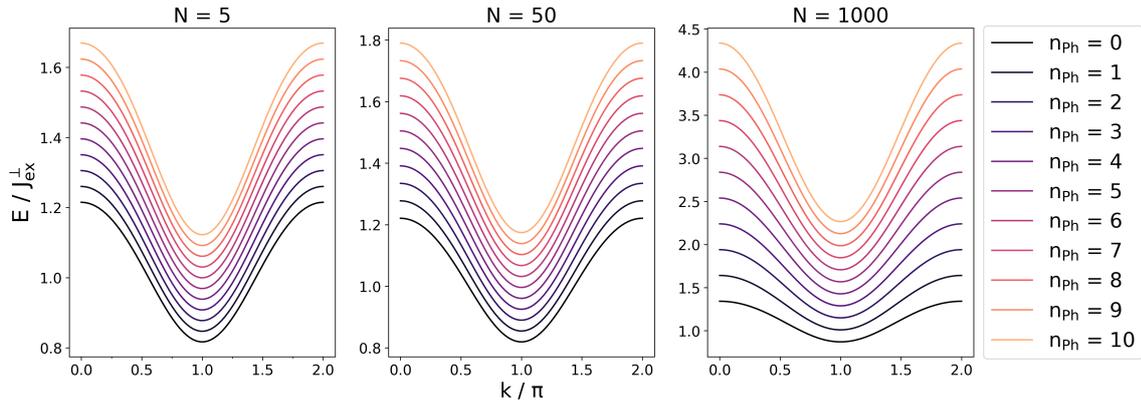


Abbildung 5: Ein-Triplon-Dispersionen für eine schwache Licht-Materie-Kopplung $g = 0.1$ in Einheiten von J_{ex}^{\perp} . Für $N = 5, 50, 1000$ sind die k -abhängigen Energien jeweils für n_{ph} von 0 bis 10 dargestellt. Dabei ist $x = J_{\text{ex}}^{\parallel} / J_{\text{ex}}^{\perp} = 0.2$, $\bar{\omega} = 0.8$ und $\Omega = 10$. Der Wert von Ω ist hier wie auch im Folgenden in Einheiten von J_{ex}^{\perp} angegeben.

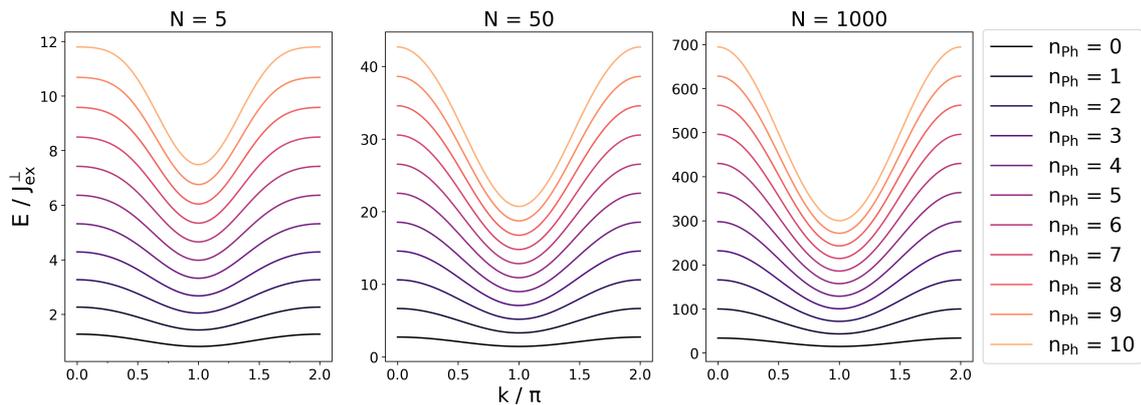


Abbildung 6: Ein-Triplon-Dispersionen für eine stärkere Licht-Materie-Kopplung $g = 0.4$ in Einheiten von J_{ex}^{\perp} . Hier wird sichtbar, dass sich die Dispersion für unterschiedliche n_{ph} verformt. Sonstige Parameter sind wie in Abbildung 5 gewählt.

$$\begin{aligned}
 a &= D_0 + \frac{3}{J_{\text{ex}}^{\perp}} \left(\frac{J_{\text{ex}}^{\parallel} + c_1^{\parallel} + c_2^{\parallel} n_{\text{Ph}}}{2} \right)^2 - \left[c_3^{\perp 2} \left(-\frac{5}{2}N + 3 \right) - c_3^{\parallel} c_3^{\perp} N \right] \frac{2n_{\text{Ph}} + 1}{\Omega} + \frac{4n_{\text{Ph}} + 2}{\Omega} \left(\frac{c_3^{\parallel}}{2} \right)^2 \\
 &\quad - 6 \left(\frac{c_3^{\parallel}}{2} \right)^2 \left(-\frac{(n_{\text{Ph}} + 1)(n_{\text{Ph}} + 2)}{2\Omega + 2J_{\text{ex}}^{\perp}} + \frac{n_{\text{Ph}}(n_{\text{Ph}} - 1)}{2\Omega - 2J_{\text{ex}}^{\perp}} \right) + 4 \left(\frac{c_3^{\parallel}}{2} \right)^2 \frac{-2n_{\text{Ph}} - 1}{\Omega} (1 + \cos(k)) \\
 b_0 &= c_3^{\parallel} \left[c_3^{\perp} \left(-\frac{5}{4}N + 2 \right) - c_3^{\parallel} \frac{N}{2} + c_3^{\parallel} V_S \right] \frac{-2n_{\text{Ph}} - 1}{\Omega} \cos\left(\frac{k}{2}\right) \\
 b &= b_0 + c_3^{\parallel 2} V_S \frac{2n_{\text{Ph}} + 1}{\Omega} \cos\left(\frac{k}{2}\right) \\
 c &= 2 \frac{-2n_{\text{Ph}} - 1}{\Omega} \left(\frac{c_3^{\parallel}}{2} \right)^2 + 2D_2 \cos(k)
 \end{aligned}$$

In zweiter Ordnung gibt es Matrixelemente, die nicht aus dem Ein-Teilchen-Sektor kommen. Im Unterschied zum Fall ohne Licht können die Teilchen beliebig weit voneinander entfernt sein, um zu wechselwirken bzw. sich zu bewegen. Solche Terme kommen auf der Diagonalen und auf der zweiten Nebendiagonalen vor. Im Eintrag c etwa kommt der erste Summand dadurch zustande, dass sich das linke Triplon um eins nach rechts, das rechte um einen Platz nach links verschiebt; oder umgekehrt, falls der Abstand sich um 2 verringert (untere zweite Nebendiagonale). Der Cosinus-Term entsteht nach wie vor durch das Hüpfen eines der beiden Triplonen.

Auch auf der Diagonale sind unter anderem Prozesse zu finden, wo sich beide Triplonen so bewegen, dass der relative Abstand d gleich bleibt. Zur ersten Nebendiagonalen hingegen tragen in der zweiten Ordnung nur Prozesse bei, bei denen sich lediglich eines der Triplonen um einen Platz bewegt.

Das Eigenwertspektrum der Matrix aus Gleichung 3.25 wurde für $N = 50$ numerisch ermittelt und die sich daraus ergebenden Energien sind in Abbildung 7 jeweils für den Gesamtspin $S = 1$ in Einheiten von J_{ex}^{\perp} aufgetragen. Wie bei den 1-Triplon-Dispersionen ist zu sehen, dass der Offset zwischen den verschiedenen Photonenzahlen mit größerem g steigt. Da die einzelnen Dispersionen schwer zu erkennen sind, sind sie einzeln in Abbildung 8 zu sehen. Das Kontinuum besitzt für weniger Photonen eine kleinere Ausdehnung.

Auch die Bindungsenergie ist von der Anzahl der Photonen abhängig: In Abbildung 9 ist die Differenz zwischen dem kleinsten und dem nächstkleineren Eigenwert dargestellt. Man kann erkennen, dass der Eigenwert zum gebundenen Zustand für größere Photonenzahlen in einem größeren k -Intervall existiert. Gleichzeitig steigt die Bindungsenergie für größere n_{Ph} .

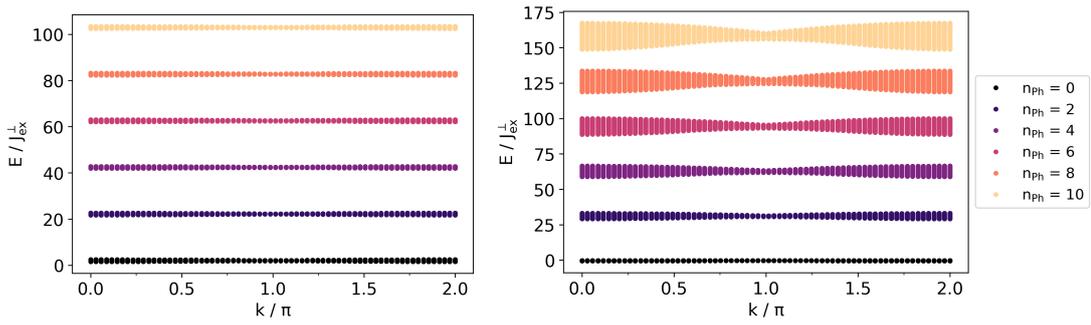


Abbildung 7: Vergleich der Energien bei unterschiedlich starken Licht-Materie-Wechselwirkungen: (a) $g = 0.1$, (b) $g = 0.4$ für $\Omega = 5$.

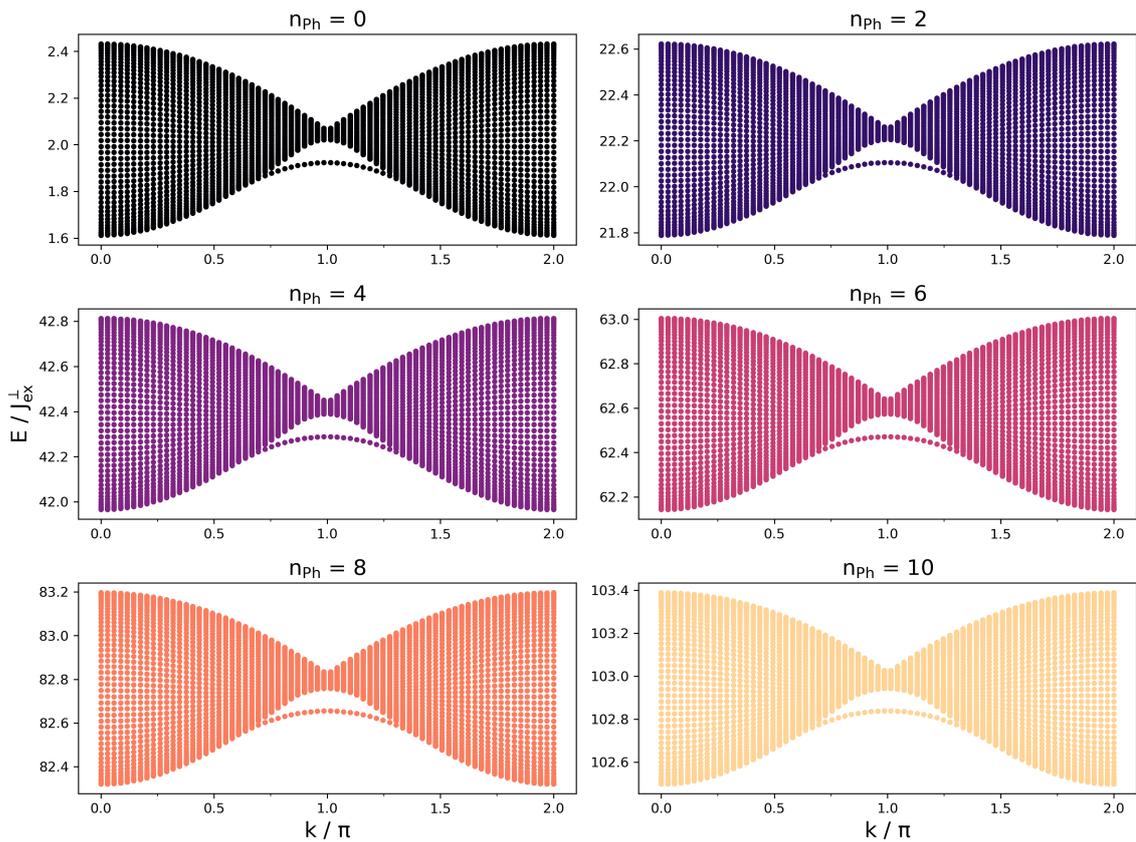


Abbildung 8: Einzelne Eigenwertspektren bei $N = 50$, $x = 0.2$ und $g = 0.1$.

