

Magnetische Anregungen des Kagome-Ising-Modells mit statischer Unordnung

Bachelorarbeit in der Physik

von

Calvin Christoph Krämer

11.8.2020

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



Betreuer: Prof. Dr. Kai Phillip Schmidt

Kurzzusammenfassung: In dieser Arbeit wird das antiferromagnetische Ising-Modell im transversalen Feld auf dem Kagomegitter untersucht. Ziel der Arbeit ist es herauszufinden, welche Auswirkungen Unordnung auf dieses geometrisch frustrierte System hat. Zunächst wird das System ohne Unordnung betrachtet: Mithilfe von Takahashi-Störungstheorie für große Felder werden die Einteilchendisersion, der statische und der dynamische Strukturfaktor berechnet und diskutiert. Im zweiten Teil der Arbeit wird der dynamische Strukturfaktor unter dem Einfluss bimodaler, statischer Unordnung mit zwei verschiedenen Methoden betrachtet. Dazu wird zunächst Unordnung in einem endlichen System simuliert. Es zeigt sich, dass vor allem das flache Energieband von der Unordnung betroffen ist. Außerdem kann für große Unordnung oder einseitige Verteilungen der Bindungsstärken die Entstehung von lokalen Zuständen im Gitter beobachtet werden. Eine zweite Methode zur Untersuchung von Unordnung wird mit den Greenschen Funktionen eingeführt. Mithilfe eines selbstkonsistenten Ansatzes kann die durch Unordnung gestörte Greensche Funktion bestimmt werden und daraus der dynamische Strukturfaktor. Die Übereinstimmung mit der Simulation in weiten Bereichen rechtfertigt diese Methode als gute Beschreibung von Unordnung. Weiterhin wird beobachtet, dass Unordnung im Kagome zu einer Verringerung der Energie des flachen Bands führt. Dies könnte ein Hinweis auf einen möglichen durch Unordnung herbeigeführten Phasenübergang im Kagome sein.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Methodik	9
2.1	Takahashi-Störungstheorie	9
2.2	Anwendung auf das TFIM im Teilchenbild	11
3	Kagomegitter ohne Unordnung	13
3.1	Dispersion	14
3.2	Statischer Strukturfaktor	19
3.3	Dynamischer Strukturfaktor	22
4	Kagomegitter mit Unordnung	29
4.1	Modell und Grundzustandsenergie	29
4.2	Rechnung auf endlichem System	30
4.2.1	Methode	30
4.2.2	Zustandsdichte	32
4.2.3	Dynamischer Strukturfaktor	32
4.2.4	Einseitige Wahrscheinlichkeitsverteilung	37
4.2.5	Unordnung im J_1 - J_2 - J_3 – Modell	39
5	Unordnung mit Greenschen Funktionen	41
5.1	Einführung zu Greenschen Funktionen	41
5.1.1	Störungstheorie und gemittelte Greensche Funktion	42
5.1.2	Zusammenhang mit dem dynamischen Strukturfaktor	43
5.2	Rechnung	44
5.2.1	Berechnung von $\langle V(k, k') ^2 \rangle$	44
5.2.2	Berechnung von G_{av}^+	47
5.2.3	Selbstenergie	48
5.3	Ergebnisse	49
5.4	Vergleich: Greensche Funktionen und endliches System	50
6	Zusammenfassung	53

1 Einleitung

Ein möglichst einfaches Modell der statistischen Physik, um Magnetismus auf einem Gitter zu untersuchen, ist das Ising-Modell [1] [2]. Im Ising-Modell befindet sich auf jedem Gitterpunkt ein Spin mit Eigenwert ± 1 , dessen Vorzeichen durch die Ausrichtung der Spins in der direkten Nachbarschaft beeinflusst wird. Je nachdem, ob es sich um ein ferromagnetisches oder antiferromagnetisches System handelt, sind die Nachbar-Spins bevorzugt gleich oder gegensätzlich ausgerichtet. Es wurde gezeigt, dass es zwar im eindimensionalen Ising-Modell keinen Temperatur-Phasenübergang gibt, jedoch im zweidimensionalen. Gegenstand der derzeitigen Forschung ist das 1963 eingeführte Ising-Modell im transversalen Feld (TFIM) [3], welches erstmals von P. Pfeuty [4] für eine Kette gelöst wurde. Dieses beschreibt die Ising-Kopplung bei $T = 0$ mit einem externen transversalen Magnetfeld.

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - h \sum_i \sigma_i^x \quad (1.1)$$

Auf manchen Gittern führt antiferromagnetisches Verhalten zu einem Phänomen, das man als geometrische Frustration bezeichnet [5]. Ein intensiv studiertes Beispiel dafür ist das zweidimensionale Dreiecksgitter (siehe Abbildung 1.1).

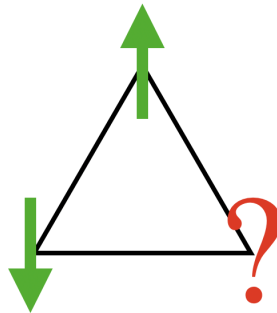


Abbildung 1.1: Im antiferromagnetischen Dreiecksgitter können nie alle drei Kopplungen eines Dreiecks gleichzeitig zufriedengestellt werden. Die Bindungen sind frustriert.

Auf einem solchen nicht bipartiten Gitter ist es nicht möglich, die Energie für jede Kopplung zu minimieren. Geometrische Frustration ist in der theoretischen Physik von großem Interesse, da hiermit außergewöhnliche Eigenschaften einher gehen (siehe auch [6]). Für diese Gitter gibt es im antiferromagnetischen TFIM bei $h = 0$ keinen zweifach entarteten Grundzustand, sondern extensiv viele Grundzustände. Auf dem frustrierten Dreiecksgitter tritt ein sogenanntes *order by disorder*-Szenario auf [7] [8]. Bereits durch den Einfluss eines kleinen Felds h geht das System vom entarteten Grundzustand in eine geordnete Phase über, die

aber nicht der Hochfeldphase entspricht, in der sich alle Spins in Richtung des externen Felds ausrichten.

Das ebenfalls frustrierte Kagomegitter zeigt ganz anderes Verhalten [9]. Hier geht das System vom ungeordneten Grundzustand direkt in die Hochfeldphase über. Es gibt keine geordnete Phase für kleine h . Man spricht von *disorder by disorder*. Im Zusammenhang damit steht ein Energieband in der Einteilchendisersion des Kagome, welches bis in siebte Ordnung Störungstheorie vollkommen flach ist.

Interessant ist nun, wie sich die oben beschriebenen Eigenschaften ändern, wenn man das Modell etwas verändert. Dazu betrachtet L. Heunisch parallel in seiner Bachelorarbeit die Auswirkung von Wechselwirkungen zu übernächsten und überübernächsten Nachbarn im Kagome [10]. In der vorliegenden Arbeit soll die Auswirkung von bimodaler, statischer Unordnung auf den Kopplungen untersucht werden.

Bis zu einem gewissen Grad ist ein perfektes Gitter mit Translationsinvarianz ein gutes Modell in der Festkörperphysik. In vielen Fällen haben kleine Veränderungen in der Kristallstruktur aber auch Auswirkungen auf die makroskopischen Eigenschaften eines Festkörpers. Aus diesem Grund ist Unordnung schon lange von großem experimentellen, aber auch theoretischen Interesse [11]. Ein Beispiel hierfür ist die Dotierung von Halbleitern. In diesem Fall soll vor allem das Zusammenspiel von Unordnung und Frustration untersucht werden. M. Hörmann und K. P. Schmidt haben bereits das Kagomegitter mit bimodaler Unordnung im Heisenberg-Bilayer-Modell untersucht [12]. Dabei spielte - genauso wie in dieser Arbeit - die Untersuchung des dynamischen Strukturfaktors eine essenzielle Rolle. Diese Größe eignet sich besonders gut, da sie sowohl die gemittelten räumlichen als auch die zeitlichen Korrelationen im Gitter abbildet. Außerdem kann sie mit experimentellen Ergebnissen wie inelastischer Neutronenstreuung [13] verglichen werden. Die Untersuchung des dynamischen Strukturfaktors im Heisenberg-Bilayer-Modell hat eine Erniedrigung des flachen Bandes gefunden und damit einen Hinweis auf ein Schließen der Energielücke im Kagome gegeben. Eine Motivation für diese Arbeit ist unter anderem, dieses Phänomen auch im TFIM besser zu verstehen.

Die Bachelorarbeit ist folgendermaßen aufgebaut: Im zweiten Kapitel soll zunächst im Hochfeldfall die Takahashi-Störungstheorie und das TFIM im Teilchenbild eingeführt werden. Mit diesen Methoden kann dann in Kapitel 3 die Einteilchendisersion, der statische Strukturfaktor und der dynamische Strukturfaktor im Kagome analytisch, aber perturbativ berechnet werden. Diese beiden Kapitel wurden in Zusammenarbeit mit L. Heunisch erarbeitet und in einem internen Dokument [14] niedergeschrieben, aus welchem hier zitiert wird. Im vierten Kapitel wird dann in einem bimodalen Unordnungsmodell zunächst numerisch auf einem endlichen System der dynamische Strukturfaktor mit Unordnung berechnet. Im fünften Kapitel wird mithilfe der Greenschen Funktionen ein alternativer Ansatz vorgestellt, dynamische Größen zu berechnen. Wieder wird der dynamische Strukturfaktor untersucht und mit den Ergebnissen aus den endlichen Systemen verglichen. Zum Schluss wird die Arbeit kurz zusammengefasst und ein Ausblick gegeben.

2 Methodik

2.1 Takahashi-Störungstheorie

"Die Tatsache, dass viele Probleme der Quantenmechanik nicht analytisch lösbar sind, erfordert die Einführung von Näherungsverfahren, mithilfe derer gute Approximationen für die Lösung eines quantenmechanischen Problems gefunden werden können. Ein Näherungsverfahren zur störungstheoretischen Berechnung entarteter Energien und Zuständen stellt die Takahashi-Störungstheorie - entwickelt von M. Takahashi - dar [15]. Diese soll im Folgenden eingeführt werden. Dazu betrachten wir einen Hamiltonian der Form

$$H = H_0 + \lambda V, \quad (2.1)$$

wobei die Lösung für H_0 bekannt ist. Bezeichnen wir nun v_0 als einen möglichen Eigenzustand zur Eigenenergie E_0 des ungestörten Hamiltonians, so lautet die Eigenwertgleichung

$$H_0 v_0 = E_0 v_0. \quad (2.2)$$

Da wir aber an der Lösung des Problems

$$Hv = Ev \quad (2.3)$$

interessiert sind, wobei E und v die Eigenenergie bzw. die Eigenzustände des gestörten Hamiltonians darstellen, führen wir einen Transformationsoperator Γ ein, mithilfe dessen wir H in die Eigenbasis von v_0 transformieren können.

$$v = \Gamma v_0 \quad (2.4)$$

Möchte man in der ungestörten Basis rechnen, kann man stattdessen auch die Operatoren transformieren:

$$\langle v | H | v \rangle = \langle v_0 | \Gamma^\dagger H \Gamma | v_0 \rangle =: \langle v_0 | \tilde{H} | v_0 \rangle. \quad (2.5)$$

Damit sieht die Eigenwertgleichung folgendermaßen aus:

$$\tilde{H} v_0 = E v_0. \quad (2.6)$$

Die Transformation Γ ist gegeben durch

$$\Gamma = P P_0 (P_0 P P_0)^{-\frac{1}{2}} \quad \text{mit} \quad (P_0 P P_0)^{-\frac{1}{2}} = P_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} (P_0 (P_0 - P) P_0)^n, \quad (2.7)$$

wobei P_0 der Projektor auf den Raum der Eigenzustände v_0 zu E_0 ist und P analog der Projektor auf den Raum der Eigenzustände v zu E . Da wir weder die gestörten Eigenzustände

v noch den Projektor auf diesen Eigenraum kennen, müssen wir ihn durch uns bekannte Größen ausdrücken. Man kann zeigen, dass P durch

$$P = P_0 - \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \cdot \sum_{k_1 + \dots + k_{n+1} = n; k_i \geq 0} S^{k_1} V S^{k_2} V \cdot \dots \cdot V S^{k_{n+1}} \quad (2.8)$$

gegeben ist, wobei S^k folgendermaßen definiert ist:

$$S^k = \begin{cases} -P_0 & \text{für } k = 0 \\ \left(\frac{1 - P_0}{E_0 - H_0} \right)^k & \text{für } k \geq 1 \end{cases} \quad (2.9)$$

Die ersten Ordnungen von Γ ergeben sich dadurch zu

$$\Gamma^{(0)} = P_0 \quad (2.10)$$

$$\Gamma^{(1)} = \lambda S V P_0 \quad (2.11)$$

$$\Gamma^{(2)} = \lambda^2 \cdot \left(-S S V P_0 V P_0 - \frac{1}{2} P_0 V S S V P_0 + S V S V P_0 \right). \quad (2.12)$$

Wenden wir diese Transformation auf den gestörten Hamiltonian $H = H_0 + \lambda V$ an, ergibt sich die Eigenwertgleichung zu

$$(\Gamma^\dagger H_0 \Gamma + \lambda \cdot \Gamma^\dagger V \Gamma) |j\rangle = E |j\rangle. \quad (2.13)$$

Hierbei bezeichnet $|j\rangle$ einen Eigenzustand von H_0 . Multiplizieren wir von links auf beiden Seiten ein $\langle i|$, können wir die gestörten Eigenenergien identifizieren:

$$E_{i,j} = E_0 \delta_{i,j} + \lambda \langle i| P_0 V P_0 |j\rangle + \lambda^2 \langle i| P_0 V S V P_0 |j\rangle + \mathcal{O}(3). \quad (2.14)$$

Die Takahashi-Störungstheorie ist nicht nur auf den Hamiltonian anwendbar, sondern auch auf andere Observablen erweiterbar. Soll eine Observable O eine Messung an einem durch V gestörten Eigenzustand v durchführen, kann die Observable mithilfe der Transformation

$$\tilde{O} = \Gamma^\dagger O \Gamma \quad (2.15)$$

in die Eigenbasis von v_0 überführt werden.

2.2 Anwendung auf das TFIM im Teilchenbild

Das TFIM ist ein bekanntes Modell der Festkörperphysik, um magnetische Wechselwirkungen in einem Material zu beschreiben. Dabei geht man von einem Gitter aus, auf dessen Plätze jeweils ein Teilchen mit Spin $S = \pm 1$ sitzt. Die Spinausrichtung eines Teilchens wird hierbei von zwei Faktoren beeinflusst: Zum einen wird eine Wechselwirkung benachbarter Spins mit Kopplungsstärke J berücksichtigt, zum anderen kann die Spinausrichtung durch die Anwesenheit eines externen magnetischen Feldes mit Stärke h bestimmt sein. Betrachten wir nun den Hamiltonian des TFIM:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - h \sum_i \sigma_i^x. \quad (2.16)$$

Dabei sind $\sigma^{x,z}$ die jeweiligen Pauli-Matrizen. Spinzustände werden durch

$$|\uparrow\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle \hat{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

dargestellt. Betrachtet man nur den Kopplungsterm und wendet beispielsweise einen ferromagnetischen Zwei-Spin-Zustand $|\uparrow\uparrow\rangle$ an, erhält man als Energie des Zustands $E = +J$, d.h. dieser Zustand ist für $J < 0$ energetisch vorteilhaft. Wendet man hingegen einen antiferromagnetischen Zwei-Spin-Zustand $|\uparrow\downarrow\rangle$ auf den Kopplungsterm an, erhält man die Energie $E = -J$, d.h. dieser Zustand ist energetisch vorteilhaft für $J > 0$. Im Folgenden wird nur der antiferromagnetische Fall betrachtet, da nur hier geometrische Frustration auftritt. Für den Hochfeldlimes werden üblicherweise die σ -Matrizen vertauscht.

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^x \sigma_j^x - h \sum_i \sigma_i^z \quad (2.18)$$

Dies entspricht nichts anderem als einem Basiswechsel. Trotz des Basiswechsels gilt diese Eigenschaft von J für Ferro- und Antiferromagnetismus immer noch.