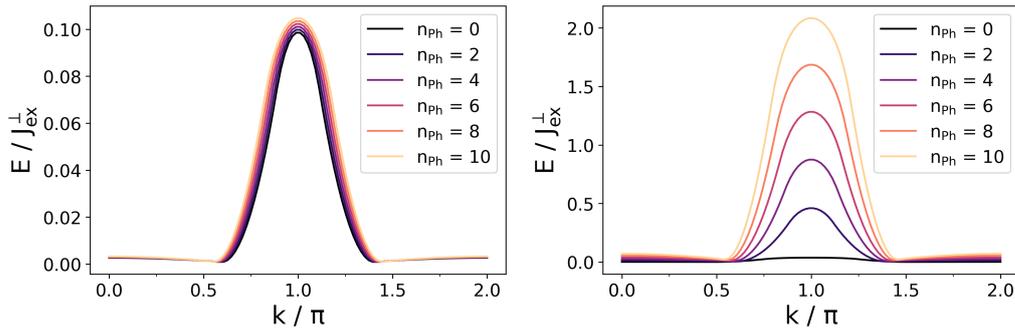


Abbildung 9: Bindungsenergien bei Licht-Materie-Wechselwirkungen von (a) $g = 0.1$ und (b) $g = 0.4$.

3.3 Betrachtung im thermodynamischen Limes

Für die Betrachtung großer Systeme muss die Licht-Materie-Kopplungskonstante g reskaliert werden: $g \rightarrow g/\sqrt{N}$. Dadurch erhält man den effektiven Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\text{eff}} = & J_{\text{ex}}^{\perp} \left[-\frac{5}{4}N + \sum_{\nu, \alpha} \hat{t}_{\alpha, \nu}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha, \nu} \right] + \Omega \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \\
 & + \left(\tilde{c}_1^{\perp} + \tilde{c}_2^{\perp} \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \tilde{c}_3^{\perp} (\hat{a}^{\dagger} \hat{a}^{\dagger} + \hat{a} \hat{a}) \right) \left[-\frac{5}{4}N + \sum_{\nu, \alpha} \hat{t}_{\alpha, \nu}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha, \nu} \right] \\
 & + \frac{1}{2} \left(J_{\text{ex}}^{\parallel} + \tilde{c}_1^{\parallel} + \tilde{c}_2^{\parallel} \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \tilde{c}_3^{\parallel} (\hat{a}^{\dagger} \hat{a}^{\dagger} + \hat{a} \hat{a}) \right) \left[-N + \sqrt{3} \sum_{\nu} ((\hat{t}_{\nu}^{\dagger} \hat{t}_{\nu+1}^{\dagger})_{S=0} + \text{h.c.}) \right. \\
 & \quad \left. + \sum_{\alpha, \nu} (\hat{t}_{\alpha, \nu}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha, \nu+1} + \text{h.c.}) + 2 \sum_{\nu} \sum_{S, S_z} V_S (\hat{t}_{\nu}^{\dagger} \hat{t}_{\nu+1}^{\dagger})_{S, S_z} (\hat{t}_{\nu} \hat{t}_{\nu+1})_{S, S_z} \right] \\
 \tilde{c}_1^{\perp/\parallel} = & -J_{\text{ex}}^{\perp/\parallel} \frac{g_{\perp/\parallel}^2}{N} \frac{\bar{\omega}}{1 + \bar{\omega}}, \quad \tilde{c}_2^{\perp/\parallel} = J_{\text{ex}}^{\perp/\parallel} \frac{g_{\perp/\parallel}^2}{N} \frac{2\bar{\omega}^2}{1 - \bar{\omega}^2}, \\
 \tilde{c}_3^{\perp/\parallel} = & J_{\text{ex}}^{\perp/\parallel} \frac{g_{\perp/\parallel}^2}{N} \frac{\bar{\omega}^2 + 2\bar{\omega}^4}{(1 - \bar{\omega}^2)(1 - 4\bar{\omega}^2)}
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

Da $g_{\perp/\parallel}$ quadratisch in die Licht-Materie-Koeffizienten $c^{\perp/\parallel}$ eingeht, skalieren die effektiven $\tilde{c}^{\perp/\parallel}$ mit $1/N$. Mit Gleichung 3.20 können die Ergebnisse aus Unterabschnitt 3.2 im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ untersucht werden. Dabei wird in dieser Arbeit von einer endlichen Anzahl an Photonen n_{ph} ausgegangen.

3.3.1 Null-Triplon-Zustand

Für die Energie der Null-Triplon-Zustände ergibt sich im thermodynamischen Limes

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0\text{QP}}^{n_{\text{Ph}}} = & E_0^{0\text{QP}, n_{\text{Ph}}} - \frac{5}{4}(c_1^\perp + c_2^\perp n_{\text{Ph}}) - \frac{1}{2}c_2^\parallel n_{\text{Ph}} - J_{\text{ex}}^\parallel \frac{N}{2} - \frac{1}{2}c_1^\parallel - \frac{3}{4}N \frac{J_{\text{ex}}^\parallel{}^2}{2J_{\text{ex}}^\perp} \\ & - \frac{3}{4} \frac{J_{\text{ex}}^\parallel}{J_{\text{ex}}^\perp} (c_1^\parallel + c_2^\parallel n_{\text{Ph}}) - \frac{2n_{\text{Ph}} + 1}{\Omega} \left(\frac{5}{4}c_3^\perp + \frac{1}{2}c_3^\parallel \right)^2 \end{aligned} \quad (3.21)$$

Die extensiven Terme, die in der Energiekorrektur weiterhin vorzufinden sind, stammen aus dem rein magnetischen Anteil der Störung ($\propto J_{\text{ex}}^\parallel$), welcher nicht reskaliert wurde.

3.3.2 Ein-Triplon-Zustände

Auch die Ausdrücke für die Energien der Ein-Triplon-Zustände sind im Vergleich zum Fall mit unskaliertem g deutlich verkürzt

$$\varepsilon_{1\text{QP}}^{n_{\text{Ph}}} = \varepsilon_{0\text{QP}}^{n_{\text{Ph}}} + J_{\text{ex}}^\perp + \frac{3}{4} \frac{J_{\text{ex}}^\parallel{}^2}{J_{\text{ex}}^\perp} + J_{\text{ex}}^\parallel \cos(k) - \frac{J_{\text{ex}}^\parallel{}^2}{4J_{\text{ex}}^\perp} \cos(2k) \quad (3.22)$$

Die Energielücke ($\varepsilon_{1\text{QP}}^{n_{\text{Ph}}} - \varepsilon_{0\text{QP}}^0$) besitzt den von der Photonenzahl abhängigen Offset

$$\Delta\varepsilon^{n_{\text{Ph}}} = n_{\text{Ph}} \cdot \left[-\frac{5}{4}c_2^\perp - \frac{1}{2}c_2^\parallel - \frac{3}{4} \frac{J_{\text{ex}}^\parallel}{J_{\text{ex}}^\perp} c_2^\parallel - \frac{2}{\Omega} \left(\frac{5}{4}c_3^\perp + \frac{1}{2}c_3^\parallel \right)^2 + \Omega \right]. \quad (3.23)$$

Bis auf diesen Offset unterscheiden sich die Dispersionen bei verschiedenen Photonenzahlen nicht mehr voneinander, vgl. Abbildung 10. Die Dispersion entspricht im thermodynamischen Limes im Wesentlichen der einer Quantenspinleiter, die nicht an Licht gekoppelt ist, also dem Fall $g = 0$ mit einem verkleinerten $\Omega \rightarrow \Omega_{\text{eff}}$, wobei

$$\Omega_{\text{eff}} = \Omega - \frac{5}{4}c_2^\perp - \frac{1}{2}c_2^\parallel - \frac{3}{4} \frac{J_{\text{ex}}^\parallel}{J_{\text{ex}}^\perp} c_2^\parallel - \frac{2}{\Omega} \left(\frac{5}{4}c_3^\perp + \frac{1}{2}c_3^\parallel \right)^2. \quad (3.24)$$

Um ein Gefühl dafür zu bekommen, wie schnell die Folge mit der Anzahl der Dimere konvergiert, sind in Abbildung 11 die Energien mit reskaliertem g für unterschiedliche N zu sehen. Im Regime von wenigen Dimeren ($N = 5$) sind Offset und Dispersionsverformung für unterschiedliche n_{Ph} noch deutlich zu erkennen. Auch bei $N = 100$ kommt noch ein sichtbarer Effekt durch die Licht-Materie-

3 Quantenspinleiter in einem optischen Resonator

Wechselwirkung zustande, wohingegen die Dispersionen bei einer Anzahl von 1000 Dimeren schon recht gut übereinander liegen.

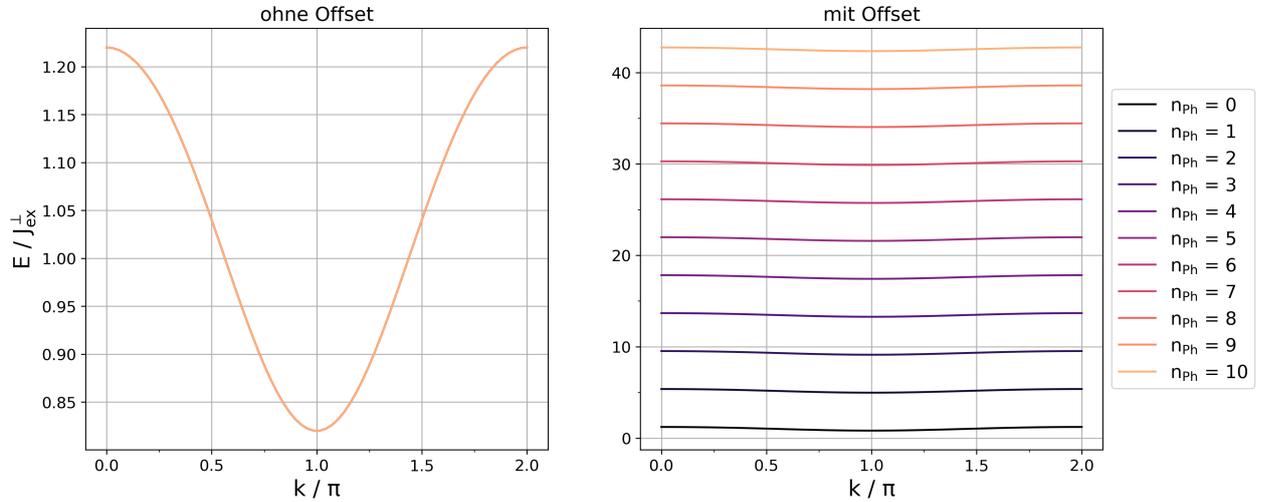


Abbildung 10: 1QP-Energie für $x = 0.2$, $g = 0.4$ und $\Omega = 5$ abzüglich der Grundzustandsenergie mit und ohne Offset $\Delta\varepsilon^{n_{\text{Ph}}}$. Die Kurven für verschiedene Photonenzahlen unterscheiden sich im reskalierten Fall bei $N \rightarrow \infty$ nicht.

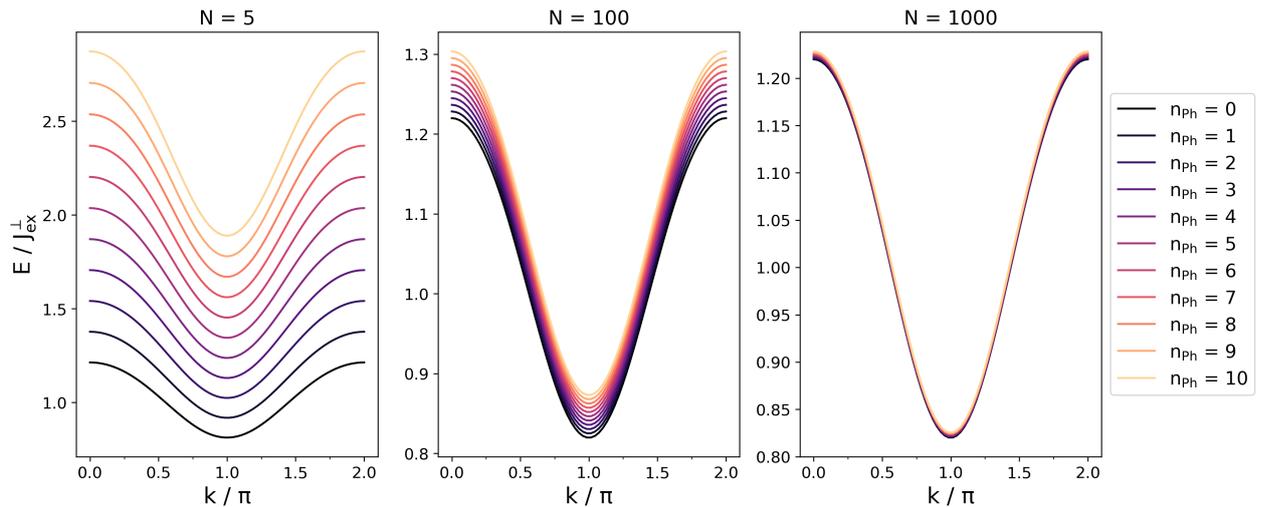


Abbildung 11: Konvergenz der 1QP-Energien. Auf den Offset $\Delta\varepsilon^{n_{\text{Ph}}}$ wurde bei diesem Plot verzichtet. Für $N = 1000$ Dimere unterscheiden sich die Dispersionen zu verschiedenen Photonenzahlen kaum noch voneinander.

4 Optimierte Basiswahl der bosonischen Operatoren

Im Folgenden sollen sowohl die Licht- als auch die Triplet-Operatoren in geeignete Basen transformiert werden. Dies hat den Vorteil, dass dann der rein magnetische sowie der rein photonische Anteil des Hamilton-Operators quantitativ behandelt werden können.

4.1 Bogoliubov-Transformation von \mathcal{H}_{Ph}

Zunächst soll der rein photonische Anteil des Hamiltonians aus Gleichung 3.4 mithilfe einer Bogoliubov-Transformation [9] exakt diagonalisiert werden.

Der Hamilton-Operator hat die folgende Form

$$\mathcal{H}_{\text{Ph}} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \Gamma (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) \quad (4.1)$$

$$\text{mit } \omega = -\frac{5}{4} c_2^\perp N - c_2^\parallel \frac{N}{2} + \Omega \quad \Gamma = -\frac{5}{4} c_3^\perp N - c_3^\parallel \frac{N}{2}. \quad (4.2)$$

Für die Transformation werden Operatoren $\hat{b}^{(\dagger)}$ so definiert, dass gilt

$$\hat{a} = u \hat{b} + v \hat{b}^\dagger \quad \hat{a}^\dagger = u \hat{b}^\dagger + v \hat{b}, \quad (4.3)$$

wobei die Koeffizienten u, v in diesem Fall reell sind. Mit der Forderung, dass auch für die neuen Operatoren die bosonischen Kommutatorrelationen gelten sollen, folgt $u^2 - v^2 = 1$. Diese Gleichung wird durch die Wahl der Koeffizienten als hyperbolische Funktionen $u = \cosh(\alpha)$ und $v = \sinh(\alpha)$ erfüllt. Da \mathcal{H}_{Ph} in der neuen Darstellung diagonal sein soll, müssen quadratische Terme in $\hat{b}^{(\dagger)}$ verschwinden. Deshalb lautet die Diagonalisierungs-Bedingung hier:

$$\omega \cdot uv + \Gamma(u^2 + v^2) = \frac{\omega}{2} \sinh(2\alpha) + \Gamma \cosh(2\alpha) \stackrel{!}{=} 0. \quad (4.4)$$

Damit ergibt sich aus Gleichung 4.1 der transformierte Hamiltonian:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_{\text{Ph}} &= \tilde{E} + \tilde{\omega} \hat{b}^\dagger \hat{b} \\ \text{mit } \tilde{E} &= \frac{1}{2}(\tilde{\omega} - \omega), \quad \tilde{\omega} = \sqrt{\omega^2 - 4\Gamma^2} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Mit den Ausdrücken aus Gleichung 4.2 folgt dann

$$\tilde{\omega} = \sqrt{\left(c_2^{\perp 2} - 4c_3^{\perp 2}\right) \left(\frac{5}{4}N\right)^2 + \left(\frac{c_2^{\parallel 2}}{4} - c_3^{\parallel 2}\right) N^2 + 5\left(\frac{c_2^\perp c_2^\parallel}{4} - c_3^\perp c_3^\parallel\right) N^2 - \left(c_2^\parallel + \frac{5}{2}c_2^\perp\right) \Omega N + \Omega^2} \quad (4.6)$$

Für den effektiven Gesamt-Hamiltonian erhält man in der neuen photonischen Basis

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{H}}_{\text{eff}} = & \tilde{E} + \tilde{\omega} \hat{b}^\dagger \hat{b} - \frac{5}{4} N (J_{\text{ex}}^\perp + c_1^\perp) - \frac{N}{2} (J_{\text{ex}}^\parallel + c_1^\parallel) \\
 & + J_{\text{LM}}^\perp(\hat{b}^\dagger, \hat{b}) \cdot \sum_{\nu, \alpha} \hat{t}_{\alpha, \nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha, \nu} + J_{\text{LM}}^\parallel(\hat{b}^\dagger, \hat{b}) \cdot \frac{1}{2} \left[\sqrt{3} \sum_{\nu} ((\hat{t}_{\nu}^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} + \text{h.c.}) \right. \\
 & \left. + \sum_{\nu, \alpha} (\hat{t}_{\alpha, \nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha, \nu+1} + \text{h.c.}) + 2 \sum_{\nu} \sum_{S, S_z} V_S (\hat{t}_{\nu}^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S, S_z} (\hat{t}_{\nu} \hat{t}_{\nu+1})_{S, S_z} \right] \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

mit $J_{\text{LM}}^{\perp/\parallel}(\hat{b}^\dagger, \hat{b}) = J_{\text{ex}}^{\perp/\parallel} + c_1^{\perp/\parallel} + \frac{2}{\tilde{\omega}} \left[c_2^{\perp/\parallel} \left(\frac{\omega}{2} \hat{b}^\dagger \hat{b} - \frac{\Gamma}{2} (\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger + \hat{b} \hat{b}) \right) + \frac{\omega - \tilde{\omega}}{4} \right]$
 $+ c_3^{\perp/\parallel} \left(-2\Gamma \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{\omega}{2} (\hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger + \hat{b} \hat{b}) - \Gamma \right)$

Die Bogoliubov-Transformation ist nur definiert, falls der Radikand aus Gleichung 4.6 nicht negativ ist. Dies ist der Fall für

$$N \leq \Omega \cdot \frac{c_2^\parallel + \frac{5}{2} c_2^\perp - |2c_3^\parallel + 5c_3^\perp|}{2 \left[\left(\frac{5}{4} \right)^2 (c_2^{\perp 2} - 4c_3^{\perp 2}) + \left(\frac{c_2^{\parallel 2}}{4} - c_3^{\parallel 2} \right) + 5 \left(\frac{c_2^\perp c_2^\parallel}{4} - c_3^\parallel c_3^\perp \right) \right]}. \quad (4.8)$$

Die größte Anzahl N_{max} an Dimeren, die Gleichung 4.8 erlaubt, ist in Abbildung 13 in Abhängigkeit von g und x dargestellt. Dabei ist die $1/g^2$ -Abhängigkeit zu erkennen. Auch bei größer werdenden $x = J_{\text{ex}}^\parallel / J_{\text{ex}}^\perp$ sinkt N_{max} , wohingegen sich in Abhängigkeit von Ω ein linearer Anstieg ergibt, siehe dazu Gleichung 4.8.

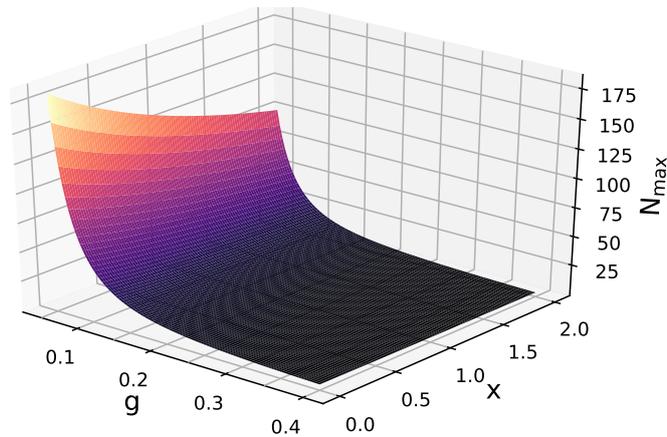


Abbildung 13: Maximale Anzahl der Dimere N , für die die Bogoliubov-Transformation definiert ist, in Abhängigkeit der unskalierten Kopplungsstärke g und $x = J_{\text{ex}}^\parallel / J_{\text{ex}}^\perp$. Dabei ist $\tilde{\omega} = 0.8$ und $\Omega = 5$.

4 Optimierte Basiswahl der bosonischen Operatoren

Nach der Reskalierung $g \rightarrow g/\sqrt{N}$ ist weder \tilde{E} noch $\tilde{\omega}$ abhängig von N . In diesem Fall ist jedoch zu beachten, dass Ω ausreichend groß sein muss, damit die Wurzel aus Gleichung 4.6 definiert ist, d.h.

$$\Omega \geq \frac{1}{4}(2c_2^{\parallel} + 5c_2^{\perp}) + \frac{1}{2}|2c_3^{\parallel} + 5c_3^{\perp}|. \quad (4.9)$$

Das minimale Ω_{\min} , das zulässig ist, steigt quadratisch mit g und linear mit x an, siehe Abbildung 14. Da in dieser Arbeit ohnehin Werte für Ω betrachtet werden, welche groß gegenüber den magnetischen und den Licht-Materie-Kopplungskonstanten sind, bedeutet die untere Beschränkung, die durch die Bogoliubov-Transformation bedingt ist, keine wesentliche zusätzliche Einschränkung. Im dargestellten Wertebereich der Parameter x und g überschreitet Ω_{\min} den Wert 3.2 nicht.