Wir betrachten das System für große Felder $h \gg J$ (high-field limit), nehmen also den Feldterm als H_0 an und betrachten die Wechselwirkung benachbarter Spins als Störung.

$$H = H_0 + \lambda V = - \sum_i \sigma_i^z + \lambda \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^x \sigma_j^x \quad \text{mit } \lambda = \frac{J}{h} \quad (2.19)$$

In diesem Schritt wurde der Einfachheit halber der Hamiltonian mit h reskaliert. Der Grundzustand für den ungestörten Hamiltonian ($\lambda = 0$) ergibt sich zu

$$|0\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle. \quad (2.20)$$

Der einfach angeregte Zustand beinhaltet genau einen geflippten Spin. Da dieser an jedem Gitterplatz sitzen kann, ist der Zustand mit der Systemgröße entartet.

$$|i\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow \dots \uparrow\rangle \quad (2.21)$$

↳ i. Stelle

Anstatt von geflippten Spins zu reden, können wir uns vorstellen, dass jeder geflippte Spin einem Quasiteilchen auf diesem Gitterplatz entspricht [16]. So entspricht der Grundzustand $|\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$ dem Vakuum und der erste angeregte Zustand einem Einteilchenzustand mit einem Quasiteilchen an der Stelle i . Infolgedessen schreiben wir die σ -Matrizen des Hamiltonians in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren um:

$$\sigma^z = 1 - 2b^\dagger b, \quad (2.22)$$

$$\sigma^x = b^\dagger + b. \quad (2.23)$$

Für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gilt:

$$b^\dagger |n\rangle = (1 - n) |n + 1\rangle \quad (2.24)$$

$$b |n\rangle = n |n - 1\rangle. \quad (2.25)$$

Das entspricht dem Verhalten von Hardcore-Bosonen. Ebenso wie uns die Messung von σ^z die Anzahl aller up-Spins minus die Anzahl aller down-Spins gibt, erhalten wir bei einer Messung von σ^z im Teilchenbild die Anzahl aller Gitterplätze ohne Quasiteilchen minus die Anzahl der Quasiteilchen im System. Analog verhält sich σ^x : Wirkt im Spinbild ein σ^x -Operator auf einen Spin, so wird dieser geflippt. Analog wird ein Quasiteilchen auf einem leeren Gitterplatz erzeugt bzw. vernichtet, wenn der Gitterplatz besetzt ist, sobald man den σ^x -Operator darauf anwendet. Damit können wir den Hamiltonian exakt umschreiben zu

$$H = - \sum_i (1 - 2b_i^\dagger b_i) + \lambda \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j^\dagger + b_i^\dagger b_j + h.c. \quad (2.26)$$

" [14]

3 Kagomegitter ohne Unordnung

"Hier wird ein Dreiecksgitter mit einer dreiatomigen Einheitszelle, auch Kagomegitter genannt, betrachtet. Das Kagomegitter ist kein Bravais-Gitter, es kann also nicht jeder Gitterpunkt durch eine Linearkombination von ganzzahligen Vielfachen der Einheitsvektoren erreicht werden. Man kann sich ein solches Gitter jedoch als ein Dreiecksgitter vorstellen, bei dem in jeder zweiten Zeile und in jeder zweiten Einheitszelle das Teilchen dieser Einheitszelle fehlt. Dadurch ergeben sich in regelmäßigen Abständen Sechsecke mit Teilchen auf jedem der Ecken, wie in Abbildung 3.1 dargestellt. Die Konvention für die Einheitsvektoren und die Bezeichnung der Gitterpunkte innerhalb einer Einheitszelle sind in Abbildung 3.1 zu sehen.

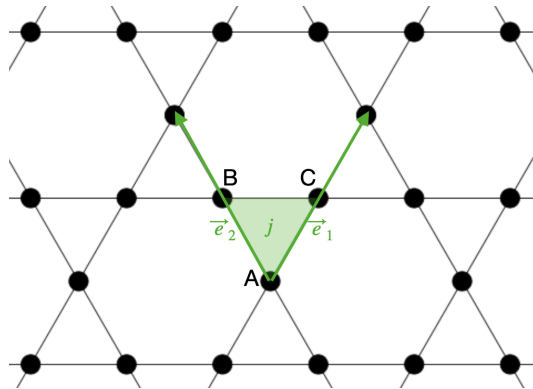


Abbildung 3.1: Konvention für die Einheitsvektoren und die Bezeichnung der Gitterplätze in einer Einheitszelle in dieser Arbeit.

Um die Rechnung möglichst stark zu vereinfachen, soll die Translationssymmetrie des Kagomegitters ausgenutzt werden. Wir definieren Richtungsvektoren \vec{e}_1 und \vec{e}_2 wie in Abbildung 3.1 angegeben. Die Rechnung soll im Fourierraum stattfinden. Dazu fouriertransformieren wir die Operatoren b und b^\dagger folgendermaßen:

$$b_{r_i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\vec{r}} \cdot b_{ki}^\dagger \quad (3.1)$$

$$b_{r_i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k}\vec{r}} \cdot b_{ki}. \quad (3.2)$$

3.1 Dispersion

Die Bandstruktur ist eine wichtige Eigenschaft eines jeden Materials. Durch das zugrundeliegende periodische Gitterpotential kommt es zu Kopplungen, die nur bestimmte Eigenenergien zulassen. Ist das Gitter sehr groß, liegen diese Zustände besonders dicht. Im k -Raum spricht man dann von sogenannten Energiebändern.

Ähnliches passiert auch im Kagomegitter mit einem geflippten Spin. Dieser Spin ist durch den zugrundeliegenden Hamiltonian H einer Wechselwirkung ausgesetzt, sodass wie bei Elektronen ebenfalls Energiebänder entstehen. Analog zu Elektronen und Phononen kann man eine Dispersionsbeziehung für die Spins bestimmen, die festlegt, welche Eigenenergien zu welchem Impuls k gehören. In diesem Fall werden die Energien durch die Fourier-Transformation des Hamiltonians impulsabhängig.

Um die Dispersion für einen Einteilchenzustand auf dem Kagomegitter zu bestimmen, benutzen wir Gleichung 2.14. Für die nullte Ordnung betrachten wir nur den Feldterm. Zur Notation: i, j bezeichnet die Nummerierung der Einheitszellen, $X, Y \in (A, B, C)$ ist der Platz innerhalb der Einheitszelle (siehe Abbildung 3.1).

$$\begin{aligned}
 E_{1\text{QP}}^{(0)} &= \langle i | -N + 2 \sum_{(i,X)} b_{(i,X)}^\dagger b_{(i,X)} | j \rangle \\
 &= \langle i | -N + \frac{2}{N} \sum_{(i,X)} \sum_{k,k'} e^{i\vec{k}\vec{r}_i} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_i} b_{k,(i,X)}^\dagger b_{k',(i,X)} | j \rangle \\
 &= -N + 2 \sum_k b_{k,A}^\dagger b_{k,A} + b_{k,B}^\dagger b_{k,B} + b_{k,C}^\dagger b_{k,C}
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Wie bereits aus Gleichung 2.14 ersichtlich, gibt es nur beitragende Terme, falls $i = j$ gilt. Uns interessiert aber insbesondere die Energiedifferenz vom Einteilchenzustand (1QP) zum Grundzustand (0QP), sodass wir die Grundzustandsenergie noch berechnen und anschließend abziehen müssen:

$$E_{0\text{QP}} = \langle 0 | -N + 2 \underbrace{\sum_i b_{i,X}^\dagger b_{i,X}}_{=0 \text{ für den Vakuumb-Zustand}} | 0 \rangle = -N. \tag{3.4}$$

Nach Abzug der Grundzustandsenergie kann das Ergebnis als Matrix dargestellt werden. Dazu wählen wir als Basis die Operatoren im Impulsraum:

$$H_1^{(0)} = \sum_k \begin{pmatrix} b_{kA}^\dagger \\ b_{kB}^\dagger \\ b_{kC}^\dagger \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{kA} \\ b_{kB} \\ b_{kC} \end{pmatrix}. \tag{3.5}$$

Für die Störung in erster Ordnung betrachten wir den Term

$$\begin{aligned}
E_{1\text{QP}}^{(1)} &= \lambda \langle i | P_0^{1\text{QP}} V P_0^{1\text{QP}} | j \rangle \\
&= \lambda \langle i | P_0^{1\text{QP}} \left(\sum_{\langle (i,X), (j,Y) \rangle} b_{i,X}^\dagger b_{j,Y} + b_{i,X} b_{j,Y}^\dagger + \underbrace{b_{i,X}^\dagger b_{j,Y}^\dagger + b_{i,X} b_{j,Y}}_{=0} \right) P_0^{1\text{QP}} | j \rangle \\
&= \lambda \langle i | \frac{1}{N} \sum_{\langle (i,X), (j,Y) \rangle} e^{i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_{(j,Y)}} b_{k,X}^\dagger b_{k',Y} | j \rangle .
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Zur Energie tragen keine Terme bei, die die Teilchenzahl verändern. Da wir auf einem Einteilchenzustand keine zwei Teilchen vernichten können, fallen alle $b^\dagger b^\dagger$ - und bb - Terme weg. Nach der Erzeugung zweier Teilchen wird das Skalarprodukt $\langle 1|3 \rangle = 0$. Deshalb geben nur Spinflip-Terme Beiträge ungleich 0, das heißt das Teilchen wird vernichtet und an einem benachbarten Gitterplatz wird eines erzeugt. Nach Auswertung aller von Null verschiedenen Beiträge kann das Ergebnis erneut als Matrix geschrieben werden:

$$E_{1\text{QP}}^{(1)} = \sum_k \begin{pmatrix} b_{kA}^\dagger \\ b_{kB}^\dagger \\ b_{kC}^\dagger \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 0 & 1 + e^{ik_2} & 1 + e^{ik_1} \\ 1 + e^{-ik_2} & 0 & 1 + e^{i(k_1-k_2)} \\ 1 + e^{-ik_1} & 1 + e^{-i(k_1-k_2)} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{kA} \\ b_{kB} \\ b_{kC} \end{pmatrix} . \tag{3.7}$$

Hier wurde folgende Notation eingeführt:

$$\begin{aligned}
k_1 &:= \vec{k} \cdot \vec{e}_1, \\
k_2 &:= \vec{k} \cdot \vec{e}_2.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Diagonalisierung dieser Matrix bringt die Energieeigenwerte für die 1QP-Dispersion hervor. Man erkennt, dass ein Eigenwert unabhängig von k ist

$$E_1^{(1)} = -2 , \tag{3.9}$$

was ein flaches Energieband zufolge hat. M. Powalski hat in seiner Masterarbeit gezeigt, dass dieses Energieband bis in einschließlich siebte Ordnung flach bleibt [17]. Dies ist eine besondere Eigenschaft des Kagomegitters und resultiert aus seiner Struktur. Bezeichnen wir die Gitterplätze, welche die Eckpunkte eines Sechsecks in der Kagomestruktur bilden, mit den Nummern eins bis sechs, so lässt sich der Eigenzustand des flachen Bandes als

$$|\text{EZ}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|1\rangle - |2\rangle + |3\rangle - |4\rangle + |5\rangle - |6\rangle) \tag{3.10}$$

bezeichnen. Dies ist ein vollständig lokalisierter Zustand, der von k unabhängig ist. Versucht ein Teilchen auf einem dieser sechs Gitterplätze nach außen zu entkommen, gibt es nur die Möglichkeit durch die in Abbildung 3.2 grün markierten Schnittstellen. Ein Teilchen auf einem benachbarten Platz mit genau entgegengesetzter Amplitude kann in gleicher Ordnung jeweils auf den gleichen Platz hüpfen. Die oben beschriebene Überlagerung dieser Zustände interferiert dann destruktiv. In Ordnung $n \geq 8$ ist das nicht immer möglich. Durch Schleifenprozesse, die zwar schon in Ordnung 6 auftauchen, aber erst später relevant werden, kann

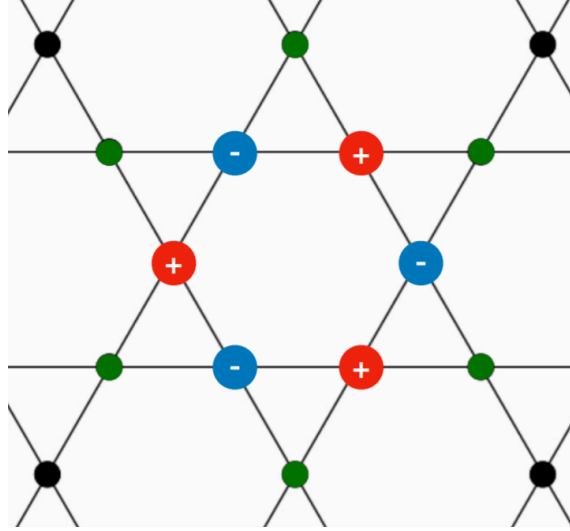


Abbildung 3.2: Anschauung für den lokalisierten Eigenzustand im Kagomegitter.

nicht immer gewährleistet werden, dass der Ausbruch aus dem Sechseck mit einer Amplitude des Teilchens auf dem Nachbarplatz negativ interferiert.

Die anderen beiden Eigenwerte sind k-abhängig:

$$\begin{aligned} E_2^{(1)} &= 1 - \sqrt{3 + 2(\cos k_1 + \cos k_2 + \cos(k_1 - k_2))}, \\ E_3^{(1)} &= 1 + \sqrt{3 + 2(\cos k_1 + \cos k_2 + \cos(k_1 - k_2))}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

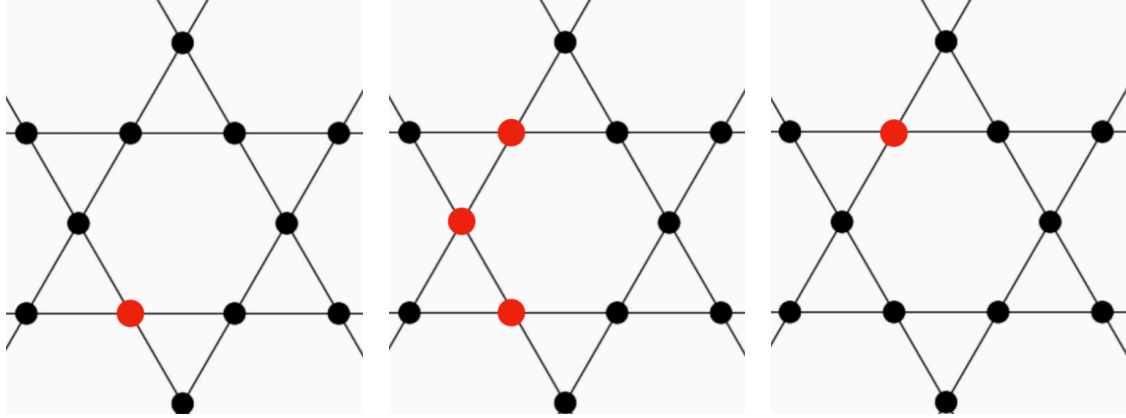
Für die zweite Ordnung betrachten wir den Term

$$\begin{aligned} E_{1\text{QP}}^{(2)} &= \lambda^2 \langle i | P_0^{1\text{QP}} V S V P_0^{1\text{QP}} | j \rangle \\ &= \lambda^2 \langle i | P_0^{1\text{QP}} \left(\sum_{\langle\langle i,X \rangle\rangle, \langle\langle j,X \rangle\rangle} b_{(i,X)} b_{(j,X)} + \underbrace{b_{(i,X)}^\dagger b_{(j,X)} + h.c.}_{=0} \right) S \\ &\quad \cdot \left(\sum_{\langle\langle i',X' \rangle\rangle, \langle\langle j',Y' \rangle\rangle} b_{(i',X')}^\dagger b_{(j',Y')}^\dagger + \underbrace{b_{(i',X')}^\dagger b_{(j',Y')} + h.c.}_{=0} \right) P_0^{1\text{QP}} | j \rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Da das S auf den Raum senkrecht zum Einteilchenzustand projiziert, tragen nur die $b^\dagger b^\dagger$ -Terme vom rechten V bei. Um das Skalarprodukt nicht null werden zu lassen, müssen vom linken V wieder zwei Teilchen abgeregt werden. Für diesen Fall berechnet sich S zu

$$S = \frac{1 - P_0^{1\text{QP}}}{E_0 - H_0} = \frac{1}{1 - 3} = -\frac{1}{2}, \quad (3.14)$$

wobei verwendet wurde, dass $H_0 \equiv \langle 3 | H_0 | 3 \rangle$ der Energie des zwischenzeitlich entstehenden Dreiteilchenzustandes entspricht. Wertet man wieder alle möglichen Beiträge ungleich null



(a) Die rote Markierung zeigt den Gitterplatz des Quasiteilchens am Anfang. (b) V erzeugt zwei weitere Quasiteilchen. (c) V vernichtet zwei Quasiteilchen.

Abbildung 3.3: Beispiel für das Hüpfen eines Quasiteilchens in zweiter Ordnung.

aus, stellt man zum einen fest, dass ein Spin effektiv ein bis zwei Plätze hüpfen kann (vgl. Abbildung 3.3). Zum anderen gibt es auch sogenannte nicht-linked-Terme, bei denen die beiden V -Terme die gleichen benachbarten Teilchen erzeugen und wieder vernichten (vgl. Abbildung 3.4). Diese Terme sind proportional zur Systemgröße und deshalb nicht physikalisch. Betrachtet man die Differenz zur Grundzustandsenergie fällt auf, dass sich die extensiven Terme gegenseitig auslöschen:

$$E_{1\text{QP}}^{(2)} - E_{0\text{QP}}^{(2)} = E_{1\text{QP, linked}}^{(2)} + E_{1\text{QP, nicht-linked}}^{(2)} - \underbrace{E_{0\text{QP}}^{(2)}}_{=\langle 0|P_0 V S V P_0|0\rangle} \quad (3.15)$$

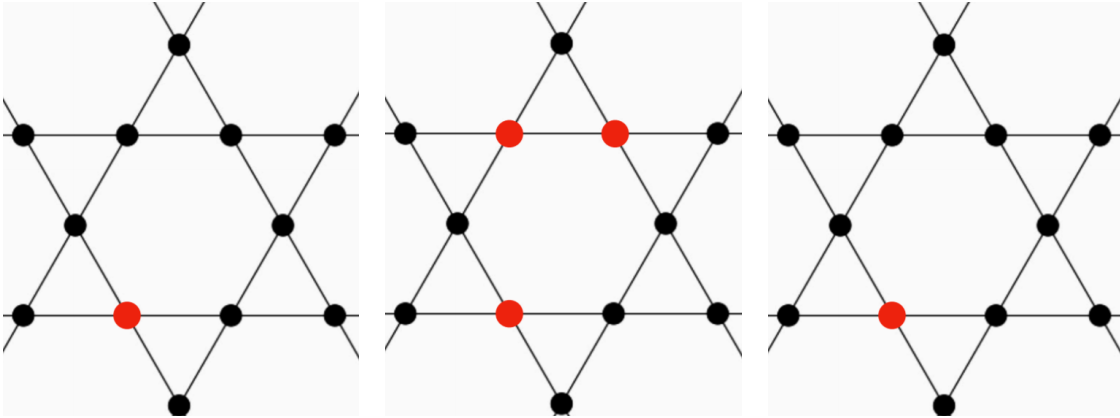
$$= E_{1\text{QP, linked}}^{(2)} + (6N - 4) - 6N = E_{1\text{QP, linked}}^{(2)} - 4. \quad (3.16)$$

N bezeichnet wie zuvor die Anzahl der Gitterpunkte des Systems. Der durch die -4 entstandene Beitrag zur Grundzustandsenergie kommt durch die Tatsache zustande, dass bei einem Einteilchenzustand an der Stelle, an der das Teilchen sitzt, kein Weiteres erzeugt werden kann. Dadurch werden vier mögliche Nächste-Nachbar-Verbindungen blockiert für die Erzeugung zweier nicht-linked Teilchenpaare. Zusammen mit den linked Termen können wir das Ergebnis wieder fouriertransformieren und in einer Matrix anordnen.

$$H_1^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} b_{kA}^\dagger \\ b_{kB}^\dagger \\ b_{kC}^\dagger \end{pmatrix}^T \underline{\underline{M}}^{(2)} \begin{pmatrix} b_{kA} \\ b_{kB} \\ b_{kC} \end{pmatrix}$$

Die Matrix $\underline{\underline{M}}^{(2)}$ ist gegeben durch:

$$\begin{pmatrix} -4 + 2 \cos k_1 + 2 \cos k_2 & 1 + e^{ik_1} + e^{ik_2} + e^{-i(k_1-k_2)} & 1 + e^{ik_1} + e^{ik_2} + e^{i(k_1-k_2)} \\ 1 + e^{-ik_1} + e^{-ik_2} + e^{i(k_1-k_2)} & -4 + 2 \cos k_2 + 2 \cos(k_1 - k_2) & 1 + e^{-ik_2} + e^{ik_1} + e^{i(k_1-k_2)} \\ 1 + e^{-ik_1} + e^{-ik_2} + e^{-i(k_1-k_2)} & 1 + e^{ik_2} + e^{-ik_1} + e^{-i(k_1-k_2)} & -4 + 2 \cos k_1 + 2 \cos(k_1 - k_2) \end{pmatrix}.$$



(a) Die rote Markierung zeigt den Gitterplatz des Quasiteilchens am Anfang. (b) V erzeugt zwei weitere Quasiteilchen. (c) V vernichtet die erzeugten Quasiteilchen unabhängig davon, wo das Quasiteilchen am Anfang war.