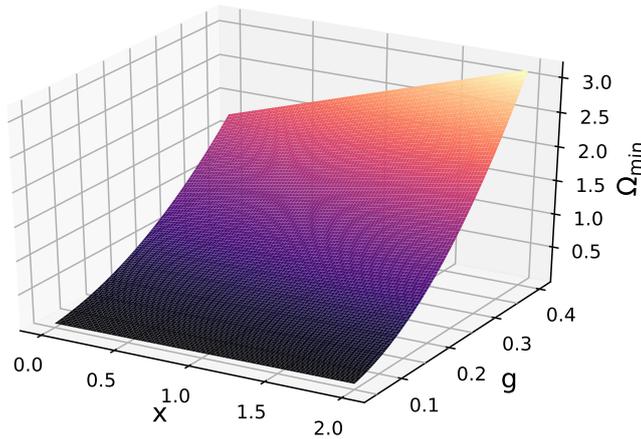


Abbildung 14: Minimales Ω , für das die Bogoliubov-Transformation im Falle reskalierter g definiert ist, in Abhängigkeit der Kopplungsstärke g und $x = J_{\text{ex}}^{\parallel}/J_{\text{ex}}^{\perp}$. Von der Anzahl der Dimere N ist keine Abhängigkeit mehr vorhanden. Wie in vorigen Abbildungen ist $\tilde{\omega} = 0.8$.

Die g - sowie die x -Abhängigkeit von $\tilde{\omega}$ für den reskalierten, N -unabhängigen Fall wird in Abbildung 15 gezeigt. Schaltet man die Licht-Materie-Kopplung aus, d.h. $g = 0$, nimmt $\tilde{\omega}$ den Wert Ω an, also in Abbildung 15 (links) $\Omega = 5$. Mit steigendem g nimmt die Dispersion quadratisch ab, mit x annähernd linear.

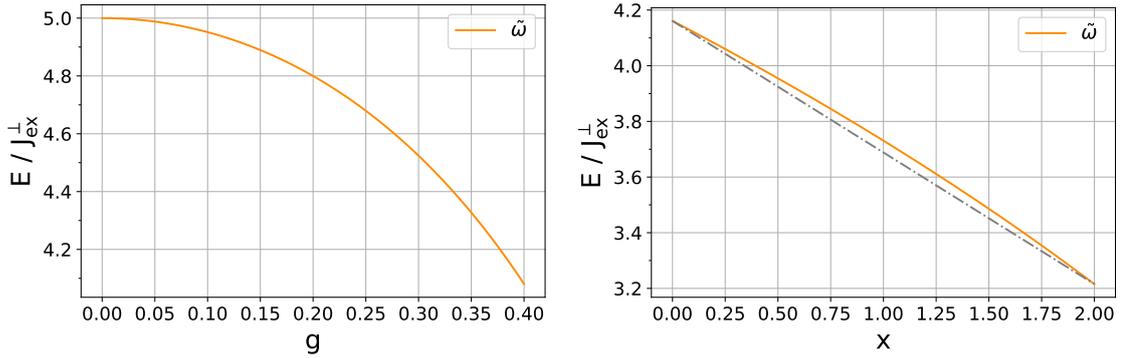


Abbildung 15: Verlauf von $\tilde{\omega}$ mit g für ein festes $x = 0.2$ (links) und mit x für ein festes $g = 0.4$ (rechts). In der rechten Abbildung ist zudem die Verbindungsstrecke zwischen den Punkten bei $x = 0$ und $x = 2$ eingezeichnet. Durch die Reskalierung von g ist $\tilde{\omega}$ nicht mehr von N abhängig.

Die Photonendichte im Bogoliubov-Grundzustand $|0_{\text{B}}\rangle$, für welchen $\hat{b}^\dagger \hat{b} |0_{\text{B}}\rangle = 0$ gilt, ist gegeben durch

$$\frac{\langle 0_{\text{B}} | \hat{a}^\dagger \hat{a} | 0_{\text{B}} \rangle}{N} = \frac{1}{2N} \left(\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - 4\Gamma^2}} - 1 \right), \quad (4.10)$$

d.h. die Photonendichte ist im Limes großer N Null. Dies bedeutet, dass der Grundzustand im Unterschied zum Modell in [10] hier weder ein *kohärenter* Zustand noch ein *squeezed (coherent) state* mit endlicher Photonendichte ist, siehe auch Anhang A.

4.2 Unitäre Transformation des effektiven Hamiltonians (pCUT)

Zusätzlich zur Bogoliubov-Transformation im photonischen Anteil des Hamiltonians wird nun im magnetischen Teil eine unitäre Transformation (pCUT) vorgenommen. Diese Transformation hat zum Ziel, einen effektiven Hamilton-Operator zu erhalten, der die Triplonzahl erhält. Da die magnetischen Operatoren Hardcore-Bosonen repräsentieren und quartische Wechselwirkungen vorliegen, ist dies nicht mehr durch eine einfache Bogoliubov-Transformation möglich.

Die Terme, in denen photonische Operatoren vorkommen, können dann als Observable behandelt und so mit in die optimierte Basis der Triplon-Operatoren gedreht werden. Zu den bereits aus [6] bekannten quantitativen Ergebnissen für den rein magnetischen Anteil werden im Folgenden mittels pCUT in erster Ordnung die Energie-Korrekturen, die durch die Observablen-Transformation zustande kommen, für den Ein-Triplon-Kanal berechnet.

4 Optimierte Basiswahl der bosonischen Operatoren

Der Ausgangspunkt für die Transformationen ist der effektive Hamilton-Operator im Teilchenbild:

$$\begin{aligned}
 \frac{\mathcal{H}_{\text{eff}}}{\bar{c}_1^\perp} &= -\frac{5}{4}N + \sum_{\nu,\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu} \\
 \mathcal{H}_{\text{magn}} &\left\{ \begin{array}{l}
 + \frac{\bar{c}_1^\parallel}{2\bar{c}_1^\perp} \left[-N + \sum_{\alpha,\nu} (\hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+1} + \text{h.c.}) + 2 \sum_{\nu} \sum_{S,S_z} V_S (\hat{t}_{\nu}^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S,S_z} (\hat{t}_{\nu} \hat{t}_{\nu+1})_{S,S_z} \right] \\
 + \frac{\bar{c}_1^\parallel}{2\bar{c}_1^\perp} \sqrt{3} \sum_{\nu} ((\hat{t}_{\nu}^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} + \text{h.c.})
 \end{array} \right. \\
 \mathcal{O} &\left\{ \begin{array}{l}
 + \frac{1}{2\bar{c}_1^\perp} (c_2^\perp \hat{a}^\dagger \hat{a} + c_3^\perp (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a})) \left[-\frac{5}{2}N + 2 \sum_{\nu,\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu} \right] \\
 + \frac{1}{2\bar{c}_1^\perp} (c_2^\parallel \hat{a}^\dagger \hat{a} + c_3^\parallel (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a})) \left[-N + \sum_{\alpha,\nu} (\hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+1} + \text{h.c.}) \right. \\
 \quad \left. + 2 \sum_{\nu} \sum_{S,S_z} V_S (\hat{t}_{\nu}^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S,S_z} (\hat{t}_{\nu} \hat{t}_{\nu+1})_{S,S_z} \right] \\
 + \frac{1}{2\bar{c}_1^\perp} (c_2^\parallel \hat{a}^\dagger \hat{a} + c_3^\parallel (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a})) \sqrt{3} \sum_{\nu} ((\hat{t}_{\nu}^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} + \text{h.c.}) + \frac{\Omega}{\bar{c}_1^\perp} \hat{a}^\dagger \hat{a}
 \end{array} \right. \quad (4.11)
 \end{aligned}$$

Dabei ist $\bar{c}_1^{\perp/\parallel} = J_{\text{ex}}^{\perp/\parallel} + c_1^{\perp/\parallel}$, d.h. $x = \bar{c}_1^\parallel / \bar{c}_1^\perp = J_{\text{ex}}^\parallel / J_{\text{ex}}^\perp$ für $g = g_\perp = g_\parallel$.

Der rein magnetische Anteil $\mathcal{H}_{\text{magn}}$ der Störung lässt sich unterteilen in Triplonzahl erhaltende Terme und solche, die die Triplonzahl um zwei verändern: Der grau umrandete Anteil in Gleichung 4.11 entspricht T_0 , der grün umrandete T_2 und T_{-2} . Anteile, die die Triplonzahl um eins verändern ($T_{\pm 1}$), kommen aufgrund der Spiegelsymmetrie der Leiter nicht vor.

Die Transformation der Observablen in erster Ordnung ergibt sich aus

$$\mathcal{O} + \frac{1}{2}[T_2, \mathcal{O}] - \frac{1}{2}[T_{-2}, \mathcal{O}].$$

Die Kommutatoren sind in Anhang B zu finden.

Führt man zusätzlich im Licht-Teil, der nicht an Triplet-Operatoren gekoppelt ist, eine Bogoliubov-Transformation wie in Unterabschnitt 4.1 durch und vernachlässigt alle Terme, welche die Triplonzahl verändern, erhält man:

$$\begin{aligned}
 \frac{\tilde{\mathcal{H}}_{\text{eff}}}{\bar{c}_1^\perp} = & -\frac{5}{4}N + \sum_{\nu,\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu} + \tilde{\mathcal{H}}_{\text{magn}} \\
 & + \frac{\tilde{E}_0^{\text{Licht}}}{\bar{c}_1^\perp} + \frac{\tilde{\omega}}{\bar{c}_1^\perp} \hat{b}^\dagger \hat{b} + J_{\text{LM}}^\perp(\hat{b}^\dagger, \hat{b}) \cdot \frac{2}{\bar{c}_1^\perp \tilde{\omega}} \sum_{\nu,\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu} \\
 & + J_{\text{LM}}^\parallel(\hat{b}^\dagger, \hat{b}) \cdot \frac{1}{\bar{c}_1^\perp \tilde{\omega}} \left[\sum_{\nu,\alpha} (\hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+1} + \text{h.c.}) + 2 \sum_{\nu} \sum_{S,S_z} V_S(\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S,S_z} (\hat{t}_\nu \hat{t}_{\nu+1})_{S,S_z} \right. \\
 & - \frac{\bar{c}_1^\parallel}{2\bar{c}_1^\perp} \left(3 \sum_{\nu} (1 - \sum_{\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu}) (1 - \sum_{\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+1}) \right. \\
 & \left. - 3 \sum_{\nu} (\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} (\hat{t}_\nu \hat{t}_{\nu+1})_{S=0} - 3 \sum_{\nu} (\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} (\hat{t}_{\nu\pm 1} \hat{t}_{\nu\pm 1\pm 1})_{S=0} \right. \\
 & \left. + \sum_{\nu,\alpha} (\hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+2} + \text{h.c.}) (1 - \sum_{\beta} \hat{t}_{\beta,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{\beta,\nu+1}) \right] \quad (4.12)
 \end{aligned}$$

Dabei ist $J_{\text{LM}}^\parallel(\hat{b}^\dagger, \hat{b})$ definiert wie in Gleichung 4.7.

Die Photonenzahl erhaltenden Terme aus Gleichung 4.12 werden nun für die 1QP-Zustände ausgewertet. Man findet

$$\begin{aligned}
 \frac{\tilde{\mathcal{H}}_{\text{eff}}^{1\text{QP}}}{\bar{c}_1^\perp} = & -\frac{5}{4}N + \sum_{\nu,\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu} + \tilde{\mathcal{H}}_{\text{magn}} + \frac{\tilde{E}_0^{\text{Licht}}}{\bar{c}_1^\perp} + \frac{\tilde{\omega}}{\bar{c}_1^\perp} \hat{b}^\dagger \hat{b} \\
 & + \frac{2}{\bar{c}_1^\perp \tilde{\omega}} \left[c_2^\perp \left(\frac{\omega}{2} \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{\omega - \tilde{\omega}}{4} \right) + c_3^\perp \left(-2\Gamma \hat{b}^\dagger \hat{b} - \Gamma \right) \right] \sum_{\nu,\alpha} \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu} \\
 & + \frac{1}{\bar{c}_1^\perp \tilde{\omega}} \left[c_2^\parallel \left(\frac{\omega}{2} \hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{\omega - \tilde{\omega}}{4} \right) + c_3^\parallel \left(-2\Gamma \hat{b}^\dagger \hat{b} - \Gamma \right) \right] \left[\underbrace{\sum_{\nu,\alpha} (\hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+1} + \text{h.c.})}_{\sum_{k,\alpha} 2 \cos(k) \hat{t}_{\alpha,k}^\dagger \hat{t}_{\alpha,k}} \right. \\
 & \left. - \frac{\bar{c}_1^\parallel}{2\bar{c}_1^\perp} \left(\underbrace{3 \sum_{\nu,\alpha} (1 - \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu} - \hat{t}_{\alpha,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+1})}_{\sum_{k,\alpha} (3 - 6\hat{t}_{\alpha,k}^\dagger \hat{t}_{\alpha,k} + 2 \cos(2k) \hat{t}_{\alpha,k}^\dagger \hat{t}_{\alpha,k})} + \sum_{\nu,\alpha} (\hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+2} + \text{h.c.}) \right) \right] \quad (4.13)
 \end{aligned}$$

In Abbildung 16 sind die 1QP-Energien bei einem Photon für $k = \pi$ über verschiedene Licht-Materie-Kopplungskonstanten g aufgetragen. Im Wesentlichen sieht man eine nach unten geöffnete Parabel, wobei der Streckfaktor proportional zu x ist.

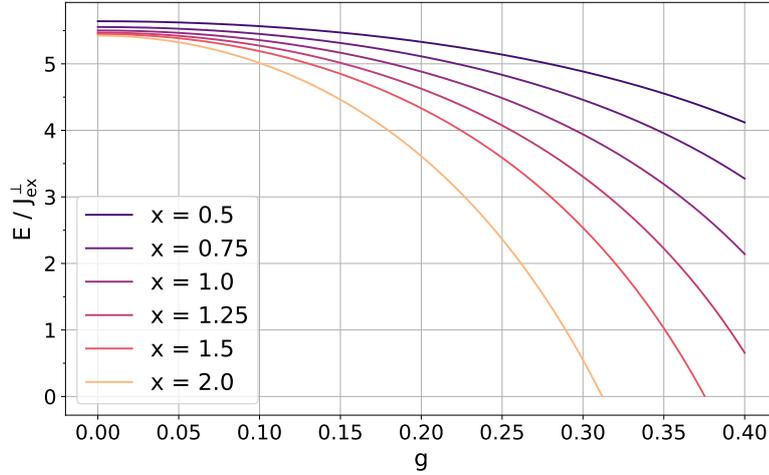


Abbildung 16: Abhängigkeit der 1QP-Lücke bei $k = \pi$ und $\tilde{n}_{\text{ph}} = 1$ von der Stärke der Licht-Materie-Wechselwirkung g nach Reskalierung. Dabei beträgt $N = 100$, $\Omega = 5$ und $\bar{\omega} = 0.8$.

4.3 Berechnung der führenden Energiekorrekturen

Wie im vorigen Kapitel soll die Observable unitär transformiert werden. Da die Rechnung schon nach der ersten Ordnung recht unübersichtlich wird, soll nun der Ansatz aus [11], für den schon quantitative Ergebnisse bekannt sind, übernommen werden.

Die Observable $\hat{S}_{i,\nu}^\alpha$ kann wie folgt transformiert werden:

$$\hat{U}^\dagger \hat{S}_{i,\nu}^\alpha \hat{U} = \sum_{\delta} a_{\delta} (\hat{t}_{\alpha,\nu+\delta}^\dagger + \hat{t}_{\alpha,\nu+\delta}) + \dots \quad (4.14)$$

Dabei stehen die Punkte für normalgeordnete quadratische Terme sowie noch höhere Ordnungen in den t -Operatoren. Außerdem ist $\alpha \in \{x, y, z\}$. Mithilfe dieser Näherung erhält man

$$\sum_{\nu} \left(\hat{S}_{1,\nu} \hat{S}_{1,\nu+1} + \hat{S}_{2,\nu} \hat{S}_{2,\nu+1} \right) = \sum_{k,\alpha} a^2(k) \left((\hat{t}_{\alpha,k}^\dagger \hat{t}_{\alpha,-k}^\dagger + \text{h.c.}) + (\hat{t}_{\alpha,k}^\dagger \hat{t}_{\alpha,k} + \hat{t}_{\alpha,k} \hat{t}_{\alpha,k}^\dagger) \right) \quad (4.15)$$

wobei $a^2(k)$ die quadrierten spektralen Amplituden wie in [11] sind. Die Hardcore-Bedingung wird im Folgenden aufgrund der kleinen Licht-Materie-Kopplung vernachlässigt.

Mit Gleichung 4.15 ergibt sich der Hamiltonian für einen k -Block zu

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_k = & \omega_{\text{magn}}(k) \sum_{\alpha} \hat{t}_{\alpha,k}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha,k} + \frac{\tilde{\omega}}{\bar{c}_1^{\perp}} \hat{b}^{\dagger} \hat{b} + \frac{2}{\bar{c}_1^{\perp} \tilde{\omega}} \left[c_2^{\perp} \left(\frac{\omega}{2} \hat{b}^{\dagger} \hat{b} - \frac{\Gamma}{2} (\hat{b}^{\dagger} \hat{b}^{\dagger} + \hat{b} \hat{b}) + \frac{\omega - \tilde{\omega}}{4} \right) \right. \\
 & \left. + c_3^{\perp} \left(-2\Gamma \hat{b}^{\dagger} \hat{b} + \frac{\omega}{2} (\hat{b}^{\dagger} \hat{b}^{\dagger} + \hat{b} \hat{b}) - \Gamma \right) \right] \cdot \sum_{\alpha} \hat{t}_{\alpha,k}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha,k} \\
 & + \frac{2}{\bar{c}_1^{\perp} \tilde{\omega}} \left[c_2^{\parallel} \left(\frac{\omega}{2} \hat{b}^{\dagger} \hat{b} - \frac{\Gamma}{2} (\hat{b}^{\dagger} \hat{b}^{\dagger} + \hat{b} \hat{b}) + \frac{\omega - \tilde{\omega}}{4} \right) + c_3^{\parallel} \left(-2\Gamma \hat{b}^{\dagger} \hat{b} + \frac{\omega}{2} (\hat{b}^{\dagger} \hat{b}^{\dagger} + \hat{b} \hat{b}) - \Gamma \right) \right] \\
 & \cdot \sum_{\alpha} \left(a^2(k) (\hat{t}_{\alpha,k}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha,-k}^{\dagger} + \text{h.c.}) + 2a^2(k) \hat{t}_{\alpha,k}^{\dagger} \hat{t}_{\alpha,k} + a^2(k) \right)
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Um führende Korrekturen, die durch das Licht zustande kommen, zu untersuchen, soll mit zwei Arten von Termen aus Gleichung 4.16 weitergerechnet werden:

1. Triplon- und Photonenzahl erhaltende Terme, die exakt behandelt werden können.
2. Terme, die die Anzahl der Triplonen nicht verändern.

Terme, welche sowohl Photonen- als auch Triplonzahl verändern sowie die Triplonzahl verändernden Terme werden hier nicht weiter berücksichtigt.

Der Effekt der Terme, die unter Punkt 2 fallen, wird durch eine Bogoliubov-Transformation untersucht. Doch zunächst sollen die Triplon- und Photonenzahl erhaltende Anteile von Gleichung 4.16 betrachtet werden. Die zugehörige Dispersion ist in Abbildung 17 visualisiert. Da die extrapolierten Daten für ω_{magn} und für $a^2(k)$ aus [6] für den thermodynamischen Limes berechnet wurden, sind in diesem Kapitel alle Abbildungen mit reskaliertem $g \rightarrow g/\sqrt{N}$ dargestellt.

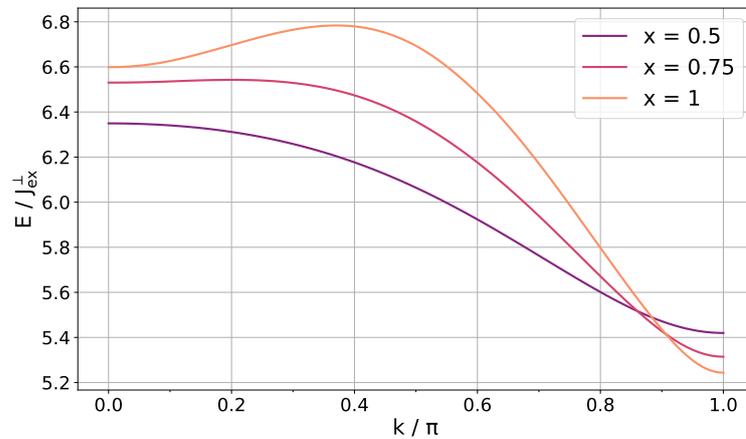


Abbildung 17: Dispersion nach der ersten Bogoliubov-Transformation für $g = 0.2$ und $N = 100$.

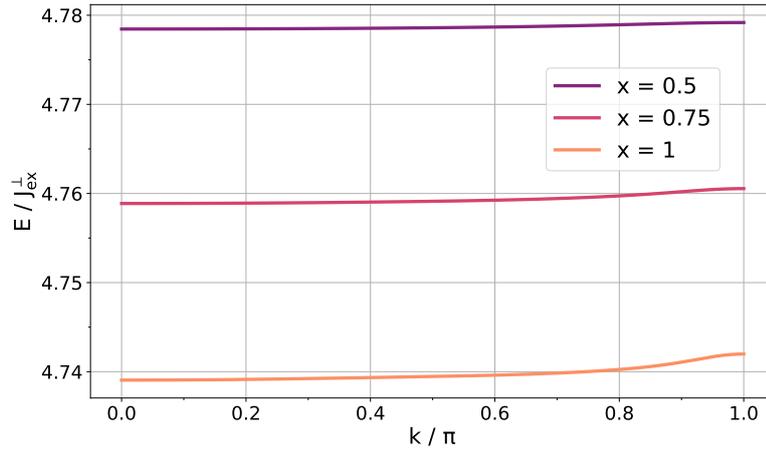


Abbildung 18: Dispersion nach der ersten Bogoliubov-Transformation abzüglich ω_{magn} für $g = 0.2$ und $N = 100$.

Um den dispersiven Effekt des rein magnetischen Anteils aus der Darstellung zu eliminieren, ist in Abbildung 18 die Impulsabhängigkeit der Energien nochmals abzüglich ω_{magn} aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass sich der Licht-Materiegekoppelte Teil des Hamilton-Operators bis auf den Offset nur leicht auf die Dispersion auswirkt. Genaueres wird unter Berücksichtigung der Photonenzahl verändernden Terme erklärt.