Abbildung 3.4: Beispiel für das nicht-linked Hüpfen eines Quasiteilchens in zweiter Ordnung.

Diagonalisierung dieser Matrix ergibt die Beiträge in zweiter Ordnung zur Dispersion. Wie erwartet ist auch hier einer der Eigenwerte unabhängig vom Impuls. Die Gesamtenergie des flachen Bandes ist dann gegeben durch $E(k_1, k_2) = 2 - 2\lambda + 2\lambda^2$.

In Abbildung 3.5 und 3.6 ist die Dispersion in zweiter Ordnung einmal auf einem Hochsymmetriepfad und einmal aufgeteilt in die drei Bänder dargestellt. Die Ergebnisse stimmen mit M. Powalskis überein [17].

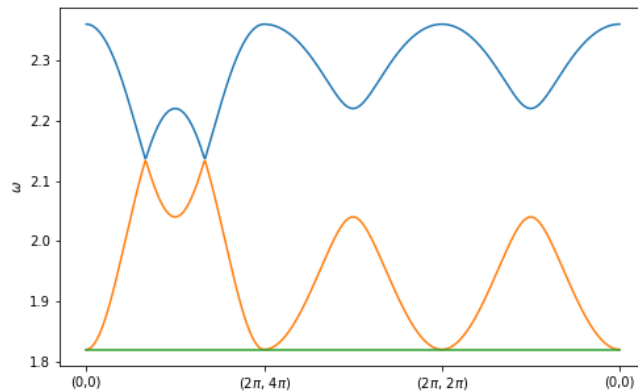


Abbildung 3.5: Energiebänder für die 1QP-Dispersion des Kagomegitters in zweiter Ordnung; für den Plot wurde der Hochsymmetriepfad $((0, 0) \rightarrow (2\pi, 4\pi) \rightarrow (2\pi, 2\pi) \rightarrow (0, 0))$ gewählt.

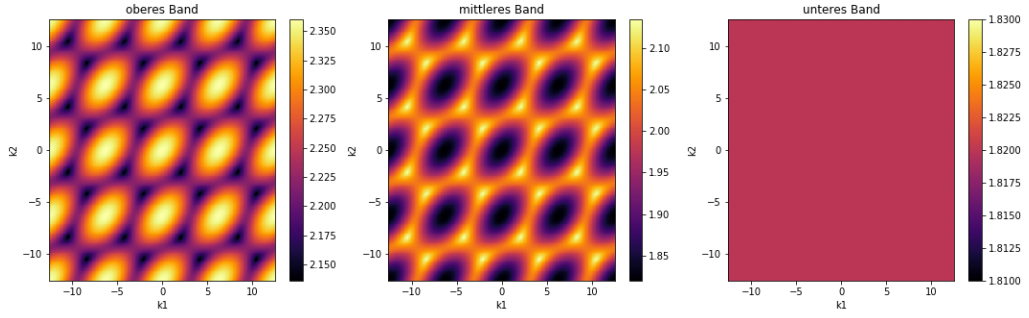


Abbildung 3.6: Dispersionin zweiter Ordnung aufgeteilt in die drei Energiebänder bei $\lambda = 0.1$.

3.2 Statischer Strukturfaktor

Möchte man in der Festkörperphysik magnetische Wechselwirkungen untersuchen, nutzt man häufig Verfahren wie die Neutronenstreuung. Neutronen haben den Vorteil, dass sie zwar magnetisch, aber aufgrund ihrer fehlenden Ladung nicht elektrisch wechselwirken. Bei solchen Experimenten wird ein Material mit Neutronen beschossen und die Energie- und Impulsänderung nach der Wechselwirkung mit dem Material gemessen. Bei magnetischen Wechselwirkungen mit Spin-Teilchen handelt es sich dominant um sogenannte Spin-Flips. Möchte man diese Prozesse theoretisch beschreiben, muss man die zeitlichen und räumlichen Korrelationen zwischen den Spin-Flips betrachten.

Der statische Strukturfaktor bezieht nur die räumliche Korrelation mit ein. Die zu untersuchende Observable ist gegeben durch $O = \sigma_i^x \sigma_j^x$. Außerdem führen wir wieder eine Fouriertransformation durch, da wir die Streuintensität $S(k_1, k_2)$ im Impulsraum betrachten wollen.

$$S_{\text{stat}}(k) = \frac{1}{N} \sum_{(i,X),(j,X)} e^{i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{(j,X)}} \langle 0, \lambda | \sigma_{i,X}^x \sigma_{j,X}^x | 0, \lambda \rangle \quad (3.17)$$

Der Zustand $|0, \lambda\rangle$ bezeichnet hier einen Grundzustand des TFIM unter Berücksichtigung der Störung durch die Wechselwirkung benachbarter Spins. Deshalb transformieren wir die Observable $O = \sigma_i^x \sigma_j^x$ mit Takahashi-Störungstheorie

$$\tilde{O} = \Gamma^\dagger O \Gamma \quad (3.18)$$

so, dass sie Diagonalgestalt in der Basis $|0\rangle$ - dem ungestörten Eigenzustand des TFIM - hat. Jetzt können wir die führenden Ordnungen berechnen, indem wir die Gleichung

$$S_{\text{stat}}(k) = \frac{1}{N} \sum_{(i,X),(j,Y)} e^{i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{(j,Y)}} \langle 0 | \Gamma^\dagger \sigma_{i,X}^x \sigma_{j,Y}^x \Gamma | 0 \rangle \quad (3.19)$$

betrachten. Da

$$\Gamma^{(n)} \sim \lambda^n \quad (3.20)$$

gilt, können zu höheren Ordnungen mehrere Terme beitragen

$$\begin{aligned}
0. \text{ Ordnung: } & \langle 0 | \Gamma^{(0)\dagger} O \Gamma^{(0)} | 0 \rangle && \sim \lambda^0 \\
1. \text{ Ordnung: } & \langle 0 | \Gamma^{(1)\dagger} O \Gamma^{(0)} | 0 \rangle + \langle 0 | \Gamma^{(0)\dagger} O \Gamma^{(1)} | 0 \rangle && \sim \lambda^1 \\
2. \text{ Ordnung: } & \langle 0 | \Gamma^{(2)\dagger} O \Gamma^{(0)} | 0 \rangle + \langle 0 | \Gamma^{(1)\dagger} O \Gamma^{(1)} | 0 \rangle + \langle 0 | \Gamma^{(0)\dagger} O \Gamma^{(2)} | 0 \rangle && \sim \lambda^2 \\
& \dots
\end{aligned}$$

In nullter Ordnung kann die Observable nur auf einen Gitterplatz wirken, (i, X) muss also (j, Y) entsprechen:

$$\begin{aligned}
& \langle 0 | P_0^{0\text{QP}} \sigma_{(i,X)}^x \sigma_{(j,Y)}^x P_0^{0\text{QP}} | 0 \rangle \\
& = \langle 0 | b_{(i,X)} b_{(j,Y)}^\dagger + \underbrace{b_{(i,X)}^\dagger b_{(j,Y)}^\dagger}_{=0} + h. c. | 0 \rangle \\
& = \delta_{i,j} \delta_{X,Y}.
\end{aligned} \tag{3.21}$$

Damit ergibt sich für den Strukturfaktor in 0. Ordnung

$$S^{(0)} = \frac{1}{N} \sum_{(i,X),(j,Y)} e^{i\vec{k}(\vec{r}_{(i,X)} - \vec{r}_{(j,Y)})} \delta_{ij} \delta_{XY} = 3. \tag{3.22}$$

Analog betrachten wir für die erste Ordnung:

$$\lambda \langle 0 | P_0^{0\text{QP}} V S \sigma_{(i,X)}^x \sigma_{(j,Y)}^x P_0^{0\text{QP}} | 0 \rangle \tag{3.23}$$

$$= \lambda \langle 0 | P_0^{0\text{QP}} \left(\sum_{\langle (i',X'),(j',Y') \rangle} b_{(i',X')}^\dagger b_{(j',Y')}^\dagger + b_{(i',X')}^\dagger b_{(j',Y')} + h. c. \right) \cdot \frac{1 - P_0^{0\text{QP}}}{E_0 - H_0} \sigma_{(i,X)}^x \sigma_{(j,Y)}^x P_0^{0\text{QP}} | 0 \rangle. \tag{3.24}$$

Der Projektor $1 - P_0^{0\text{QP}}$ projiziert auf den senkrechten Raum zum 0QP-Zustand. Deshalb tragen nur Terme bei, bei denen die Observable zwei benachbarte Teilchen erzeugt.

$$\sigma_{(i,X)}^x \sigma_{(j,Y)}^x = b_{(i,X)}^\dagger b_{(j,Y)}^\dagger + \underbrace{b_{(i,X)}^\dagger b_{(j,Y)}^\dagger}_{=0} + h. c. \tag{3.25}$$

An dieser Stelle sei nochmals betont, dass die beiden von der Observablen erzeugten Teilchen zwingend benachbart sein müssen, da diese sonst von der Störung V nicht wieder vernichtet werden können. Betrachtet man nur beitragende Terme, bleibt Folgendes übrig:

$$\lambda \langle 0 | P_0^{0\text{QP}} V S \sigma_{(i,X)}^x \sigma_{(j,Y)}^x P_0^{0\text{QP}} | 0 \rangle \tag{3.26}$$

$$= \lambda \langle 0 | P_0^{0\text{QP}} \left(\sum_{\langle (i',X'),(j',Y') \rangle} b_{(i',X')} b_{(j',Y')} \right) \cdot \frac{1 - P_0^{0\text{QP}}}{E_0 - H_0} b_{(i,X)}^\dagger b_{(j,Y)}^\dagger P_0^{0\text{QP}} | 0 \rangle \tag{3.27}$$

$$= -\frac{\lambda}{2} \begin{cases} 1 & (i, X) \text{ und } (j, Y) \text{ sind nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \equiv -\frac{\lambda}{2} \xi_1(i, X, j, Y) \tag{3.28}$$

Im letzten Schritt wurde noch die Energiedifferenz zwischen dem 0QP-Zustand und dem zwischenzeitlich entstehenden 2QP-Zustand eingesetzt:

$$E_0 - H_0 = 0 - 2 = -2. \quad (3.29)$$

Wollen wir nun den Strukturfaktor berechnen, so kann man sich zunächst klarmachen, dass nach ähnlichen Überlegungen auch

$$\langle 0 | \Gamma^{(0)\dagger} O \Gamma^{(1)} | 0 \rangle = -\frac{\lambda}{2} \xi_1(i, X, j, Y) \quad (3.30)$$

gilt, sodass wir für den Strukturfaktor in erster Ordnung bekommen:

$$S^{(1)} = 2 \cdot \frac{1}{N} \sum_{(i,X),(j,Y)} e^{i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{(j,Y)}} \cdot \left(-\frac{\lambda}{2} \xi_1(i, X, j, Y) \right) \quad (3.31)$$

$$= -4\lambda \cdot \left(\cos\left(\frac{k_1}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1 - k_2}{2}\right) \right). \quad (3.32)$$

Nach analoger Rechnung findet man für die drei Beiträge der Ordnung λ^2 :

$$\langle 0 | \Gamma^{(1)\dagger} \sigma_{(i,X)}^x \sigma_{(j,Y)}^x \Gamma^{(1)} | 0 \rangle = \frac{1}{4} \begin{cases} 1 & \text{für } \overline{(i, X)(j, Y)} = 2d \\ 1 & \text{für } \overline{(i, X)(j, Y)} = 1d \equiv \frac{1}{4} \xi_2(i, X, j, Y) \\ 6N & \text{für } \overline{(i, X)(j, Y)} = 0d \end{cases} \quad (3.33)$$

und

$$\langle 0 | \Gamma^{(2)\dagger} \sigma_{(i,X)}^x \sigma_{(j,Y)}^x \Gamma^{(0)} | 0 \rangle = \langle 0 | \Gamma^{(0)\dagger} \sigma_{(i,X)}^x \sigma_{(j,Y)}^x \Gamma^{(2)} | 0 \rangle \quad (3.34)$$

$$= \frac{1}{4} \left(-3N \delta_{(i,X)(j,Y)} + \tilde{\xi}_2(i, X, j, Y) \right) \quad (3.35)$$

$$\text{mit } \tilde{\xi}_2 \equiv \frac{1}{4} \begin{cases} 2 & \text{für } \overline{(i, X)(j, Y)} = 2d \\ 2 & \text{für } \overline{(i, X)(j, Y)} = 1d \end{cases}. \quad (3.36)$$

Die Größe d bezeichnet den Abstand zweier benachbarter Gitterplätze. Interessant ist hier, dass in zweiter Ordnung die von der Observablen erzeugten (bzw. vernichteten) Quasiteilchen nicht mehr direkte Nachbarn sein müssen, sondern auch größere Abstände haben können. Für den Strukturfaktor erhält man daher:

$$\begin{aligned} S^{(2)}(k_1, k_2) &= \\ &= \frac{\lambda^2}{N} \sum_{(i,X),(j,Y)} e^{i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{(j,Y)}} \cdot \left(\frac{1}{2} \left(-3N \delta_{(i,X)(j,Y)} + \tilde{\xi}_2(i, X, j, Y) \right) + \frac{1}{4} \xi_2(i, X, j, Y) \right) \\ &= 5\lambda^2 \cdot \left(\cos\left(\frac{k_1}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_2 - k_1}{2}\right) + \cos(k_1) + \cos(k_2) + \cos\left(\frac{k_1 + k_2}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. + \cos\left(k_1 - \frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(k_2 - \frac{k_1}{2}\right) + \cos(k_2 - k_1) \right). \end{aligned} \quad (3.37)$$

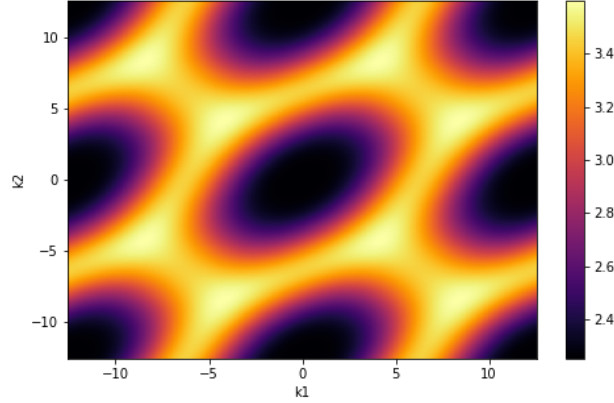


Abbildung 3.7: Statischer Strukturfaktor in zweiter Ordnung für $\lambda = 0.1$.

Ein Plot für verschiedene Werte von k_1 und k_2 ist in Abbildung 3.7 dargestellt. In diesem Plot erkennt man, dass der Strukturfaktor in der Mitte der Brillouin-Zone (also bei Impuls $(0, 0)$) am kleinsten ist. Die Intensitätsmaxima liegen in den Ecken eines Sechsecks. Dies sind Eigenschaften des Strukturfaktors eines Dreiecksgitters [18]. Dass der Strukturfaktor des Kagomegitters diese Eigenschaften erfüllt, ist sehr interessant, da sich die Dispersionen von Dreiecksgitter und Kagomegitter stark unterscheiden. So fehlt dem Dreiecksgitter beispielsweise das flache Band, bei diesem fallen alle Energiebänder zu einem dispersiven Band zusammen.