Dazu wird eine Bogoliubov-Transformation in den Triplonzahl erhaltenden Termen durchgeführt. Dadurch wird die Dispersion zu

$$\tilde{\omega}(k) = \sqrt{\omega_1(k)^2 - 4\omega_2(k)^2} \quad (4.17)$$

mit $\omega_1(k) = \frac{\tilde{\omega}}{c_1^{\perp}} + \frac{2}{c_1^{\perp}\tilde{\omega}} \left[c_2^{\perp} \frac{\omega}{2} - 2c_3^{\perp} \Gamma + (c_2^{\parallel} \frac{\omega}{2} - 2c_3^{\parallel} \Gamma) \cdot 3a^2(k) \right]$ und $\omega_2(k) = \frac{2}{c_1^{\perp}\tilde{\omega}} \left[-c_2^{\perp} \frac{\Gamma}{2} + c_3^{\perp} \frac{\omega}{2} - (c_2^{\parallel} \frac{\Gamma}{2} - c_3^{\parallel} \frac{\omega}{2}) \cdot 3a^2(k) \right]$.

Gleichung 4.16 lässt sich mithilfe der Relationen

$$\begin{aligned} \hat{b}^{\dagger} \hat{b} &= \frac{2}{\tilde{\omega}(k)} \left(\frac{\omega_1(k)}{2} \hat{b}_k^{\dagger} \hat{b}_k - \frac{\omega_2(k)}{2} (\hat{b}_k^{\dagger} \hat{b}_k^{\dagger} + \hat{b}_k \hat{b}_k) + \frac{\omega_1(k) - \tilde{\omega}(k)}{4} \right) \\ \hat{b}^{\dagger} \hat{b}^{\dagger} + \hat{b} \hat{b} &= \frac{2}{\tilde{\omega}(k)} \left(-2\omega_2(k) \hat{b}_k^{\dagger} \hat{b}_k + \frac{\omega_1(k)}{2} (\hat{b}_k^{\dagger} \hat{b}_k^{\dagger} + \hat{b}_k \hat{b}_k) - \omega_2(k) \right) \end{aligned}$$

in der neuen Basis ausdrücken. Offensichtlich sind die neuen photonischen Operatoren $\hat{b}_k^{(\dagger)}$ vom Impuls abhängig, d.h. das Licht erhält durch die Licht-Materie-Wechselwirkung eine effektive k -Abhängigkeit.

Nach der Transformation erhält man

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{H}}_k = & \frac{\tilde{\omega}}{\bar{c}_1^\perp} \frac{2}{\tilde{\omega}(k)} \left(\frac{\omega_1(k)}{2} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \frac{\omega_2(k)}{2} (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_k) - \frac{1}{2} E_{0,\tilde{b}}(k) \right) + \frac{2a^2(k)}{\bar{c}_1^\perp \tilde{\omega}} \left(c_2^\parallel \frac{\omega - \tilde{\omega}}{4} - c_3^\parallel \Gamma \right) \\
 & + \frac{2a^2(k)}{\bar{c}_1^\perp \tilde{\omega}} \frac{2}{\tilde{\omega}(k)} \left[\left(c_2^\parallel \frac{\omega}{2} - 2c_3^\parallel \Gamma \right) \left(\frac{\omega_1(k)}{2} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \frac{\omega_2(k)}{2} (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_k) - \frac{1}{2} E_{0,\tilde{b}}(k) \right) \right. \\
 & \left. + \left(c_2^\parallel \frac{\Gamma}{2} - c_3^\parallel \frac{\omega}{2} \right) \left(2\omega_2(k) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \frac{\omega_1(k)}{2} (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_k) + \omega_2(k) \right) \right] \\
 & + \left[\omega_{\text{magn}}(k) + E_{0,\tilde{b}}(k) + \tilde{\omega}(k) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \right. \\
 & - \frac{2}{\tilde{\omega}(k)} \left(\frac{\tilde{\omega}}{\bar{c}_1^\perp} + \frac{2a^2(k)}{\bar{c}_1^\perp \tilde{\omega}} \left(c_2^\parallel \frac{\omega}{2} - 2c_3^\parallel \Gamma \right) \right) \left(\frac{\omega_1(k)}{2} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \frac{\omega_2(k)}{2} (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_k) - \frac{1}{2} E_{0,\tilde{b}}(k) \right) \\
 & - \frac{2}{\tilde{\omega}(k)} \frac{2a^2(k)}{\bar{c}_1^\perp \tilde{\omega}} \left(c_2^\parallel \frac{\Gamma}{2} - c_3^\parallel \frac{\omega}{2} \right) \left(2\omega_2(k) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \frac{\omega_1(k)}{2} (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_k) + \omega_2(k) \right) \\
 & \left. + \frac{2}{\bar{c}_1^\perp \tilde{\omega}} \left(c_2^\perp \frac{\omega - \tilde{\omega}}{4} - c_3^\perp \Gamma + 2a^2(k) \left(c_2^\parallel \frac{\omega - \tilde{\omega}}{4} - c_3^\parallel \Gamma \right) \right) \right] \sum_\alpha \hat{t}_{\alpha,k}^\dagger \hat{t}_{\alpha,k}
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

wobei $E_{0,\tilde{b}}(k) = \frac{1}{2}(\tilde{\omega}(k) - \omega_1(k))$. Für den 1QP-Kanal kürzen sich alle bis auf die grün markierten Terme heraus.

Der Energieunterschied, den die Anwesenheit eines Photons im Ein-Triplon-Kanal bewirkt, entspricht $\tilde{\omega}(k)$ und ist in Abbildung 19 zu sehen. Die Größenordnung der Lücke bestimmt $\Omega = 5$. Im Vergleich zu Ω wird die Energie durch die Licht-Materie-Kopplung abgesenkt und wird bei $k = \pi$ maximal, da hier $a^2(k)$ maximal ist. Dieser dispersive Effekt ist jedoch nicht so groß, dass das Minimum verschoben würde. Die Unterschiede für verschiedene x lassen sich dadurch erklären, dass $\tilde{\omega}(k) \approx \omega_1(k)$, wobei $\tilde{\omega}$ die Größenordnung dominiert. Dieses nimmt wie in Abbildung 15 dargestellt mit steigendem x ab.

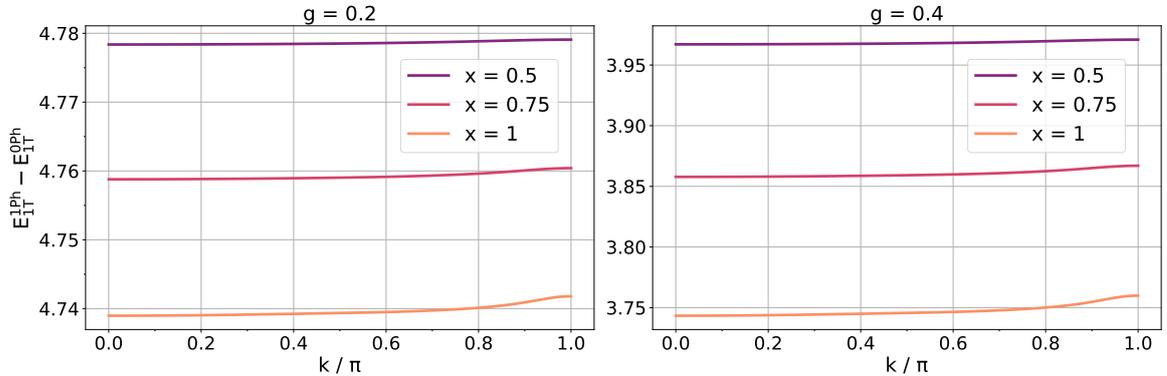


Abbildung 19: Energieunterschied, der durch ein Photon im Ein-Triplon-Kanal entsteht in Einheiten von J_{ex}^\perp für $N = 100$ Dimere. Die Licht-Materie-Kopplungsstärke beträgt $g = 0.2$ (links) bzw. $g = 0.4$ (rechts).

4 Optimierte Basiswahl der bosonischen Operatoren

Zuletzt soll im Ein-Photon-Kanal begutachtet werden, wie sich die Ein-Triplon-Anregungsenergie durch die Licht-Materie-Wechselwirkung verändert. In Abbildung 20 ist die Lücke bei $k = \pi$ für unterschiedlich starke Kopplungen aufgetragen. Dabei werden die Energien mit steigendem g größer.

Für die Wahl $\bar{\omega} > 1$ ist es möglich, dass die Anregungsenergie durch die Anwesenheit eines Photons kleiner wird, wie man in Abbildung 21 sehen kann.

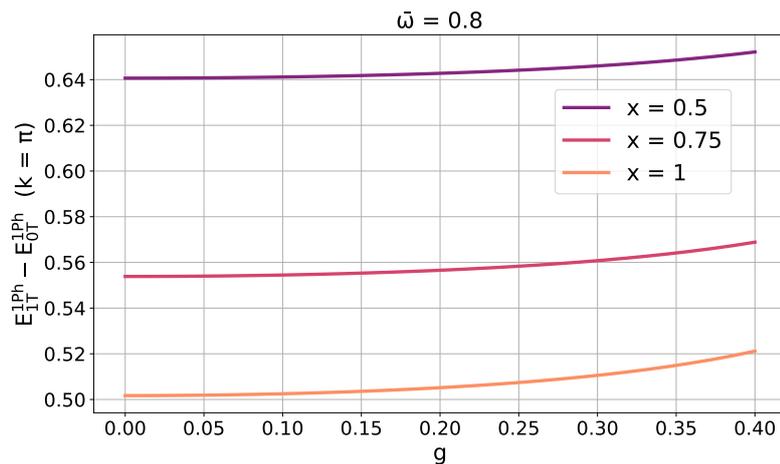


Abbildung 20: Ein-Triplon-Anregungsenergien bei $k = \pi$ im Ein-Photon-Kanal in Einheiten von J_{ex}^{\perp} . Dabei ist $\bar{\omega} = 0.8$, $N = 100$ und $\Omega = 5$.

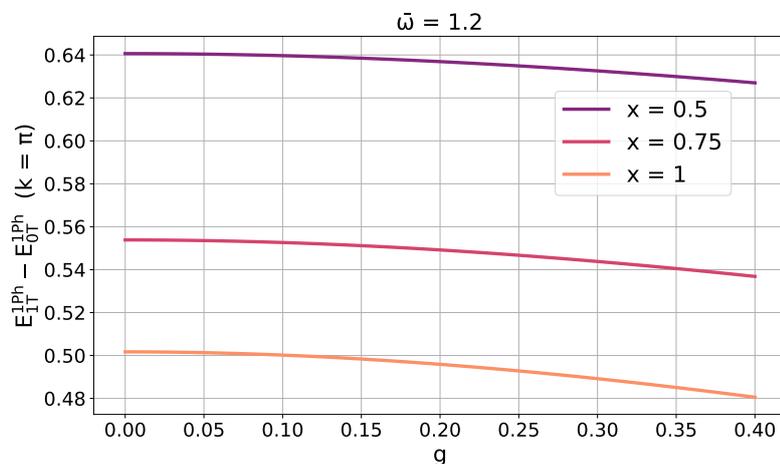


Abbildung 21: Ein-Triplon-Anregungsenergien bei $k = \pi$ im Ein-Photon-Kanal in Einheiten von J_{ex}^{\perp} für $\bar{\omega} = 1.2$.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden die Auswirkungen der Licht-Materie-Kopplung auf die magnetischen Anregungen einer Quantenspinleiter untersucht.

Dazu wurde zunächst eine Quantenspinleiter ohne Licht betrachtet: Nach der Beschreibung des Heisenberg-Modells und dem Übergang in die zweite Quantisierung erfolgte die störungstheoretische Berechnung der Energiekorrekturen. Das Verhältnis von Holm- und Sprosskopplungen $J_{\text{ex}}^{\parallel}/J_{\text{ex}}^{\perp}$ ist dabei der Störparameter. Die Ein- bzw. Zwei-Triplon-Anregungen, die in erster Ordnung berechnet wurden, weisen eine Lücke zum Grundzustand der Größenordnung J_{\perp} bzw. $2J_{\perp}$ für kleine J_{\parallel} auf. Bei 2QP-Zuständen existieren neben dem Kontinuum je nach Gesamtspin der Triplonen gebundene bzw. anti-gebundene Zustände. Das Anregungsspektrum konnte hierbei sowohl analytisch als auch numerisch ermittelt werden.