3.3 Dynamischer Strukturfaktor

Der dynamische Strukturfaktor betrachtet im Gegensatz zum Statischen nicht nur die räumliche, sondern auch die zeitliche Korrelation. Fouriertransformiert bedeutet das, dass man die Streuintensität in Abhängigkeit von k und ω betrachten möchte. Die Dispersion $\omega(k)$ ist bereits bekannt. In Kapitel 3.1 sieht man, dass sich diese in drei Bänder aufteilt. Der Ansatz zur Berechnung des dynamischen Strukturfaktors ist also folgender:

Betrachten wir zunächst noch einmal den statischen Strukturfaktor. Hier kann man zwischen den beiden σ^x -Observablen eine Eins einschieben, die man in der Basis der Eigenzustände für die drei Bänder $|e_\alpha\rangle$ schreiben kann:

$$\begin{aligned}
 S_{\text{stat}}(k) &= \frac{1}{N} \sum_{(i,X),(j,Y)} e^{i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_{(j,Y)}} \langle 0, \lambda | \sigma_{(i,X)}^x \sigma_{(j,Y)}^x | 0, \lambda \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{(i,X),(j,Y)} e^{i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_{(j,Y)}} \langle 0, \lambda | \sigma_{(i,X)}^x \left(\sum_{\alpha=1}^3 |e_\alpha\rangle \langle e_\alpha| \right) \sigma_{(j,Y)}^x | 0, \lambda \rangle. \quad (3.38)
 \end{aligned}$$

Teilt man die drei Summanden auf, erhält man die Intensität, die auf dem jeweiligem Band liegt:

$$\begin{aligned}
S_{\text{dyn},\alpha}(k, \omega) &= \frac{1}{N} \sum_{(i,X),(j,Y)} e^{i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_{(j,Y)}} \langle 0, \lambda | \sigma_{(i,X)}^x | e_\alpha \rangle \langle e_\alpha | \sigma_{(j,Y)}^x | 0, \lambda \rangle \\
&= \left| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{(i,X)} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} \langle e_\alpha | \sigma_{(i,X)}^x | 0, \lambda \rangle \right|^2 = \left| \langle e_\alpha | \sigma_k^x | 0, \lambda \rangle \right|^2. \quad (3.39)
\end{aligned}$$

Die Summe über die drei Bänder sollte natürlich wieder dem statischen Strukturfaktor entsprechen.

$$\sum_{\alpha} S_{\text{dyn},\alpha}(k) = S_{\text{stat}}(k) \quad (3.40)$$

Die k -abhängigen Eigenzustände $|e_\alpha\rangle$ sind bereits aus Kapitel 3.1 bekannt. In zweiter Ordnung können diese aufgrund ihrer Komplexität nur noch numerisch berechnet werden. Die rechte Seite der Gleichung $\sigma_{(j,Y)}^x |0, \lambda\rangle$, also die Observable, soll jedoch noch analytisch berechnet werden. Da es sich bei den Eigenzuständen $|e_\alpha\rangle$ um Einteilchenzustände handelt, kann man die Berechnung der Observable für einen beliebigen Einteilchenzustand durchführen:

$$\langle 1, \lambda | \sigma_k^x | 0, \lambda \rangle.$$

Dabei muss wieder beachtet werden, dass die Zustände in der gestörten Basis des Systems sind. Die Observable muss also wieder transformiert werden:

$$\tilde{O} = \Gamma^\dagger O \Gamma.$$

Es ist wichtig, zwischen $\Gamma_{(1\text{QP})}$ und $\Gamma_{(0\text{QP})}$ zu unterscheiden. Letzteres transformiert die Observable für den $|0, \lambda\rangle$ -Zustand, $\Gamma_{(1\text{QP})}$ für den $|1, \lambda\rangle$ -Zustand.

Danach kann man die Größe $S_{\text{dyn},\alpha}(k)$ mit den numerisch berechneten Eigenzuständen bestimmen, indem man das Ergebnis und die Eigenvektoren für das α -te Energieband in derselben Basis $(b_{k,A}^\dagger, b_{k,B}^\dagger, b_{k,C}^\dagger)$ schreibt und skalarmultipliziert.

Mithilfe von Takahashi-Störungstheorie soll folgende Observable bis in zweite Ordnung berechnet werden:

$$O_{\text{dyn}} := \Gamma_{(1\text{QP})}^\dagger \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{(i,X)} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} \sigma_{(i,X)}^x \right) \Gamma_{(0\text{QP})} |0\rangle \quad (3.41)$$

In **nullter Ordnung** wirkt keine weitere Störung, die Γ werden nur zu den Projektoren auf ihre jeweiligen Unterräume:

$$O_{\text{dyn}}^{(0)} = P_0^{1\text{QP}} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{(i,X)} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} \sigma_{(i,X)}^x \right) P_0^{0\text{QP}} |0\rangle \quad (3.42)$$

Somit kann die Observable nur an dem Platz, auf den sie wirkt, ein Teilchen erzeugen. Dazu kommt jeweils noch der Phasenfaktor je nach Position in der Einheitszelle.

$$O_{\text{dyn}}^{(0)} = (b_{k,A}^\dagger + e^{-i\frac{k_2}{2}} b_{k,B}^\dagger + e^{-i\frac{k_1}{2}} b_{k,C}^\dagger) |0\rangle \quad (3.43)$$

In **erster Ordnung** gibt es zwei Terme, die man betrachten muss:

$$O_{\text{dyn}}^{(1)} = \Gamma_{1\text{QP}}^{(1)\dagger} \sigma_k \Gamma_{0\text{QP}}^{(0)} |0\rangle + \Gamma_{1\text{QP}}^{(0)\dagger} \sigma_k \Gamma_{0\text{QP}}^{(1)} |0\rangle. \quad (3.44)$$

Der erste Term trägt nicht bei, da S_1 aus $\Gamma_{1\text{QP}}^{(1)\dagger}$ auf den Raum senkrecht zu den Einteilchenzuständen projiziert, nachdem σ einen Einteilchenzustand erzeugt hat:

$$\Gamma_{1\text{QP}}^{(1)\dagger} \sigma_k \Gamma_{0\text{QP}}^{(0)} |0\rangle = \lambda P_0^{1\text{QP}} V S_1 \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{(i,X)} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} \sigma_{(i,X)}^x \right) P_0^{0\text{QP}} |0\rangle = 0. \quad (3.45)$$

Beim zweiten Term sieht das anders aus: V kann zunächst zwei Teilchen erzeugen, σ kann danach eines von beiden wieder vernichten:

$$\Gamma_{1\text{QP}}^{(0)\dagger} \sigma_k \Gamma_{0\text{QP}}^{(1)} |0\rangle = P_0^{1\text{QP}} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{(i,X)} e^{-i\vec{k}\vec{r}_{(i,X)}} \sigma_{(i,X)}^x \right) \lambda S_0 V P_0^{0\text{QP}} |0\rangle. \quad (3.46)$$

Da auch die Störung V im Impulsraum betrachtet wird, erhält man durch die Transformation wieder Kosinus-Terme und zusätzlich die Phasen aus der fouriertransformierten Observable:

$$O_{\text{dyn}}^{(1)} = \Gamma_{1\text{QP}}^{(0)\dagger} \sigma_k \Gamma_{0\text{QP}}^{(1)} |0\rangle = -\frac{\lambda}{2} \left(b_A^\dagger \left(\cos\left(\frac{k_1}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_2}{2}\right) \right) + e^{-i\frac{k_2}{2}} b_B^\dagger \left(\cos\left(\frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1 - k_2}{2}\right) \right) + e^{-i\frac{k_1}{2}} b_C^\dagger \left(\cos\left(\frac{k_1}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1 - k_2}{2}\right) \right) \right) |0\rangle. \quad (3.47)$$

In **zweiter Ordnung** müssen drei verschiedene Terme untersucht werden:

$$O_{\text{dyn}}^{(2)} = \Gamma_{1\text{QP}}^{(1)\dagger} \sigma_k^x \Gamma_{0\text{QP}}^{(1)} |0\rangle + \Gamma_{1\text{QP}}^{(2)\dagger} \sigma_k \Gamma_{0\text{QP}}^{(0)} |0\rangle + \Gamma_{1\text{QP}}^{(0)\dagger} \sigma_k \Gamma_{0\text{QP}}^{(2)} |0\rangle. \quad (3.48)$$

Die Prozesse die dabei beitragen sind:

- Zwei Teilchen werden durch ein V erzeugt, die Observable erzeugt ein Weiteres, durch ein zweites V werden zwei wieder vernichtet.
- Zwei Teilchen werden durch ein V erzeugt, durch das zweite V hüpft ein Teilchen, die Observable vernichtet eines der Teilchen.
- Die Observable erzeugt ein Teilchen, das V zwei Weitere, durch das zweite V werden wieder zwei vernichtet.
- Extensive Prozesse, bei denen die V auf beliebige Nachbarpaare wirken können. Diese Terme löschen sich aber wie erwartet gegenseitig aus.

Zusammengefasst erhält man als Ergebnis für die zweite Ordnung:

$$\begin{aligned}
O_{\text{dyn}}^{(2)} = \frac{5\lambda^2}{4} & \left[b_A^\dagger \left(\cos\left(\frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1}{2}\right) + \cos(k_2) + \cos(k_1) + \cos\left(k_2 - \frac{k_1}{2}\right) \right. \right. \\
& + \cos\left(k_1 - \frac{k_2}{2}\right) - \frac{2}{5} \Big) + e^{-i\frac{k_2}{2}} b_B^\dagger \left(\cos\left(\frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1 - k_2}{2}\right) + \cos(k_1 - k_2) \right. \\
& + \cos(k_2) + \cos\left(k_1 - \frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1 + k_2}{2}\right) - \frac{2}{5} \Big) + e^{-i\frac{k_1}{2}} b_C^\dagger \left(\cos\left(\frac{k_1}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1 - k_2}{2}\right) \right. \\
& \left. \left. + \cos(k_1 - k_2) + \cos(k_1) + \cos\left(k_2 - \frac{k_1}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1 + k_2}{2}\right) - \frac{2}{5} \right) \right] |0\rangle. \quad (3.49)
\end{aligned}$$

Zur Berechnung des dynamischen Strukturfaktors wird nun die Observable $O_{\text{dyn}} = O_{\text{dyn}}^{(0)} + O_{\text{dyn}}^{(1)} + O_{\text{dyn}}^{(2)} + \mathcal{O}(\lambda^3)$ mit den Eigenvektoren der Matrix multipliziert. In einem Farbplot dargestellt ist dies in Abbildung 3.8 auf einem Hochsymmetriepfad und in Abbildung 3.9 unterteilt in die drei Bänder zu sehen.

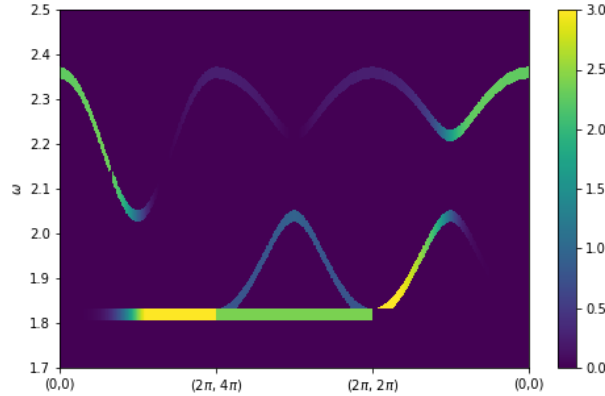


Abbildung 3.8: Dynamischer Strukturfaktor mit Observable und Eigenvektoren jeweils in zweiter Ordnung dargestellt auf einem Hochsymmetriepfad, $\lambda = 0.1$.

Wie man in Abbildung 3.8 sehen kann, ist das mittlere Band im Bereich $(0, 0) \rightarrow (2\pi, 4\pi)$ nicht zu sehen. Im Bereich von $(2\pi, 2\pi) \rightarrow (0, 0)$ fehlt das flache Band. Um dies zu erklären betrachten wir einen Eigenzustand von H in der Basis (b_{kA}, b_{kB}, b_{kC}) , den wir (α, β, γ) nennen.

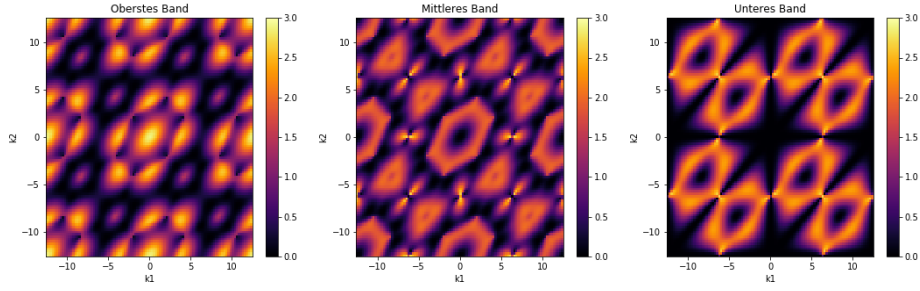


Abbildung 3.9: Dynamischer Strukturfaktor in zweiter Ordnung ($\lambda = 0.1$) aufgeteilt in die drei Energiebänder.

Spiegeln wir diesen Zustand entlang einer Symmetrieachse in \vec{e}_2 -Richtung (siehe Abbildung 3.10), transformiert sich der Zustand zu

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \beta e^{-i(k_1 - k_2)} \\ \alpha e^{-ik_1} \\ \gamma \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

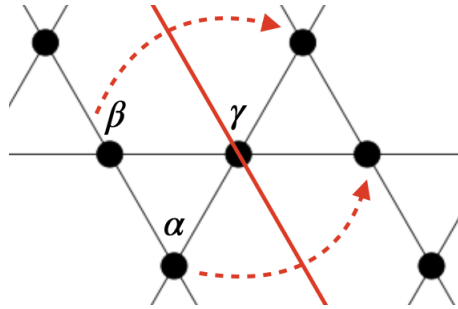


Abbildung 3.10: Spiegelung an der Symmetrieachse.

Die Spiegelung entspricht der Anwendung eines Spiegeloperators P auf den Zustand. Dieser kann auf den Eigenzustand angewendet werden, da er mit dem Hamiltonian vertauscht. Somit ist der Eigenzustand des Hamiltons auch Eigenzustand des P -Operators. Mögliche Eigenwerte des Spiegeloperators sind ± 1 . Für den Eigenwert -1 folgt:

$$P \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Unter der Bedingung, dass $k_2 = 2k_1$ gilt, kann man eine feste Beziehung zwischen α und β in Abhängigkeit von k_1 herstellen, für die gilt:

$$\gamma = 0 \quad (3.52)$$

$$\beta = -\alpha e^{-ik_1}. \quad (3.53)$$

Durch Anwendung der Observable in nullter Ordnung auf diesen Zustand verschwindet der Beitrag für den dynamischen Strukturfaktor:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \alpha \\ -\alpha e^{-ik_1} \\ 0 \end{pmatrix}^* \cdot O_{\text{dyn}}^{(0)} &= \begin{pmatrix} \alpha \\ -\alpha e^{ik_1} \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\frac{k_2}{2}} \\ e^{-i\frac{k_1}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \alpha - \alpha(e^{ik_1} \cdot e^{-ik_1}) = 0, \end{aligned} \quad (3.54)$$

wobei im letzten Schritt für die Observable die Relation $k_2 = 2k_1$ ausgenutzt wurde. Damit verschwindet die Intensität eines Eigenzustands auf dem Pfad $k_2 = 2k_1$ und somit auch die Intensität auf einem Band.

Um das fehlende flache Band im Bereich $(2\pi, 2\pi) \rightarrow (0, 0)$ zu erklären, muss man sich den Eigenzustand des flachen Bandes im k -Raum anschauen. Dazu muss der oben beschriebene lokale Zustand $\frac{1}{\sqrt{6}}(|1\rangle - |2\rangle + |3\rangle - |4\rangle + |5\rangle - |6\rangle)$ in den Impulsraum transformiert werden:

$$|k_{\text{flach}}\rangle = \begin{pmatrix} -1 + e^{-i(k_1-k_2)} \\ 1 - e^{-ik_1} \\ e^{-ik_1} - e^{-i(k_1-k_2)} \end{pmatrix}. \quad (3.55)$$

Dabei wird wieder die Basis b_{kA}, b_{kB}, b_{kC} für die Impulszustände verwendet. Für den Überlapp mit der Observable auf dem Pfad $k_1 = k_2$ erhält man dann:

$$\langle k_{\text{flach}} | \cdot O_{\text{dyn}}^{(0)} = \begin{pmatrix} -1 + e^{i(k_1-k_2)} \\ 1 - e^{ik_1} \\ e^{ik_1} - e^{i(k_1-k_2)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-ik_2/2} \\ e^{-ik_1/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 + 1 \\ 1 - e^{ik_1} \\ e^{ik_1} - 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-ik_1/2} \\ e^{-ik_1/2} \end{pmatrix} = 0. \quad (3.56)$$

Analog verschwindet hier also das flache Band auf dem Pfad $k_1 = k_2$. [14]

4 Kagomegitter mit Unordnung

In der realen Welt existieren natürlich keine perfekten Gitter, wie bisher in der Rechnung angenommen wurde. Selbst unter perfekten Laborbedingungen findet man immer Verunreinigungen, welche die Eigenschaften eines Materials beeinflussen. In vielen Fällen ist das auch so gewollt, man denke zum Beispiel an die Dotierung von Halbleitern. Deshalb ist es zum einen in der Anwendung, zum anderen auch von theoretischer Seite her interessant, welche Auswirkung Unordnung auf ein System hat.