Als Nächstes wurde das Photon-Spin-Heisenberg-Modell für schwache Licht-Materie-Wechselwirkungen eingeführt. Dafür wurden die Energiekorrekturen mit Takahashi-Störungstheorie in zweiter Ordnung berechnet. Die Störparameter sind dabei sowohl $J_{\text{ex}}^{\parallel}/J_{\text{ex}}^{\perp}$ als auch die Licht-Materie-Kopplungskonstanten g_{\perp} und g_{\parallel} . Für die Anregungsenergien ergibt sich neben einem Offset eine Verformung der Dispersion für verschiedene Photonenzahlen. Wegen des Quantenlichts bewirken Triplonzahl erhaltende Hüpfsterme auch Beiträge zu den Energiekorrekturen in zweiter Ordnung. Interessanterweise findet sich bei den 2QP-Zuständen eine langreichweitige Wechselwirkung zwischen den Triplonen: Es spielen Prozesse eine Rolle, in denen die beiden Triplonen – unabhängig von der Größe des Abstandes – gleichzeitig hüpfen können. Ohne Licht ist es nur bei kleinen Abständen möglich, dass die Triplonen wechselwirken. Die Zwei-Triplon-Anregungen lassen sich nicht mehr auf den Ein-Triplon-Fall zurückführen. Im Gegensatz zu den 1QP-Energien müssen die 2QP-Energien numerisch ermittelt werden.

Für die sinnvolle Betrachtung größerer Systeme, also einer größeren Anzahl an Dimeren N , wurden die Licht-Materie-Kopplungskonstanten reskaliert. Die gerade beschriebenen Effekte konnten dann im thermodynamischen Limes für endliche Photonenzahlen ausgewertet werden. Dabei war festzustellen, dass sich die Energien für $N \rightarrow \infty$ bis auf einen Offset auf den Fall ohne Licht reduzieren. Dieses Regime liegt bei $N \approx 1000$ vor. In der Größenordnung $N = 100$ sind Unterschiede in Abhängigkeit von der Photonenzahl dagegen noch deutlich zu erkennen.

Der letzte Teil dieser Arbeit beschäftigte sich damit, quantitativere Ergebnisse

zu erzielen. Dazu wurden sowohl Triplet- als auch Licht-Operatoren in optimierte Basen gedreht. Durch eine Bogoliubov-Transformation konnte der rein photonische Anteil des Hamilton-Operators diagonalisiert werden. Der Licht-Materie-Anteil wurde dann entsprechend transformiert. Dies ist für den nicht-reskalierten Fall nur bis zu einem bestimmten N_{\max} definiert. Im reskalierten Fall ist die neue Dispersion nicht mehr von N abhängig. Zu beachten ist aber, dass die Transformation nur für $\Omega \geq \Omega_{\min}$ gültig ist.

Nach diesem Schritt wurde eine unitäre Drehung in den Triplet-Operatoren des Licht-Materie-Anteils mittels pCUT in erster Ordnung vorgenommen. Dieser Anteil wurde dazu als Observable angesehen. Unter Verwendung bereits bekannter quantitativer Ergebnisse für die Quantenspinleiter ohne Licht konnte durch die Betrachtung der Triplon- und Photonenzahl erhaltenden Terme die Auswirkung von $J_{\text{ex}}^{\parallel}/J_{\text{ex}}^{\perp}$ und g auf die 1QP-Lücke abgeschätzt werden.

Zuletzt wurde die unitäre Transformation der Observablen so genähert, dass quantitativ bekannte quadrierte spektrale Amplituden verwendet werden konnten. Um die führenden Energiekorrekturen für einen k -Block zu untersuchen, wurden hier nur die Triplonzahl erhaltenden Terme betrachtet und für diese eine weitere Bogoliubov-Transformation in den photonischen Operatoren durchgeführt. Da die Transformation für jeden Impuls unterschiedlich ist, erhalten die neuen Licht-Operatoren effektiv eine k -Abhängigkeit. Über die Auswahl der Parameter kann angesteuert werden, ob die Ein-Triplon-Anregungsenergien durch die Licht-Materie-Wechselwirkung größer oder kleiner werden.

Was die Drehung der Observablen anbelangt, wäre es interessant, höhere Ordnungen mittels pCUT zu berechnen, was nur computergestützt zu leisten ist. Als alternative analytische Vorgehensweise kann an Unterabschnitt 4.3 nach der zweiten Bogoliubov-Transformation angeknüpft werden, indem nach Lösungen gesucht wird, wie man die Triplonzahl verändernden Terme behandeln könnte. Weitere Erkenntnisse verspräche auch die Untersuchung stärkerer Licht-Materie-Wechselwirkungen. Dazu müssten in der lichtabhängigen Kopplungskonstante $\mathcal{J}_{\langle rs \rangle}(\hat{a}^{\dagger}, \hat{a})$ des Heisenberg-Modells aus [3] Terme höherer Ordnung in g berücksichtigt werden. In dieser Arbeit enthielt schon der anfängliche Hamiltonian Näherungen für kleine g in den Konstanten $c^{\perp/\parallel}$. Außerdem ist noch offen, ob sich für das Hubbard-Modell, also für den Ausgangspunkt des hier betrachteten Heisenberg-Modells, eine *superradiant phase* ergeben kann in Bereichen, in denen die Physik hier nicht mehr sinnvoll beschrieben werden konnte. Zudem wurde in dem in dieser Arbeit untersuchten Modell nur eine Quanten-Licht-Mode behandelt. Die Betrachtung mehrerer k -abhängiger Moden steht also noch aus und verspricht weitere interessante Physik.

Literatur

- [1] M. Mitrano u. a. „Possible light-induced superconductivity in K3C60 at high temperature“. In: *Nature* 530 (2016). DOI: 10.1038/nature16522.
- [2] H. Ritsch u. a. „Cold atoms in cavity-generated dynamical optical potentials“. In: *Rev. Mod. Phys.* 85 (2013). DOI: 10.1103/RevModPhys.85.553.
- [3] M. A. Sentef u. a. „Quantum to classical crossover of Floquet engineering in correlated quantum systems“. In: *Physical Review Research* 2.3 (2020). DOI: 10.1103/physrevresearch.2.033033.
- [4] J. Hubbard und B. H. Flowers. „Electron correlations in narrow energy bands“. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 276.1365 (1963). DOI: 10.1098/rspa.1963.0204.
- [5] Kai P. Schmidt und G. S. Uhrig. „Excitations in One-Dimensional $S = 1/2$ Quantum Antiferromagnets“. In: *Physical Review Letters* 90.22 (2003). DOI: 10.1103/physrevlett.90.227204.
- [6] K. P. Schmidt. „Spectral Properties of Quasi One-dimensional Quantum Antiferromagnets“. Dissertation. Universität zu Köln, 2004.
- [7] M. Takahashi. „Half-filled Hubbard model at low temperature“. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 10.8 (1977). DOI: 10.1088/0022-3719/10/8/031.
- [8] L. Schiller. „Matrix-Störungstheorie und gebundene Zustände für eine anisotrope Spin-1 Heisenberg-Kette“. Bachelorarbeit. Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 2018.
- [9] N. N. Bogoljubov. „On a new method in the theory of superconductivity“. In: *Il Nuovo Cimento* 7 (1958). DOI: 10.1007/BF02745585.
- [10] J. Rohn u. a. „Ising model in a light-induced quantized transverse field“. In: *Physical Review Research* 2.2 (2020). DOI: 10.1103/physrevresearch.2.023131.
- [11] G. S. Uhrig, K. P. Schmidt und M. Grüninger. „Unifying Magnons and Triplons in Stripe-Ordered Cuprate Superconductors“. In: *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.267003.

A Anhang: Meanfield-Approximation

A.1 Licht im kohärenten Zustand

Wir setzen an, indem wir einen *kohärenten* Zustand des Lichts $|\alpha\rangle$ wie in [10] annehmen, für den gilt

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad \text{mit } \alpha := \tilde{\alpha}\sqrt{N} \quad (\text{A.1})$$

Der Ansatz für die Meanfield-Rechnung $\hat{a} = \langle\hat{a}\rangle + \delta\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger = \langle\hat{a}\rangle + \delta\hat{a}^\dagger$ ergibt eingesetzt in den Hamiltonian für reskalierte g , wenn Terme der Ordnung $1/\sqrt{N}$ vernachlässigt werden,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \approx \mathcal{H}_1 + \tilde{\alpha}^2(c_2^\perp + 2c_3^\perp) \sum_\nu \left(\hat{S}_{1,\nu} \hat{S}_{2,\nu} - \frac{1}{2} \right) \\ + \tilde{\alpha}^2(c_2^\parallel + 2c_3^\parallel) \sum_\nu \left(\hat{S}_{1,\nu} \hat{S}_{1,\nu+1} + \hat{S}_{2,\nu} \hat{S}_{2,\nu+1} - \frac{1}{2} \right) + N\Omega\tilde{\alpha}^2, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

wobei \mathcal{H}_1 der Anteil aus Gleichung 3.20 ist, der keine Photon-Operatoren beinhaltet, und die $c^{\perp/\parallel}$ nicht von N abhängen. Für einen Grundzustand der Form $|g\rangle = |0\rangle \otimes |\alpha\rangle$, also dem Produktzustand aus reinem Singulett-Zustand und kohärentem Zustand, ergibt sich der Energieerwartungswert

$$\langle g | \mathcal{H} | g \rangle \approx \langle g | \mathcal{H}_1 | g \rangle + \alpha^2 \left(\Omega - \frac{5}{4}c_2^\perp - \frac{c_2^\parallel}{2} - \frac{5}{2}c_3^\perp - c_3^\parallel \right) \quad (\text{A.3})$$

Wie man erkennen kann, erhält man für den kohärenten Zustand eine endliche Photonendichte.

Wenn der Term in der Klammer aus Gleichung A.3 negativ würde, wäre der Hamiltonian nicht mehr nach unten beschränkt, was zu der Bedingung

$$\Omega \geq \frac{1}{4}(2c_2^\parallel + 5c_2^\perp) + \frac{1}{2}(2c_3^\parallel + 5c_3^\perp) \quad (\text{A.4})$$

führt, die eine sehr starke Ähnlichkeit mit Gleichung 4.9 aufweist.

Entsprechend erhält man bei Betrachtung eines Dimers

$$\langle g | \mathcal{H} | g \rangle \approx \langle g | \mathcal{H}_1 | g \rangle + \alpha^2 \left(\Omega - \frac{5}{4}c_2^\perp - \frac{5}{2}c_3^\perp \right)$$

A.2 Licht im squeezed (coherent) state

Analog zur letzten Berechnung kann man vorgehen für die Annahme, dass sich das Licht in einem *squeezed coherent state* befindet. Für diesen gilt:

$$\begin{aligned}\langle \hat{a}^2 \rangle &= \alpha^2 - e^{i\theta} \sinh(r) \cosh(r) \approx \alpha^2 + \frac{1}{4} e^{i\theta+2r} \\ \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle &= \alpha^2 + \sinh^2(r) \approx \alpha^2 + \frac{1}{4} e^{2r}\end{aligned}\tag{A.5}$$

Damit ergibt sich für reskaliertes g

$$\langle \mathcal{H} \rangle \approx \langle \mathcal{H}_1 \rangle + \left(\alpha^2 + \frac{1}{4} e^{2r} \right) \left[\Omega - \frac{5}{4} c_2^\perp - \frac{1}{2} c_2^\parallel \right] + 2 \left(\alpha^2 + \frac{1}{4} e^{2r} \cos(\theta) \right) \left[-\frac{5}{4} c_3^\perp - \frac{1}{2} c_3^\parallel \right]\tag{A.6}$$

Für $\alpha = 0$ erhält man die Energie für den *squeezed state*. Diese ist pro Dimer zusammen mit der Grundzustandsenergie aus der Bogoliubov-Transformation (Unterabschnitt 4.1) und der des kohärenten Zustands in Abbildung 22 dargestellt für den Fall einer endlichen Photonendichte. Der *squeezed state* liegt für $\bar{\omega} < 1$ zwischen dem kohärenten und dem Bogoliubov-Zustand.

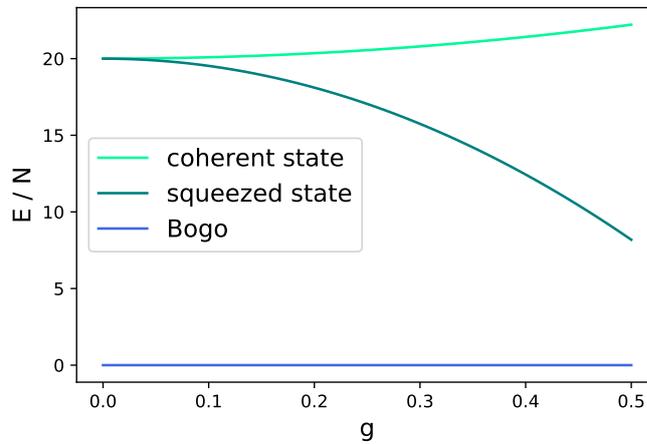


Abbildung 22: Grundzustandsenergie pro Dimer für den Bogoliubov-Grundzustand (Bogo), den coherent und den squeezed state. Die Kurven für coherent und squeezed state wurden für die gleiche Photonendichte dargestellt. θ wurde so gewählt, dass die Energie minimal ist (hier $\theta = \pi$).

B Anhang: pCUT der Observable in erster Ordnung

In Unterabschnitt 4.2 werden die Triplet-Operatoren in eine geeignetere Basis transformiert. Die erste Ordnung der unitären Drehung der Observablen lässt sich dabei aus den Kommutatoren $[T_2, \mathcal{O}]$ und $[T_{-2}, \mathcal{O}]$ berechnen. Für $[T_2, \mathcal{O}]$ ergeben sich die normal-geordneten Terme

$$\begin{aligned}
 [T_2, \mathcal{O}] = & -\frac{\bar{c}_1^\parallel}{2\bar{c}_1^\perp} \sqrt{3} \left(\frac{1}{2\bar{c}_1^\perp} \left(c_2^\perp \hat{a}^\dagger \hat{a} + c_3^\perp (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) \right) \left[2 \sum_\nu (\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu\pm 1}^\dagger)_{S=0} \right] \right. \\
 & + \frac{1}{2\bar{c}_1^\perp} \left(c_2^\parallel \hat{a}^\dagger \hat{a} + c_3^\parallel (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) \right) \left[\sum_\nu (\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu\pm 2}^\dagger)_{S=0} \left(1 - \sum_\alpha \hat{t}_{\alpha, \nu\pm 1}^\dagger \hat{t}_{\alpha, \nu\pm 1} \right) \right. \\
 & - \sum_{\nu, \alpha} (\hat{t}_{\alpha, \nu+2}^\dagger (\hat{t}_{\nu+1}^\dagger \hat{t}_\nu^\dagger))_{S=0} + (\hat{t}_{\nu+2}^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} \hat{t}_{\alpha, \nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha, \nu+1} + \frac{2}{3} \sum_\nu V_{S=0} (\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} \\
 & + 2 \sum_\nu \left(-\frac{1}{\sqrt{3}} V_{(S=2)} (\hat{t}_{\mp 1, \nu+2}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu} + \hat{t}_{\mp 1, \nu}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+2}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+2}) \right. \\
 & + \frac{1}{2\sqrt{3}} V_{(S=2)} (\hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger (\hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu}^\dagger + \hat{t}_{\pm 1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu}^\dagger) \hat{t}_{\pm 1, \nu} \\
 & - \hat{t}_{\mp 1, \nu+2}^\dagger (\hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu}^\dagger + \hat{t}_{\pm 1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu}^\dagger) \hat{t}_{0, \nu} \\
 & + \hat{t}_{\mp 1, \nu}^\dagger (\hat{t}_{\pm 1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger + \hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+2}^\dagger) \hat{t}_{0, \nu+2} \\
 & - \hat{t}_{0, \nu}^\dagger (\hat{t}_{\pm 1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger + \hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+2}^\dagger) \hat{t}_{\pm 1, \nu+2} \Big) \\
 & + \frac{1}{6\sqrt{3}} (2\hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger (2\hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu}^\dagger + \hat{t}_{1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1, \nu}^\dagger + \hat{t}_{-1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{1, \nu}^\dagger) \hat{t}_{0, \nu} \\
 & - \hat{t}_{-1, \nu+2}^\dagger (2\hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu}^\dagger + \hat{t}_{1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1, \nu}^\dagger + \hat{t}_{-1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{1, \nu}^\dagger) \hat{t}_{-1, \nu} \\
 & - \hat{t}_{1, \nu+2}^\dagger (2\hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu}^\dagger + \hat{t}_{1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1, \nu}^\dagger + \hat{t}_{-1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{1, \nu}^\dagger) \hat{t}_{1, \nu} \\
 & + 2\hat{t}_{0, \nu}^\dagger (2\hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger + \hat{t}_{1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1, \nu+2}^\dagger + \hat{t}_{-1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{1, \nu+2}^\dagger) \hat{t}_{0, \nu+2} \\
 & - \hat{t}_{-1, \nu}^\dagger (2\hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger + \hat{t}_{1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1, \nu+2}^\dagger + \hat{t}_{-1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{1, \nu+2}^\dagger) \hat{t}_{-1, \nu+2} \\
 & - \hat{t}_{1, \nu}^\dagger (2\hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger + \hat{t}_{1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1, \nu+2}^\dagger + \hat{t}_{-1, \nu+1}^\dagger \hat{t}_{1, \nu+2}^\dagger) \hat{t}_{1, \nu+2} \Big) \\
 & + \frac{1}{2\sqrt{3}} V_{(S=1)} (\hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger (\hat{t}_{\pm 1, \nu}^\dagger \hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger - \hat{t}_{0, \nu}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+1}^\dagger) \hat{t}_{\pm 1, \nu} \\
 & + \hat{t}_{\mp 1, \nu+2}^\dagger (\hat{t}_{\pm 1, \nu}^\dagger \hat{t}_{0, \nu+1}^\dagger - \hat{t}_{0, \nu}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+1}^\dagger) \hat{t}_{0, \nu} \\
 & - \hat{t}_{\mp 1, \nu}^\dagger (\hat{t}_{\pm 1, \nu}^\dagger \hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger - \hat{t}_{0, \nu}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+2}^\dagger) \hat{t}_{0, \nu+2} \\
 & - \hat{t}_{0, \nu}^\dagger (\hat{t}_{\pm 1, \nu}^\dagger \hat{t}_{0, \nu+2}^\dagger - \hat{t}_{0, \nu}^\dagger \hat{t}_{\pm 1, \nu+2}^\dagger) \hat{t}_{\pm 1, \nu+2} \Big) \\
 & + \dots
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \dots + \frac{1}{2\sqrt{3}} V_{(S=1)} \left(-\hat{t}_{1,\nu+2}^\dagger (\hat{t}_{1,\nu}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu+1} - \hat{t}_{-1,\nu}^\dagger \hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger) \hat{t}_{1,\nu} \right. \\
& + \hat{t}_{-1,\nu+2}^\dagger (\hat{t}_{1,\nu}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu+1} - \hat{t}_{-1,\nu}^\dagger \hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger) \hat{t}_{-1,\nu} \\
& - \hat{t}_{-1,\nu}^\dagger (\hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu+2} - \hat{t}_{-1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{1,\nu+2}^\dagger) \hat{t}_{-1,\nu+2} \\
& + \hat{t}_{1,\nu}^\dagger (\hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu+2} - \hat{t}_{-1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{1,\nu+2}^\dagger) \hat{t}_{1,\nu+2} \left. \right) \\
& + \frac{1}{3\sqrt{3}} V_{(S=0)} \left(\hat{t}_{0,\nu+2}^\dagger (\hat{t}_{0,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{0,\nu}^\dagger + \hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{1,\nu}^\dagger + \hat{t}_{-1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu}^\dagger) \hat{t}_{0,\nu} \right. \\
& + \hat{t}_{1,\nu+2}^\dagger (\hat{t}_{0,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{0,\nu}^\dagger + \hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{1,\nu}^\dagger + \hat{t}_{-1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu}^\dagger) \hat{t}_{1,\nu} \\
& + \hat{t}_{-1,\nu+2}^\dagger (\hat{t}_{0,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{0,\nu}^\dagger + \hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{1,\nu}^\dagger + \hat{t}_{-1,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu}^\dagger) \hat{t}_{-1,\nu} \\
& + \hat{t}_{0,\nu}^\dagger (\hat{t}_{0,\nu+2}^\dagger \hat{t}_{0,\nu+1}^\dagger + \hat{t}_{1,\nu+2}^\dagger \hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger + \hat{t}_{-1,\nu+2}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu+1}^\dagger) \hat{t}_{0,\nu+2} \\
& + \hat{t}_{1,\nu}^\dagger (\hat{t}_{0,\nu+2}^\dagger \hat{t}_{0,\nu+1}^\dagger + \hat{t}_{1,\nu+2}^\dagger \hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger + \hat{t}_{-1,\nu+2}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu+1}^\dagger) \hat{t}_{1,\nu+2} \\
& + \hat{t}_{-1,\nu}^\dagger (\hat{t}_{0,\nu+2}^\dagger \hat{t}_{0,\nu+1}^\dagger + \hat{t}_{1,\nu+2}^\dagger \hat{t}_{1,\nu+1}^\dagger + \hat{t}_{-1,\nu+2}^\dagger \hat{t}_{-1,\nu+1}^\dagger) \hat{t}_{-1,\nu+2} \left. \right) \\
& + \frac{1}{2c_1^\perp} \left(c_2^\parallel \hat{a}^\dagger \hat{a} + c_3^\parallel (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a}) \right) \sqrt{3} \left[\sum_\nu (1 - \sum_\alpha \hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu}) (1 - \sum_\alpha \hat{t}_{\alpha,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+1}) \right. \\
& + \frac{1}{3} \sum_{\nu,\alpha} (\hat{t}_{\alpha,\nu}^\dagger \hat{t}_{\alpha,\nu+2} + \text{h.c.}) (1 - \sum_\beta \hat{t}_{\beta,\nu+1}^\dagger \hat{t}_{\beta,\nu+1}) \\
& \left. - \sum_\nu (\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} (\hat{t}_\nu \hat{t}_{\nu+1})_{S=0} - \sum_\nu (\hat{t}_\nu^\dagger \hat{t}_{\nu+1}^\dagger)_{S=0} (\hat{t}_{\nu\pm 1} \hat{t}_{\nu+1\pm 1})_{S=0} \right]
\end{aligned}$$

Die Berechnung von $[T_{-2}, \mathcal{O}]$ erfolgte analog.

Erklärung

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

Erlangen, den 06.08.2020

Marie Hofmann