4.1 Modell und Grundzustandsenergie

Das bimodale, statische Unordnungsmodell, welches in dieser Arbeit untersucht werden soll, kann durch diesen modifizierten Hamiltonoperator des schon bekannten antiferromagnetischen TFIM beschrieben werden:

$$H = - \sum_i \sigma_i^z + \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}(p) \sigma_i^x \sigma_j^x \quad (4.1)$$

$$\text{mit: } J_{ij}(p) = \begin{cases} J_A & \text{mit Wahrscheinlichkeit } p \\ J_B & \text{mit Wahrscheinlichkeit } (1 - p) \end{cases} .$$

Hier kann die Kopplungskonstante mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit p zwei verschiedene Werte J_A oder J_B annehmen. Das heißt die Bindungsstärke ist zufällig, aber nicht beliebig. Ist die Kopplungsstärke einmal festgelegt ändert sie sich nicht mehr. Auf einem unendlich großen System gibt es dann unendlich viele Möglichkeiten, J_A , J_B auf dem Gitter anzuordnen. Eine solche bestimmte Anordnung wird als Unordnungsconfiguration bezeichnet. Im Folgenden werden häufig endliche Systeme betrachtet. Dabei kann es für unterschiedliche Konfigurationen zu statistischen Schwankungen in den untersuchten Größen kommen. Um dem thermodynamischen Limes unendlich großer Systeme näher zu kommen, ist es nötig über viele Konfigurationen zu mitteln.

Die erste Konsequenz aus der Unordnung ist, dass keine Translationsinvarianz mehr angenommen werden kann. Die Dispersion kann also nicht mehr analog zu Kapitel 3.1 mittels Fouriertransformation berechnet werden. Man kann jedoch trotzdem statische Größen über alle Unordnungsconfigurationen gemittelt ($\langle \rangle_{\text{av}}$) perturbativ ausrechnen. Beispielsweise ist

die gemittelte Grundzustandsenergie bis in zweite Ordnung gegeben durch:

$$\langle E_0^{(0)} \rangle_{\text{av}} = -hN, \quad (4.2)$$

$$\langle E_0^{(1)} \rangle_{\text{av}} = \langle 0 | P_0 V P_0 | 0 \rangle = 0, \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \langle E_0^{(2)} \rangle_{\text{av}} &= \langle 0 | P_0 V S V P_0 | 0 \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\sum_{n=1}^2 p_n (J_{ij}^n)^2 \right) \\ &= -3N(pJ_A^2 + (1-p)J_B^2) = -3N \langle J_{ij}^2 \rangle \end{aligned} \quad (4.4)$$

Auch der gemittelte statische Strukturfaktor kann analog zu dieser Rechnung bestimmt werden:

$$\langle S(k_1, k_2) \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{N} \sum_{(i,X),(j,Y)} e^{i\vec{k}(r_{(i,X)} - r_{(j,Y)})} \langle \langle 0, \lambda | \sigma_i^x \sigma_j^x | 0, \lambda \rangle \rangle_{\text{av}}. \quad (4.5)$$

Grundlegend funktioniert diese Rechnung analog zur Berechnung des Strukturfaktors ohne Unordnung. Ab der zweiten Ordnung muss man jetzt zwischen Termen, die auf verschiedene Bindungen wirken und Terme, die auf dieselbe Bindung zweimal wirken, unterscheiden. Da die Unordnungsconfiguration bestimmt ist und sich während des Prozesses nicht ändert, hat jede Bindung immer dieselbe Bindungsstärke. Wirkt ein Term also zweimal auf eine Bindung hat dieser Term nicht die Bindungsstärke $\langle J_{ij} \rangle^2$, sondern $\langle J_{ij}^2 \rangle$.

In zweiter Ordnung gibt es neben den $\langle J_{ij} \rangle^2$ -Termen auch $\langle J_{ij}^2 \rangle$ -Terme. Jedoch sind dies alles extensive Prozesse, die sich gegenseitig auslöschen. Der Strukturfaktor ist also analog zum Fall ohne Unordnung (vergleiche Kapitel 3.2) gegeben durch:

$$\begin{aligned} \langle S(k_1, k_2) \rangle_{\text{av}} &= 3 - \langle J_{ij} \rangle \cdot \left(\cos\left(\frac{k_1}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_1 - k_2}{2}\right) \right) \\ &+ 5 \langle J_{ij}^2 \rangle \cdot \left[\cos\left(\frac{k_1}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_2 - k_1}{2}\right) + \cos(k_1) + \cos(k_2) \right. \\ &\left. + \cos\left(\frac{k_1 + k_2}{2}\right) + \cos\left(k_1 - \frac{k_2}{2}\right) + \cos\left(k_2 - \frac{k_1}{2}\right) + \cos(k_2 - k_1) \right] + \mathcal{O}(J^3). \end{aligned} \quad (4.6)$$

4.2 Rechnung auf endlichem System

Eine andere Möglichkeit wichtige Größen für das Kagomegitter mit Unordnung zu bestimmen, ist die Simulation auf einem endlichen System. Im Folgenden können mit dieser Methode Größen wie die Zustandsdichte oder der dynamische Strukturfaktor perturbativ um $J_{ij} = 0$ ausgerechnet werden.

4.2.1 Methode

Zunächst beginnt man damit eine fortlaufende Nummerierung der Gitterpunkte im endlichen System zu definieren. Hier wurde die Nummerierung wie in Abbildung 4.1 gewählt.

von 30×30 Einheitszellen verwendet. Das entspricht einer Matrix der Größe 2700×2700 , deren Einträge bestimmt werden müssen und welche danach diagonalisiert werden muss. Vergrößert man die Systemgröße N , steigt die Anzahl der Matrixelemente mit N^2 und der Rechenaufwand bei der Diagonalisierung mit N^3 . Sinnvoller ist es also über mehrere Konfigurationen zu mitteln, da der Rechenaufwand hier nur linear mit der Anzahl der Mittelungen ansteigt.

4.2.2 Zustandsdichte

Berechnet man die Eigenwerte dieser Matrix, kann man daraus die Zustandsdichte ermitteln. Für ausreichend große Systeme entspricht die Verteilung der Eigenwerte der Verteilung der Zustände auf den Eigenenergien. Hier sind diese jedoch nicht in die drei Bänder aufgeteilt, da man keine Impulsabhängigkeit aus der Rechnung erhält. In Abbildung 4.2 sieht man diese Verteilung mit und ohne Unordnung. Die Unordnung wird wie oben beschrieben dadurch in das System gebracht, dass für jeden Matrixeintrag die Bindungsstärke mit Wahrscheinlichkeit p entweder J_A oder J_B ist.

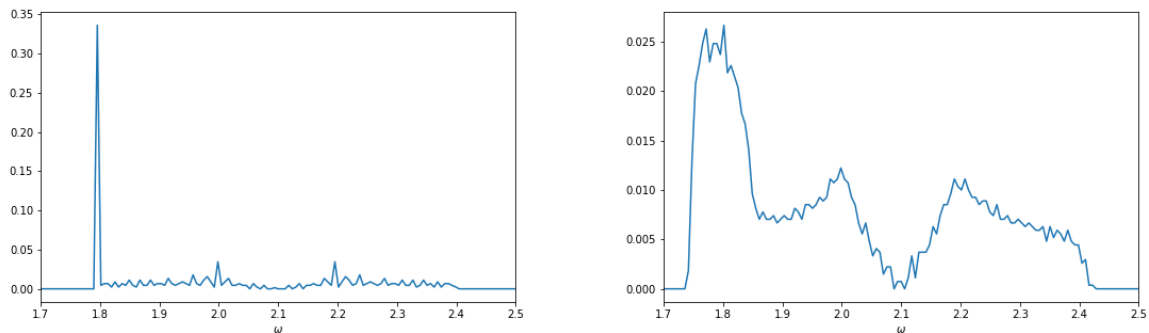


Abbildung 4.2: Normierte Zustandsdichte. Links: Ohne Unordnung ($\lambda = 0.1$), Rechts: Mit Unordnung ($p = 0.5$, $J_A = 0.12$, $J_B = 0.08$).

Abbildung 4.2 links bestätigt unsere analytisch berechneten Ergebnisse dahingehend, dass ein Drittel der Zustände den Energiewert $E = 2 - 2\lambda = 1.8$ besitzen. Das entspricht dem flachen Band in der analytisch berechneten Dispersion. Die Zustandsdichte mit Unordnung zeigt hingegen kein eindeutiges flaches Band mehr auf. Das flache Band wird also entweder dispersiv oder verschmiert. Genauer kann das Verhalten erst mit dem dynamischen Strukturfaktor bestimmt werden.

4.2.3 Dynamischer Strukturfaktor

Um den dynamischen Strukturfaktor zu berechnen, muss nun die Impulsabhängigkeit hinzugefügt werden. Wie schon im Kapitel 3.3 soll der dynamische Strukturfaktor auf einem Hochsymmetriepfad dargestellt werden.

Das Prinzip dieser Rechnung ist das Folgende: Jeder Eigenwert mit zugehörigem Eigenvektor wird wie oben einem Bin zugeordnet. Dann wird der Überlapp jedes Eigenvektors mit der impulsabhängigen Observable berechnet und die Intensität in einem Farbplot mit der Energie auf der y -Achse und dem Impuls auf der x -Achse dargestellt. Dies entspricht der Rechnung aus Kapitel 3.3, nur dass sie hier in der Ortsbasis durchgeführt wird.

Die Observable wird hier nur in nullter Ordnung erstellt, da der größte Effekt der Unordnung nicht durch die Observable, sondern durch die Unordnung in der Matrix auftritt. Es gibt es zwei Möglichkeiten, die Observable auf dem Hochsymmetriepfad zu generieren:

Eine Möglichkeit ist es eine Ordnung auf dem Gitter zu definieren und die Observable manuell aufzustellen. Dazu wird jedem Platz auf dem endlichen Gitter nach Wahl eines geeigneten Koordinatensystems eine x - und y -Komponente zugewiesen. Die Observable in nullter Ordnung kann dann folgendermaßen durch eine Fouriertransformation der Koordinaten berechnet werden:

$$O^{(0)}(k_1, k_2) = \exp(i(\text{coord}_x \cdot \frac{k_1}{2} + \text{coord}_y \cdot \frac{k_2}{2})). \quad (4.7)$$

Dabei sind $\text{coord}_{x,y}$ die Koordinaten aller Gitterplätze zusammengefasst in einem Array. Bei der Wahl der (k_1, k_2) muss man aufpassen, da nur die Impulse, welche die periodischen Randbedingungen des endlichen Systems erfüllen, auf dem Gitter liegen.

Bei der zweiten Möglichkeit wird die Observable automatisch erstellt. Das Kagomegitter alleine ist jedoch kein reguläres Bravaisgitter, bei dem man mit zwei Basisvektoren jeden Gitterpunkt erreichen kann. Ohne diese Struktur ist es schwierig eine Fouriertransformation über zwei Richtungen des Gitters durchzuführen. Deshalb müssen auch die fehlenden Gitterplätze, die dem Kagome im Vergleich zum Dreiecksgitter - dem zugrundeliegendem Bravaisgitter - fehlen, mitgenommen werden (siehe Abbildung 4.3).

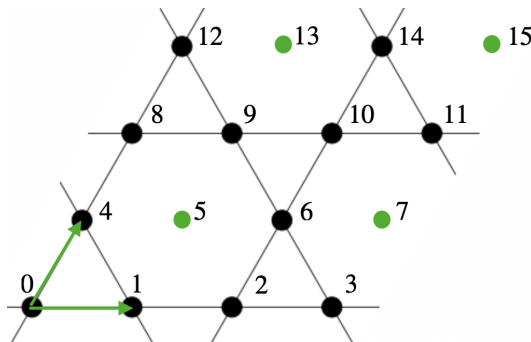


Abbildung 4.3: Rechnung in der Dreiecksgitter-Basis: Durch zusätzliche Gitterpunkte (grün) entsteht ein Bravaisgitter.

Jetzt wird ein $\sqrt{M} \times \sqrt{M} \times M$ -Array erstellt mit $M = 4/3N =$ Anzahl an Gitterplätzen im erweiterten Dreiecksgitter. Dabei geben die ersten beiden Komponenten die Koordinate eines Gitterpunkts an, die dritte die Nummerierung der Plätze. Das bedeutet z.B, dass der

Gitterpunkt 4 in Abbildung 4.3 einem Eintrag im Matrixelement $(0,1,4)$ entspricht. Diese Matrix kann jetzt numerisch entlang der Achsen 1 und 2 fouriertransformiert werden. Dadurch erhält man die Observable für alle Impulse auf dem Dreiecksgitter im Bereich $k_1, k_2 \in \{0, 4\pi\}$. Als letztes müssen nur noch die Teile der Observable mit den Impulsen, die auf dem Hochsymmetriepfad liegen, aus der Matrix extrahiert und auf die Eigenvektoren angewandt werden. Die Eigenvektoren werden zuvor auch in die Dreiecksgitterbasis transformiert mit dem Eintrag 0 an allen Stellen, wo das Kagome keinen Gitterplatz hat, sodass die zusätzlichen Plätze aus dem Dreiecksgitter nicht beitragen.

Mit beiden Methoden wurden dieselben Resultate erzielt. In den folgenden Abbildungen wird jedoch letzteres Verfahren genutzt. Zur Überprüfung der Ergebnisse aus Kapitel 3.3 wird zunächst der dynamische Strukturfaktor ohne Unordnung berechnet und mit dem analytischen Ergebnis verglichen (siehe Abbildung 4.4). Normiert man die Rechnung auf dem endlichen System geeignet mit der Systemgröße und der Einteilung in Energiebins, kann man auch die Intensitäten direkt vergleichen. Wie man sieht stimmen diese sehr gut überein.

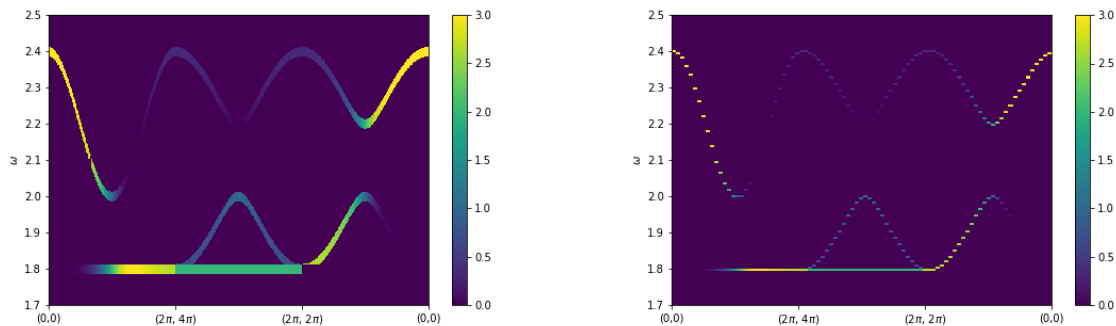


Abbildung 4.4: Dynamischer Strukturfaktor in erster Ordnung mit Observable in nullter Ordnung. Links: aus analytischer Rechnung, Rechts: auf endlichem System, hier so normiert, dass man die Intensitäten vergleichen kann.

Mit dieser Methode kann man jetzt auch den dynamischen Strukturfaktor mit Unordnung berechnen. Dazu wendet man die Observable auf die oben beschriebene Matrix mit Unordnung an (siehe Abbildung 4.5). Wie sich schon in der Zustandsdichte angedeutet hat, kann man auch hier sehen, dass vor allem das flache Band von der Unordnung beeinflusst wird. Jedoch wird das flache Band nicht dispersiv, sondern nur verbreitert. Weiterhin sieht man, dass die beiden impulsabhängigen Bänder nur wenig von der Unordnung beeinflusst sind. Die Unordnung wirkt also am stärksten auf lokalisierte Zustände. Das bedeutet im Umkehrschluss für das Dreiecksgitter oder auch das Quadratgitter, dass dort der Einfluss von Unordnung viel geringer ist, da es in diesen Gittern keine flachen Bänder gibt. Zu diesem Ergebnis kamen auch M. Hörmann und K. P. Schmidt in [12].

Den Grund dafür findet man in der Zustandsdichte. Diese divergiert im flachen Band für ein unendlich ausgedehntes System, da genau ein Drittel aller Zustände im flachen Band

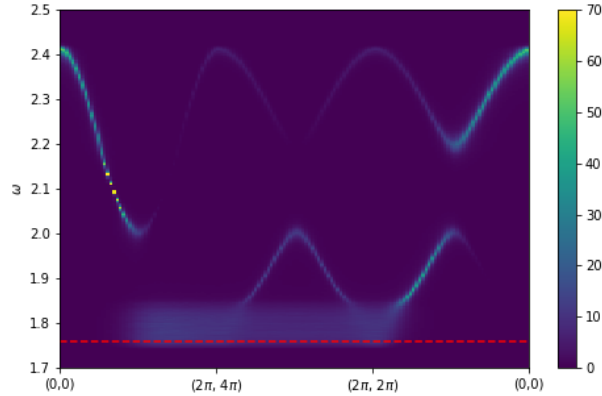


Abbildung 4.5: Dynamischer Strukturfaktor mit Unordnung gemittelt über 50 Konfigurationen, $p = 0.5$, $J_A = 0.12$, $J_B = 0.08$, rote Linie bei $\omega = 2 - 2J_A$.

liegen (siehe Abbildung 4.2). In den beiden anderen Bändern sind die Zustände impulsabhängig und damit kontinuierlich in der Energie verteilt. Nach Fermis Goldener Regel ist die Wahrscheinlichkeit für einen Zustand durch eine Störung in einen anderen Zustand überzugehen proportional zu der Zustandsdichte am Ausgangspunkt. Somit ist es plausibel, dass der Effekt der Unordnung umso stärker ist, desto lokalisierter und damit flacher ein Band ist.

Für die Breite des flachen Bands würde man erwarten, dass sich das obere Ende bei $\omega = 2 - 2J_B$ und das untere Ende bei $\omega = 2 - 2J_A$ befindet. Interessanterweise ist das beim Kagomegitter nicht der Fall. Vergleicht man die tiefste Stelle des verbreiterten flachen Bands mit der roten Linie bei $\omega = 2 - 2J_A$ in Abbildung 4.5 fällt auf, dass die Energie ein Stück weiter als erwartet abgesunken ist. Dies ist ein Hinweis auf eine Erniedrigung der Energie durch Unordnung, wie sie auch in [12] beschrieben wird.

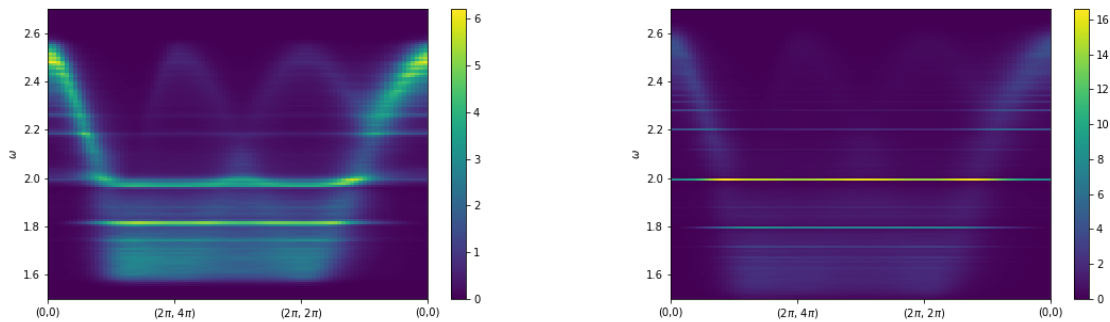


Abbildung 4.6: Dynamischer Strukturfaktor mit Unordnung gemittelt über 50 Konfigurationen: Links: $p = 0.5$, $J_A = 0.18$, $J_B = 0.02$, Rechts: $p = 0.5$, $J_A = 0.2$, $J_B = 0$.

Nun kann man betrachten, was passiert, wenn man noch mehr Unordnung zum System hinzufügt, indem man den Abstand zwischen J_A und J_B weiter erhöht. Um die Konfigurationen besser vergleichen zu können, wird der Mittelwert der Verteilung $\mu = 0.1$ festgehalten und nur die Standardabweichung σ erhöht. Abbildung 4.5 entspricht $\sigma/\mu = 0.2$. In Abbildung 4.6 ist jetzt der dynamische Strukturfaktor für $\sigma/\mu = 0.8$ (links) und $\sigma/\mu = 1$ (rechts) zu sehen. Zum einen fällt auf, dass sich die Bandstruktur aufgrund der verbreiterten Bänder ändert. In Abbildung 4.6 links sieht man zum Beispiel bei $k = (\pi, \pi)$ wie sich das obere mit dem mittleren Band verbindet.

Zum anderen fällt vor allem bei Abbildung 4.6 rechts auf, dass sich flache Linien mit hoher Intensität, also lokalisierte Zustände bilden. Der Grund für die Linien ist folgender: Hier ist die Standardabweichung so groß, dass $J_B = 0$ ist. Das hat zur Folge, dass mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit Teile des Gitters vom Rest des Gitters abgetrennt werden können. Betrachtet man einen einzelnen Gitterpunkt, so ist dieser zum Beispiel mit einer Wahrscheinlichkeit von 0.5^4 isoliert. Analog wird jedes Dimer mit einer Wahrscheinlichkeit von 0.5^7 isoliert (siehe Abbildung 4.7). Die Eigenenergie eines Einteilchenzustands $|1\rangle$ auf einem isolierten Gitterpunktes lässt sich leicht berechnen. In erster Ordnung werden wieder nur die Terme $b_i^\dagger b_j$ betrachtet. Da jede Bindung zu den nächsten Nachbarn aber die Bindungsstärke 0 hat, bleibt nur noch der Beitrag aus nullter Ordnung:

$$E = \langle 1 | H^{(1)} | 1 \rangle = \langle 1 | \left[2 \sum_i b_i^\dagger b_i + J_B \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + h.c. \right] | 1 \rangle = 2 \quad (4.8)$$

Für die Dimere funktioniert die Überlegung analog. Man betrachte die Einteilchenzustände $|a\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle)$ und $|b\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |2\rangle)$ und wende sie wieder auf den Hamiltonian in erster Ordnung an.

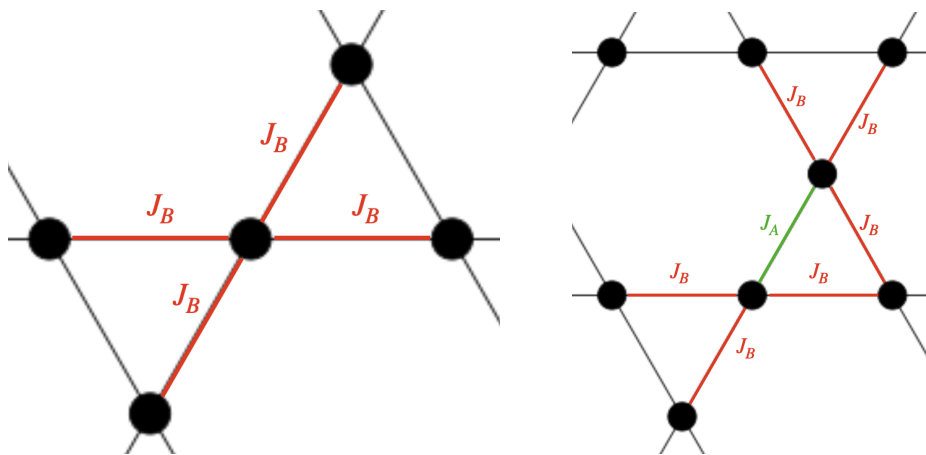


Abbildung 4.7: Isolierte Gitterpunkte (links) und Dimere (rechts) entstehen wenn sie durch $J_B = 0$ Bindungen vom Rest des Gitters abgetrennt sind.

Die Teilchen können hier nur zwischen den zwei Plätzen hin und her springen, nicht aber aus dem Dimer heraus. Für den ersten Zustand erhält man:

$$E = \langle a | H^{(1)} | a \rangle = \langle a | \left[2 \sum_i b_i^\dagger b_i + J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + h.c. \right] | a \rangle = \langle a | [2 | a \rangle + J_A | a \rangle] = 2 + 2J_A \quad (4.9)$$

Für den anderen Zustand ist die Rechnung analog:

$$E = \langle b | H^{(1)} | b \rangle = \langle b | \left[2 \sum_i b_i^\dagger b_i + J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j + h.c. \right] | b \rangle = \langle b | [2 | b \rangle - J_A | b \rangle] = 2 - 2J_A \quad (4.10)$$

Damit erhält man für $J_A = 0.2$ drei lokalisierte Energien bei 1.8, 2.0 und 2.2. Genau diese Linien sind auch in Abbildung 4.6 rechts zu sehen. Weitere Linien mit weniger Intensität können durch größere isolierte Gitterstücke entstehen.

Auch in der linken Abbildung mit $\sigma/\mu = 0.8$ sind die Linien noch verschwommen zu sehen. Dabei handelt es sich um denselben Effekt, nur schwächer. Je weiter sich eine Bindungsstärke der 0 annähert, desto schärfer werden die eben diskutierten Linien.

4.2.4 Einseitige Wahrscheinlichkeitsverteilung

Bisher wurde die Verteilung der Unordnung immer für $p = 0.5$ berechnet. Interessant ist aber auch, was passiert, wenn eine der beiden Kopplungsstärken häufiger als die andere vorkommt. Denn je größer p wird, desto deutlichere Peaks sind wieder im flachen Band zu erkennen. Damit als Ursprung die eben diskutierten isolierten Cluster ausscheiden, wurde in Abbildung 4.8 weniger Unordnung hinzugefügt, hier $\sigma/\mu = 0.2$.

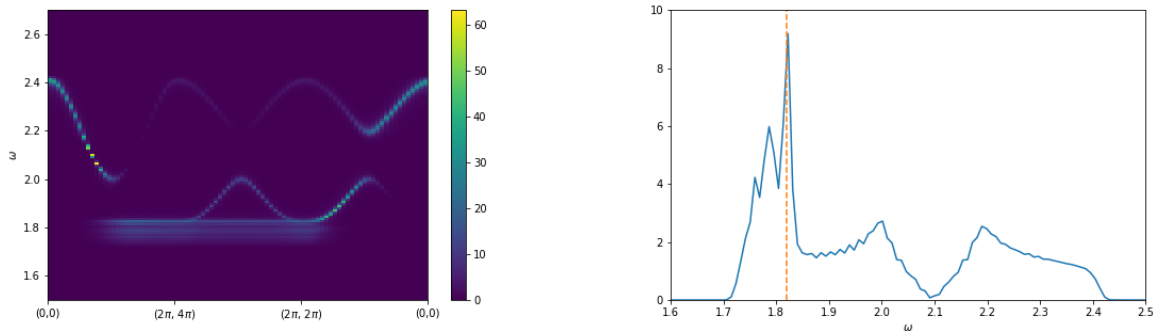


Abbildung 4.8: Links: Dynamischer Strukturfaktor gemittelt über 50 Konfigurationen mit Unordnung, $p = 0.8$, $J_A = 0.09$, $J_B = 0.14$, Rechts: ebenfalls gemittelte normierte Zustandsdichte zur selben Unordnung.

Der Grund für die Peaks hier ist ein anderer. In Kapitel 3.1 wurden die lokalisierten Eigenzustände des ungestörten Kagomegitters diskutiert [9]. Mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit können sich solche Zustände auch im Kagome mit Unordnung bilden. Dazu müssen in erster Ordnung alle Bindungen auf dem Sechseck dieselbe oder alternierende Kopplungsstärke haben und zusätzlich noch die Bindungspaare aus dem Sechseck heraus (siehe Abbildung 3.2) jeweils die selbe Bindungsstärke haben. Die Wahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von p und damit der mittlere Anteil an lokalisierten Zuständen im Vergleich zum flachen Band ist gegeben durch

$$P_1 = (p^2 + (1 - p)^2)^6 \cdot p^6 \quad \text{zur Energie } 2 - 2J_A, \quad (4.11)$$

$$P_2 = (p^2 + (1 - p)^2)^6 \cdot (1 - p)^6 \quad \text{zur Energie } 2 - 2J_B, \quad (4.12)$$

$$P_3 = (p^2 + (1 - p)^2)^6 \cdot 2p^3(1 - p)^3 \quad \text{zur Energie } 2 - (J_A + J_B). \quad (4.13)$$

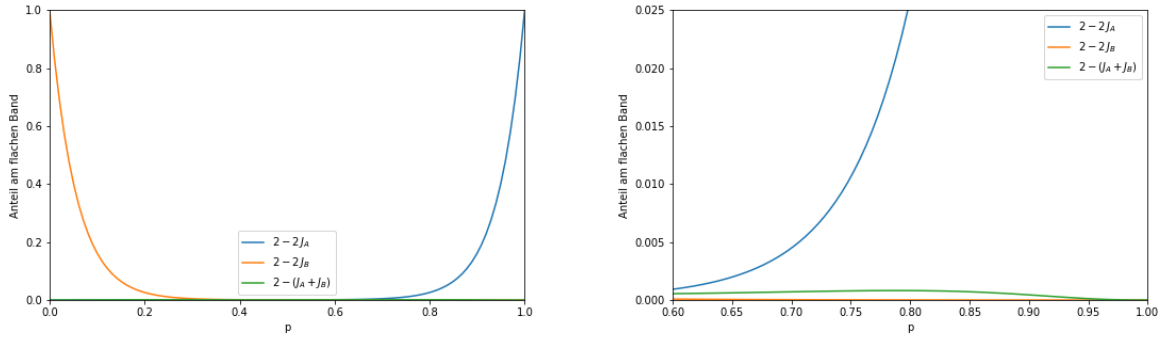


Abbildung 4.9: Mittlerer Anteil an lokalisierten Zuständen im Vergleich zum flachen Band in Abhängigkeit von p .

Wie man in Abbildung 4.9 sieht, sind für große p die Anteile von P_2 und P_3 am flachen Band sehr gering. Der Einfluss von P_1 sollte aber für $p = 0.8$ mit Energie $2 - 2J_A = 1.82$ zu sehen sein. Wie erwartet kann man diesen Peak in Abbildung 4.8 gut erkennen. Auch die Intensität stimmt gut überein: In der Eigenwertverteilung der 50 Konfigurationen mit $p = 0.8$ aus Abbildung 4.8 haben durchschnittlich 26.46 Eigenwerte exakt den Wert 1.82. Das entspricht etwa 2.94% des flachen Bands und gleicht damit in etwa der berechneten Wahrscheinlichkeit von 2.5%.

4.2.5 Unordnung im J_1 - J_2 - J_3 – Modell

Im J_1 - J_2 - J_3 – Modell tragen nicht nur die Prozesse zwischen nächsten Nachbarn (J_1), sondern auch die zwischen den übernächsten (J_2) und überübernächsten (J_3) Nachbarn bei (siehe Abbildung 4.10).

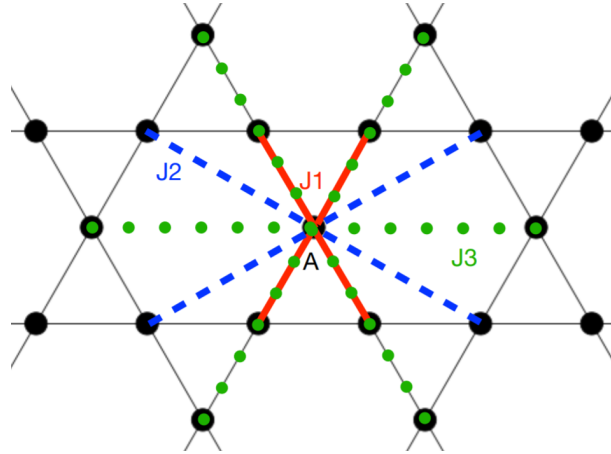


Abbildung 4.10: Mögliche Wechselwirkungen im J_1 - J_2 - J_3 – Modell [10].

Betrachtet man alle J_2 -Bindungen separat erhält man drei Kagomegitter mit $\sqrt{3}$ mal der Kantenlänge des Kagome. Sieht man sich jedoch alle J_3 -Bindungen an, erhält man drei Dreiecksgitter mit der doppelten Kantenlänge verglichen mit dem zugrundeliegenden Kagomegitter. Genauer ist dieses Modell in der Bachelorarbeit von L. Heunisch beschrieben und untersucht [10]. Die Berechnung des dynamischen Strukturfaktors erfolgt mithilfe der selben Methode, die oben für den Nächstnachbar-Fall beschrieben wurde. Der einzige Unterschied besteht darin, dass noch mehr Wechselwirkungsamplituden in die Matrix des endlichen Systems eingetragen werden müssen und diese unterschiedlich mit den Bindungsstärken J_1 , J_2 und J_3 gewichtet sein können. Die Zuweisung der Matrixelemente in diesem Modell wurde von L. Heunisch entwickelt.

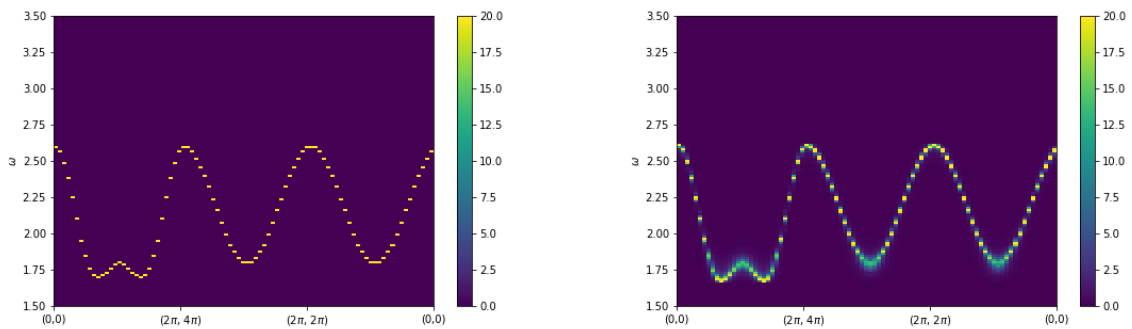


Abbildung 4.11: Dynamischer Strukturfaktor mit $J_1 = J_2 = 0$, $J_3 = 0.1$. Links: ohne Unordnung, Rechts: Unordnung mit $\sigma/\mu = 0.2$.

Indem man nur die J_3 -Kopplung aktiviert und $J_1 = J_2 = 0$ setzt, kann man den dynamischen Strukturfaktor für ein Dreiecksgitter untersuchen (siehe Abbildung 4.11). Hier sieht man, dass die Bänder im Vergleich zum Kagome (siehe Abbildung 4.5) viel weniger verbreitert werden. Das heißt der Effekt der Unordnung ist hier viel kleiner. Dies stimmt mit dem Ergebnissen von [12] überein.

Interessant ist auch, was passiert, wenn man das J_1 -Kagome leicht mit der J_3 -Kopplung stört (siehe Abbildung 4.12). Die zusätzliche J_3 -Kopplung macht das flache Band dispersiv. Das führt dazu, dass die Zustände kontinuierlicher verteilt werden und somit die Zustandsdichte nicht mehr divergiert. Wie in Kapitel 4.2.3 diskutiert ist nach Fermis Goldener Regel die Wahrscheinlichkeit durch eine Störung in einen anderen Zustand überzugehen proportional zur Zustandsdichte. Der Effekt der Unordnung wird also kleiner wie man in Abbildung 4.12 sehen kann.

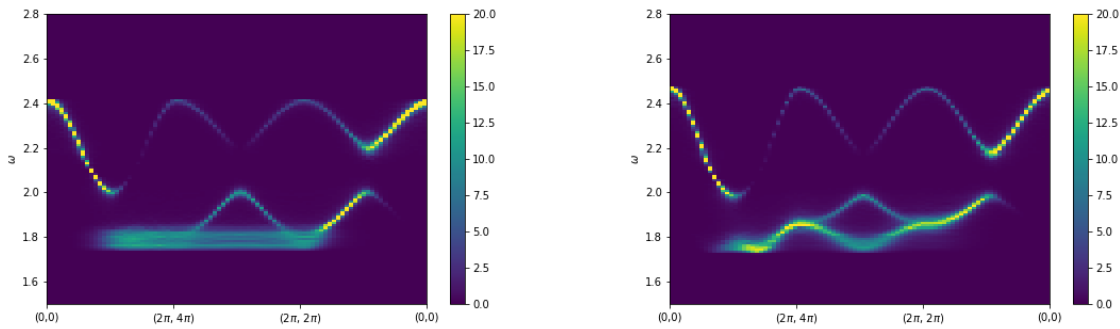


Abbildung 4.12: Dynamischer Strukturfaktor mit Unordnung ($\sigma/\mu = 0.2$). Links: $J_1 = 0.1$, $J_2 = J_3 = 0$, Rechts: $J_1 = 0.1$, $J_2 = 0$, $J_3 = 0.01$.

5 Unordnung mit Greenschen Funktionen

Eine weitere Methode Unordnung zu betrachten ist mithilfe von Greenschen Funktionen. Zunächst soll eine allgemeine Einführung zu Greenschen Funktionen gegeben werden, die auf [19] und [20] beruht. In Kapitel 5.1.1 und 5.1.2 wird dann näher auf die gemittelte Greensche Funktion, die Selbstenergie und den Zusammenhang zum dynamischen Strukturfaktor eingegangen [21] [22] [23].

5.1 Einführung zu Greenschen Funktionen

Greensche Funktionen sind meist aus der Elektrodynamik bekannt, wo sie häufig zur Lösung der Poisson-Gleichung verwendet werden. Im Allgemeinen nutzt man die Methode der Greenschen Funktionen um lineare, inhomogene Differentialgleichungen der Form

$$\hat{D}y = f(r, t) \quad (5.1)$$

zu lösen. Ein allgemeiner Operator \hat{D} wirkt hier auf eine Funktion y . Die Eigenschaft, durch welche die Greensche Funktion definiert ist, ist folgende:

$$\hat{D}G(r, r', t, t') = \delta(t - t')\delta(r - r'). \quad (5.2)$$

Damit erhält man als allgemeine Lösung für die Differentialgleichung

$$y(r, t) = y_0(r, t) + \int dr' \int dt' G(r, r', t, t') f(r', t'), \quad (5.3)$$

wobei $y_0(r, t)$ der homogenen Lösung der Differentialgleichung entspricht.

Bei quantenmechanischen Rechnungen ist der Ausgangspunkt die inhomogene Schrödingergleichung für einen allgemeinen Hamiltonian.

$$(i\partial_t - H)\Psi(r, t) = f(r, t) \quad (5.4)$$

Die Greensche Funktion ist analog durch

$$(i\partial_t - H)G(r, r', t, t') = \delta(t - t')\delta(r - r') \quad (5.5)$$

definiert. Für $t \lesssim t'$ muss man zwischen der retardierten Greenschen Funktion G^+ und der avancierten Greenschen Funktion G^- unterscheiden. Allgemein beschreibt die Greensche

Funktion die räumliche und zeitliche Entwicklung ausgehend von einem Zustand (r', t') zu einem Endzustand (r, t) . Die Unterscheidung ist folgende:

$$G^+(r, r', t, t') = 0 \text{ für } t - t' < 0, \quad (5.6)$$

$$G^-(r, r', t, t') = 0 \text{ für } t - t' > 0. \quad (5.7)$$

Die retardierte Greensche Funktion ist also ein Propagator in positive Zeitrichtung, die avancierte Greensche Funktion in Negative.

Führt man eine Fouriertransformation in den Frequenzraum durch, ist $G^\pm(\omega)$ durch

$$G^\pm(\omega) = (\omega - H \pm i0^+)^{-1} \quad (5.8)$$

gegeben. Der kleine mathematische Unterschied zwischen $G^+(\omega)$ und $G^-(\omega)$ kommt daher, dass man bei der Fouriertransformation der Greenschen Funktionen über die komplexe Ebene integriert und den Residuensatz anwendet. Für $t - t' > 0$ integriert man dabei unterhalb, für $t - t' < 0$ oberhalb der reellen Achse. Dabei ergibt sich folgender Zusammenhang zum Zeitentwicklungsoperator:

$$G^+(t) = -i\Theta(t)\hat{U}(t), \quad (5.9)$$

$$G^-(t) = i\Theta(-t)\hat{U}(t), \quad (5.10)$$

$$\rightarrow \hat{U}(t) = i(G^+(t) - G^-(t)). \quad (5.11)$$

Hier sieht man auch, inwiefern es sich bei der Greenschen Funktion um einen Propagator handelt. Ausführlicher sind die Herleitung und die Anwendungsgebiete von Greenschen Funktionen in [19] und [20] beschrieben.

5.1.1 Störungstheorie und gemittelte Greensche Funktion

Eine Anwendung, die für diese Arbeit relevant ist, ist die Entwicklung einer Störungstheorie. Dazu betrachtet man einen Hamiltonian H_0 , dessen Greensche Funktion G_0^+ einfach bestimmt werden kann, und fügt eine Störung V hinzu.

$$H = H_0 + V \quad (5.12)$$

$$G_0^+(\omega) = (\omega - H_0 + i0^+)^{-1} \quad (5.13)$$

Eine Entwicklung der Greenschen Funktion liefert die Born'sche Reihe:

$$G^+(\omega) = G_0^+(\omega) + G_0^+(\omega)V G_0^+(\omega) + G_0^+(\omega)V G_0^+(\omega)V G_0^+(\omega) + \dots \quad (5.14)$$

In unserem Fall identifiziert man die Störung V durch die Unordnung im System. H_0 ist hier der gemittelte Hamiltonian, der wieder dem Hamiltonian ohne Unordnung (in erster Ordnung) aus Kapitel 3.1 entspricht

$$H = \langle H \rangle + V. \quad (5.15)$$

Ziel ist es nun die gemittelte retardierte Greensche Funktion $G_{\text{av}}^+(k, \omega)$ störungstheoretisch zu bestimmen. Dazu definiert man die Selbstenergie $\Sigma(k, \omega)$ aus der Entwicklung der gemittelten Greenschen Funktion, wobei $G_0^+(k, \omega)$ wieder die Greensche Funktion zum ungestörten Hamiltonian $\langle H \rangle$ ist.

$$G_{\text{av}}^+(k, \omega) = G_0^+(k, \omega) + G_0^+(k, \omega)\Sigma(k, \omega)G_{\text{av}}^+(k, \omega) \quad (5.16)$$

In niedrigster Ordnung Störungstheorie hat die Selbstenergie dann die Form

$$\Sigma(k, \omega) = \langle VG_0^+V \rangle. \quad (5.17)$$

Drückt man G_0^+ wieder durch die Born'sche Reihe aus, erhält man in führender Ordnung in V

$$\Sigma(k, \omega) = \langle VG_{\text{av}}^+V \rangle. \quad (5.18)$$

G^+ kann analog zu Gleichung 5.8 durch den gemittelten Hamiltonian und Σ als Störung ausgedrückt werden:

$$G_{\text{av}}^+(k, \omega) = (\omega - \langle H \rangle - \Sigma(k, \omega) + i0^+)^{-1}. \quad (5.19)$$

Setzt man diese Beziehung in den Ausdruck für die Selbstenergie ein, erhält man eine selbst-konsistente Gleichung für Σ :

$$\Sigma(k, \omega) = \langle V(\omega - \langle H \rangle - \Sigma(k, \omega) + i0^+)^{-1}V \rangle. \quad (5.20)$$

Nach der Bestimmung von Σ kann man die Greensche Funktion $G_{\text{av}}^+(\omega)$ bestimmen und daraus wieder Größen wie den dynamischen Strukturfaktor. Zu beachten ist hier: Σ und G_{av}^+ sind genauso wie $\langle H \rangle$ 3×3 - Matrizen in derselben Basis $(b_{k,A}^\dagger, b_{k,B}^\dagger, b_{k,C}^\dagger)$, die in Abschnitt 3.1 zur Bestimmung der Dispersion genutzt wurde.

5.1.2 Zusammenhang mit dem dynamischen Strukturfaktor

Wie schon in Kapitel 3.3 beschrieben beschreibt der dynamische Strukturfaktor die räumliche und zeitliche Korrelation zwischen den Spin-Flip-Observablen. In Kapitel 3.3 wurde ausgenutzt, dass die Verteilung in ω durch die Berechnung der Dispersion schon bekannt war. Allgemein ist der dynamische Strukturfaktor jedoch durch die Fouriertransformation der Korrelationsfunktion über den Ort und die Zeit gegeben:

$$S_{\text{dyn}}(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{i\omega(t-t')} \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}_i, \vec{r}_j} e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \langle 0, \lambda | \sigma_{(\vec{r}_i, t)}^x \sigma_{(\vec{r}_j, t')}^x | 0, \lambda \rangle. \quad (5.21)$$

Durch Umformung und mit dem Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t - t')$ erhält man:

$$S_{\text{dyn}}(k, \omega) = \frac{2}{2\pi N} \Re \left[\int dt \theta(t - t') e^{i\omega(t-t')} \sum_{\vec{r}_i, \vec{r}_j} e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \langle 0, \lambda | \sigma_{(\vec{r}_i, 0)}^x \hat{U}(t - t') \sigma_{(\vec{r}_j, 0)}^x | 0, \lambda \rangle \right]. \quad (5.22)$$

Setzt man die Beziehung 5.9 zwischen Zeitentwicklungsoperator und der Greenschen Funktion ein, kann man die Fouriertransformation in ω ausführen:

$$S_{\text{dyn}}(k, \omega) = \frac{1}{\pi N} \Re \left[\sum_{\vec{r}_i, \vec{r}_j} e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \langle 0, \lambda | \sigma_{(\vec{r}_i, 0)}^x (-iG^+(\omega)) \sigma_{(\vec{r}_j, 0)}^x | 0, \lambda \rangle \right]. \quad (5.23)$$

Stellt man die Observable wieder in der Impuls-Basis dar, kann man die Gleichung vereinfachen zu:

$$S_{\text{dyn}}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \left[\langle 0, \lambda | \sigma_k^x G^+(k, \omega) \sigma_k^x | 0, \lambda \rangle \right]. \quad (5.24)$$

Für die folgende Rechnung bedeutet das, dass mit der Bestimmung von $G_{\text{av}}^+(k, \omega)$ nur noch von beiden Seiten die in Kapitel 3.3 bestimmte Observable $O_{\text{dyn}}^{(0)}$ angewendet werden muss, um wieder den dynamischen Strukturfaktor zu erhalten. Nun soll zunächst die Selbstenergie und dann die gestörte Greensche Funktion bestimmt werden.

5.2 Rechnung

Zur Berechnung der Selbstenergie muss also folgendes Integral gelöst werden:

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega, k) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk' \langle V(k, k') G^+(k', \omega) V(k', k) \rangle_{\text{av}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dk'_1 \int_0^{2\pi} dk'_2 \langle \langle k | V | k' \rangle \langle k' | G_{\text{av}}^+(\omega) | k' \rangle \langle k' | V | k \rangle \rangle_{\text{av}}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Dieses Integral kann zunächst in neun Integrale für jede Komponente der Matrix Σ aufgeteilt werden. So ist der Eintrag Σ_{AA} zum Beispiel gegeben durch:

$$\begin{aligned} \Sigma_{AA} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dk'_1 \int_0^{2\pi} dk'_2 \langle \langle k_A | V | k'_B \rangle \langle k'_B | G_{\text{av}}^+ | k'_B \rangle \langle k'_B | V | k_A \rangle \rangle_{\text{av}} \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dk'_1 \int_0^{2\pi} dk'_2 \langle \langle k_A | V | k'_C \rangle \langle k'_C | G_{\text{av}}^+ | k'_C \rangle \langle k'_C | V | k_A \rangle \rangle_{\text{av}}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Da die Selbstenergie translationsinvariant im Ortsraum ist und nur lokal auf nächste Nachbarn wirkt, ist ihre Impulsabhängigkeit bereits bekannt. Es genügt deshalb Σ für $k = 0$ zu bestimmen. Die drei Faktoren in den Integralen können vertauscht werden, sodass man $\langle \langle k | V | k' \rangle \langle k' | V | k \rangle \rangle_{\text{av}} = \langle |V(k, k')|^2 \rangle_{\text{av}}$ und $\langle k' | G_{\text{av}}^+(\omega) | k' \rangle$ einzeln berechnen kann.

5.2.1 Berechnung von $\langle |V(k, k')|^2 \rangle$

Zur Berechnung von $\langle |V(k, k')|^2 \rangle_{\text{av}}$ transformiert man den Ausdruck zurück in den Ortsraum und bringt ihn in Verbindung mit der Varianz der Störung. Man betrachte zuerst die **Diagonalterme**:

$$\langle \langle k_A | V | k'_B \rangle \langle k'_B | V | k_A \rangle \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{N^4} \sum_{x_1 x_2 x_3 x_4} \exp(i(k_A x_1 - k'_B x_2 + k'_B x_3 - k_A x_4)) \cdot Q_1 \quad (5.27)$$

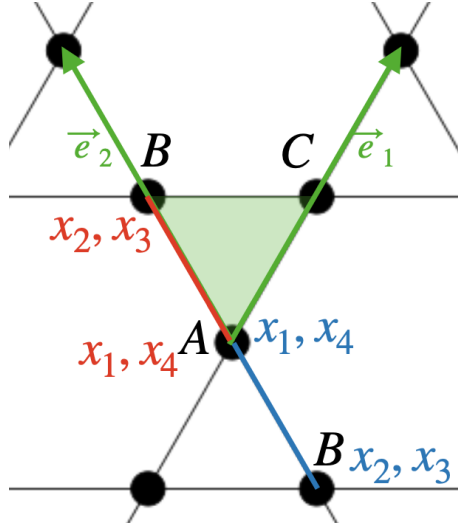


Abbildung 5.1: Prozess innerhalb einer Einheitszelle (rot) und Prozess über zwei Einheitszellen (blau).

$$Q_1 := \langle \langle x_{1,A} | V | x_{2,B} \rangle \langle x_{3,B} | V | x_{4,A} \rangle \rangle_{\text{av}}. \quad (5.28)$$

Das erste Moment der Störung, also der Mittelwert der Störung, ist null, da der gemittelte Hamiltonian genau dem ungestörten Hamiltonian entspricht. Das bedeutet für diese Rechnung, dass nur Terme beitragen, die ein zweites Moment der Störung, also die Varianz, enthalten. Somit bleiben nur die Terme übrig, bei denen die Störung zweimal auf dieselbe Bindung wirken. Wenn man diese Bedingung anwendet, erhält man für Q_1 :

$$Q_1 = \text{Var}(\lambda) \cdot \delta(x_1, x_4) \delta(x_2, x_3) \cdot (\delta(x_1, x_2) + \delta(x_2 + e_2, x_1)). \quad (5.29)$$

Bei den Diagonalelementen wirkt die Greensche Funktion nur auf einen Platz. Das heißt $x_{2,B}$ und $x_{3,B}$ müssen identisch sein. Damit die Störungen auch auf dieselbe Bindung wirken, müssen auch $x_{1,A}$ und $x_{4,A}$ identisch sein. Dann gibt es zwei Möglichkeiten für die Bindung: Entweder sie ist innerhalb einer Einheitszelle ($\delta(x_1, x_2)$) oder sie geht von einer Einheitszelle in eine Benachbarte über ($\delta(x_2 + e_2, x_1)$), siehe auch Abbildung 5.1). Setzt man die Bedingung wieder oben ein, erhält man für $\langle |V(k_A, k'_B)|^2 \rangle_{\text{av}}$:

$$\langle \langle k_A | V | k'_B \rangle \langle k'_B | V | k_A \rangle \rangle_{\text{av}} = \frac{2}{N^2} \text{Var}(\lambda). \quad (5.30)$$

Der Faktor $\frac{1}{N^2}$ ist eine Normierung aus der Summendarstellung. Wenn bei der Berechnung der Selbstenergie integriert wird, wird diese Normierung zu einem $\frac{1}{(2\pi)^2}$.

Analog kann man diese Rechnung für die anderen Diagonalelemente durchführen:

$$\begin{aligned} \langle \langle k_B | V | k'_A \rangle \langle k'_A | V | k_B \rangle \rangle_{\text{av}} &= \langle \langle k_A | V | k'_C \rangle \langle k'_C | V | k_A \rangle \rangle_{\text{av}} \\ &= \langle \langle k_C | V | k'_A \rangle \langle k'_A | V | k_C \rangle \rangle_{\text{av}} = \langle \langle k_B | V | k'_C \rangle \langle k'_C | V | k_B \rangle \rangle_{\text{av}} \\ &= \langle \langle k_C | V | k'_B \rangle \langle k'_B | V | k_C \rangle \rangle_{\text{av}} = \frac{2}{N^2} \text{Var}(\lambda). \end{aligned} \quad (5.31)$$

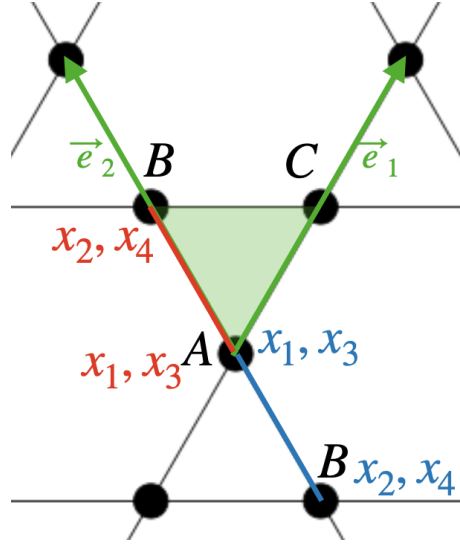


Abbildung 5.2: Prozess innerhalb einer Einheitszelle (rot) und Prozess über zwei Einheitszellen (blau).

Bei der Berechnung der **Nebendiagonalterme** von $\langle |V(k, k')|^2 \rangle_{\text{av}}$ muss man beachten, dass die Greensche Funktion nun nicht mehr auf einen Gitterpunkt wirkt, sondern auch auf zwei. Man betrachte nun folgenden Term:

$$\langle \langle k_A | V | k'_B \rangle \langle k'_A | V | k_B \rangle \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{N^4} \sum_{x_1 x_2 x_3 x_4} \exp(i(k_A x_1 - k'_B x_2 + k'_A x_3 - k_B x_4)) \cdot Q_2. \quad (5.32)$$

$$Q_2 := \langle \langle x_{1,A} | V | x_{2,B} \rangle \langle x_{3,A} | V | x_{4,B} \rangle \rangle_{\text{av}} \quad (5.33)$$

Hier gibt es wieder zwei mögliche Prozesse: Einen innerhalb der Einheitszelle und einen über zwei benachbarte Einheitszellen (siehe Abbildung 5.2). Damit ergibt sich für Q_2 :

$$Q_2 = \left[\delta(x_1, x_2) \delta(x_2, x_3) \delta(x_4, x_3) + \delta(x_1, x_2 + e_2) \delta(x_1, x_3) \delta(x_2, x_4) \right] \cdot \text{Var}(\lambda). \quad (5.34)$$

Setzt man Q_2 ein, erhält man folgendes:

$$\begin{aligned} \langle \langle k_A | V | k'_B \rangle \langle k'_A | V | k_B \rangle \rangle_{\text{av}} &= \frac{1}{N^2} \text{Var}(\lambda) \cdot \left[\exp(i(x_1(k_A - k'_B + k'_A - k_B))) \right. \\ &\quad \left. + \exp(i(x_1(k_A + k'_A) + (x_1 - e_2)(-k'_B - k_B))) \right] \\ &= \frac{1}{N^2} \text{Var}(\lambda) \cdot \left[\exp(i(x_1(k - k' + k' - k))) \right. \\ &\quad \left. + \exp(i(x_1(k + k') + (x_1 - e_2)(-k' - k))) \right] \\ &= \frac{1}{N^2} \text{Var}(\lambda) \cdot \left[1 + \exp(i(e_2(k + k'))) \right] \\ &= \frac{1}{N^2} \text{Var}(\lambda) \cdot \left[1 + \exp(i(k_2 + k'_2)) \right]. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Im Exponenten muss hier nicht zwischen k_A , k_B und k_C unterschieden werden, sondern nur noch zwischen k und k' , da Anfangs- und Endimpulszustand übereinstimmen müssen.

Analog kann man die Rechnung für die anderen Nebendiagonalterme durchführen. Man erhält:

$$\langle\langle k_A | V | k'_C \rangle \langle k'_A | V | k_C \rangle \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{N^2} \text{Var}(\lambda) \cdot \left[1 + \exp(i(k_1 + k'_1)) \right] \quad (5.36)$$

$$\langle\langle k_B | V | k'_C \rangle \langle k'_B | V | k_C \rangle \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{N^2} \text{Var}(\lambda) \cdot \left[1 + \exp(i(k_1 - k_2 + k'_1 - k'_2)) \right] \quad (5.37)$$

und:

$$\langle\langle k_B | V | k'_A \rangle \langle k'_B | V | k_A \rangle \rangle_{\text{av}} = \left(\langle\langle k_A | V | k'_B \rangle \langle k'_A | V | k_B \rangle \rangle_{\text{av}} \right)^* \quad (5.38)$$

$$\langle\langle k_C | V | k'_A \rangle \langle k'_C | V | k_A \rangle \rangle_{\text{av}} = \left(\langle\langle k_A | V | k'_C \rangle \langle k'_A | V | k_C \rangle \rangle_{\text{av}} \right)^* \quad (5.39)$$

$$\langle\langle k_C | V | k'_B \rangle \langle k'_C | V | k_B \rangle \rangle_{\text{av}} = \left(\langle\langle k_B | V | k'_C \rangle \langle k'_B | V | k_C \rangle \rangle_{\text{av}} \right)^* \quad (5.40)$$

Damit ist $\langle |V(k, k')|^2 \rangle_{\text{av}}$ komplett bestimmt.

5.2.2 Berechnung von G_{av}^+

Nun muss noch die Greensche Funktion selbst bestimmt werden. Diese nach Gleichung 5.8 folgendermaßen gegeben:

$$G_{\text{av}}^+(\omega, k') = (\omega - \langle H \rangle - \Sigma + i0^+)^{-1} := A^{-1}. \quad (5.41)$$

Zunächst soll A bestimmt werden, welches invertiert dann G_{av}^+ entspricht. $\langle H \rangle$ ist die Dispersionsmatrix in erster Ordnung und ist damit bereits aus Kapitel 3.1 bekannt:

$$\langle H \rangle = \begin{pmatrix} 2 & \lambda(1 + e^{ik'_2}) & \lambda(1 + e^{ik'_1}) \\ \lambda(1 + e^{-ik'_2}) & 2 & \lambda(1 + e^{i(k'_1 - k'_2)}) \\ \lambda(1 + e^{-ik'_1}) & \lambda(1 + e^{-i(k'_1 - k'_2)}) & 2 \end{pmatrix}. \quad (5.42)$$

Σ soll in dieser Rechnung erst bestimmt werden. Zu Beginn nimmt man beliebige komplexe Anfangswerte. Durch Integration und Einsetzen der neuen Werte für Σ sollen diese Werte dann (abhängig von ω) die selbstkonsistente Gleichung erfüllen. Wie man gleich sehen wird, werden für $k = 0$ alle Diagonalelemente und alle Nebendiagonalelemente von Σ jeweils dieselben Werte annehmen. Man benötigt also nur vier Startparameter. Außerdem wird davon ausgegangen, dass die Störung Σ überall gleich wirkt. Daraus folgt, dass Σ dieselbe Impulsabhängigkeit wie $\langle H \rangle$ hat. Die Selbstenergie verändert die Vorfaktoren von $\langle H \rangle$ folgendermaßen:

$$2 \rightarrow 2 + ia + b, \quad (5.43)$$

$$\lambda \rightarrow \lambda + ic + d. \quad (5.44)$$

Damit erhält man für A :

$$A = \begin{pmatrix} p & q(1 + e^{ik'_2}) & q(1 + e^{ik'_1}) \\ q(1 + e^{-ik'_2}) & p & q(1 + e^{i(k'_1 - k'_2)}) \\ q(1 + e^{-ik'_1}) & q(1 + e^{-i(k'_1 - k'_2)}) & p \end{pmatrix} \quad (5.45)$$

$$\text{mit: } p := \omega - 2 - ia - b \text{ und } q := -\lambda - ic - d. \quad (5.46)$$

Die Matrixelemente von G_{av}^+ erhält man aus dem Inversen der Matrix A . Für die **Diagonalelemente** gilt:

$$G_{AA}^+(k'_1, k'_2) := \langle k'_A | G_{\text{av}}^+ | k'_A \rangle = (p^2 - q^2(2 + 2 \cos(k'_1 - k'_2))) \cdot (\det(A))^{-1} \quad (5.47)$$

$$\text{mit: } \det(A) = p^3 - 4pq^2 + (2q^3 - pq^2)(2 + 2 \cos(k'_1) + 2 \cos(k'_2) + 2 \cos(k'_1 - k'_2)). \quad (5.48)$$

Die anderen beiden Elemente können durch Symmetrieoperationen bestimmt werden:

$$G_{BB}^+(k'_1, k'_2) = G_{AA}^+(k'_1 - k'_2, -k'_2), \quad (5.49)$$

$$G_{CC}^+(k'_1, k'_2) = G_{BB}^+(k'_2, k'_1). \quad (5.50)$$

Für die **Nebendiagonalelemente** gilt:

$$G_{AB}^+(k'_1, k'_2) := \langle k'_A | G^+ | k'_B \rangle = (q^2(1 + e^{-i(k'_1 - k'_2)})(1 + e^{ik'_1}) - pq(1 + e^{ik'_2})) \cdot (\det(A))^{-1}. \quad (5.51)$$

Die restlichen Elemente erhält man wieder durch die Anwendung von Symmetrieoperationen:

$$G_{AC}^+(k'_1, k'_2) = G_{AB}^+(k'_2, k'_1), \quad (5.52)$$

$$G_{BC}^+(k'_1, k'_2) = G_{AB}^+(-k'_2, k'_1 - k'_2), \quad (5.53)$$

$$G_{BA}^+(k'_1, k'_2) = G_{AB}^+(-k'_1, -k'_2), \quad (5.54)$$

$$G_{CA}^+(k'_1, k'_2) = G_{AC}^+(-k'_1, -k'_2), \quad (5.55)$$

$$G_{CB}^+(k'_1, k'_2) = G_{BC}^+(-k'_1, -k'_2). \quad (5.56)$$

5.2.3 Selbstenergie

Betrachtet man nochmal die $\langle |V(k, k')|^2 \rangle_{\text{av}}$ Terme, sieht man, dass dort für $k = 0$ dieselben Symmetrien vorhanden sind. Durch folgende Substitution erreicht man, dass alle Diagonal- und Nebendiagonal-Integrale jeweils dieselbe Form und damit denselben Wert haben:

$$dk_1^* dk_2^* = dk'_2 dk'_1, \quad (5.57)$$

$$dk_1^* dk_2^* = (-dk'_1)(-dk'_2), \quad (5.58)$$

$$dk_1^* dk_2^* = (-dk'_2)(dk'_1 - dk'_2). \quad (5.59)$$

Damit ist die Annahme, dass für $k = 0$ alle Diagonalelemente und alle Nebendiagonalelemente von Σ jeweils dieselben Werte haben, gerechtfertigt.

$$\Sigma_{AA} = \Sigma_{BB} = \Sigma_{CC} \quad (5.60)$$

$$\Sigma_{AB} = \Sigma_{BA} = \Sigma_{BC} = \Sigma_{AC} = \Sigma_{CA} = \Sigma_{CB} \quad (5.61)$$

Es genügt also ein Integral für ein Diagonalelement und ein Integral für ein Nebendiagonalelement zu lösen.

$$\Sigma_{AA} = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dk'_1 \int_0^{2\pi} dk'_2 \langle \langle k_A | V | k'_B \rangle \langle k'_B | G_{av}^+ | k'_B \rangle \langle k'_B | V | k_A \rangle \rangle_{av} \quad (5.62)$$

$$\Sigma_{BA} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dk'_1 \int_0^{2\pi} dk'_2 \langle \langle k_B | V | k'_A \rangle \langle k'_A | G_{av}^+ | k'_B \rangle \langle k'_B | V | k_A \rangle \rangle_{av} \quad (5.63)$$

Da die Integrale nicht mehr analytisch lösbar sind, wurde die Integration numerisch mit dem Programm Python durchgeführt. In einer Schleife wird so lange der neu berechnete Wert von Σ in die Integrale eingesetzt bis die Abweichung zwischen altem und neuem Wert kleiner als 10^{-6} ist. Als Ergebnis erhält man die vier Parameter a, b, c und d (jeweils abhängig von ω), welche die selbstkonsistente Gleichung lösen. Eingesetzt in $G_{av}^+(\omega, k)$ erhält man die gemittelte Greensche Funktion für das System mit Unordnung.

Wie in Kapitel 5.1.2 gezeigt genügt es nun die Observable $O_{\text{dyn}}^{(0)}$ aus Kapitel 3.3 von beiden Seiten auf die Greensche Funktion anzuwenden. Dann kann man dieses Ergebnis über einen Hochsymmetriepfad darstellen und erhält den dynamischen Strukturfaktor.

5.3 Ergebnisse

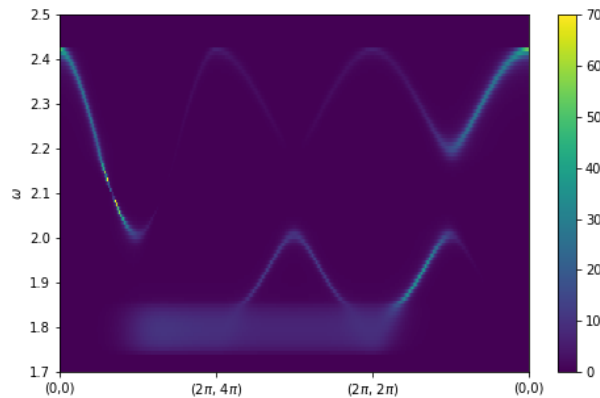


Abbildung 5.3: Dynamischer Strukturfaktor berechnet aus der Greenschen Funktion für $\lambda = 0.1$ und $\sigma = 0.02$.

Die Greensche Funktion des gestörtem Systems hängt nur vom Mittelwert $\mu = \lambda$ der Unordnungsverteilung und der Varianz σ^2 der Unordnungsverteilung ab. Es sind also im

Gegensatz zur Rechnung auf dem endlichen System keine J_A, J_B gegeben. In Abbildung 5.3 ist der dynamische Strukturfaktor aus der Rechnung mit Greenschen Funktionen dargestellt. Wieder ist vor allem das flache Band von der Unordnung betroffen, während die Effekte in den dispersiven Bändern eher klein sind.

Da die Rechnung im thermodynamischen Limes abläuft, ist sie nicht beeinflusst durch statistische Fluktuationen. Dadurch kann man zum Beispiel genau das Maximum des verbreiterten flachen Bands bestimmen. Dieses ist in Abbildung 5.4 bei festem λ in Abhängigkeit von der Standardabweichung der Unordnungsverteilung dargestellt.

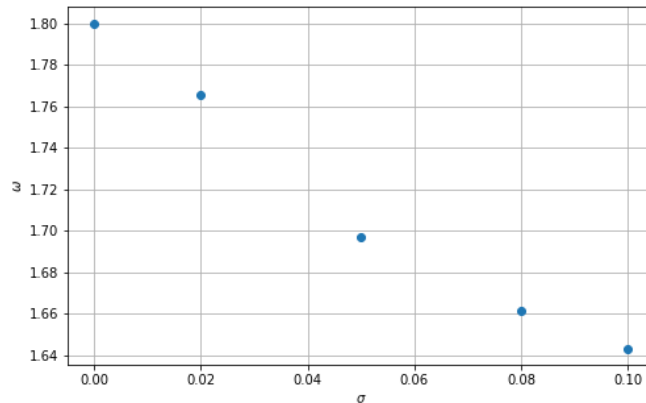


Abbildung 5.4: Maximum des flachen Bands in Abhängigkeit von σ bei $\lambda = 0.1$.

Man kann erkennen, dass die Unordnung das flache Band merklich erniedrigt und dass diese Erniedrigung stark von der Stärke der Unordnung abhängt. Scheinbar wirkt die Unordnung der geometrischen Frustration entgegen und verringert damit die Energie des flachen Bands. Fraglich ist, ob Unordnung die Energie des flachen Bands soweit erniedrigen kann, sodass die Energielücke zum Grundzustand schließt.

5.4 Vergleich: Greensche Funktionen und endliches System

Zunächst ist es bemerkenswert wie gut die Ergebnisse der beiden grundsätzlich verschiedenen Rechnungen übereinstimmen. Mit korrekter Normierung unterscheiden sich die Strukturfaktoren für kleine σ und $p = 0.5$ quasi nicht (siehe Abbildung 5.5 oder vergleiche Abbildung 4.5 mit 5.3). Es wurde also gezeigt, dass sich diese Methode sehr gut für die Untersuchung von Unordnung eignet.

Diskrepanzen treten auf, wenn man größere σ betrachtet. In Kapitel 4.2.3 wurde die Entstehung von lokalisierten Zuständen aus isolierten Clustern beschrieben. Dieses Phänomen ist in den Plots mit Greenschen Funktionen nicht mehr zu sehen (siehe Abbildung 5.6). Das liegt daran, dass keine weiteren Informationen zur Wahrscheinlichkeitsverteilung selbst in

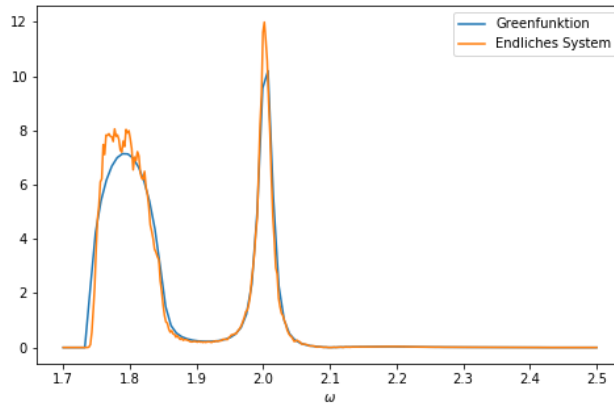


Abbildung 5.5: Schnitt durch den dynamischen Strukturfaktor bei $k_1 = \pi$, $k_2 = 2\pi$: Mit Greenscher Funktion $\lambda = 0.1$ und $\sigma = 0.2$, mit endlichem System $p = 0.5$, $J_A = 0.12$, $J_B = 0.08$.

der Rechnung enthalten sind. Auch der Effekt, der im endlichen System auftritt, wenn die Verteilung in eine Richtung kippt ($p > 0.5$), zeigt sich bei den Rechnungen mit Greenschen Funktionen aus demselben Grund nicht (siehe Abbildung 5.7).

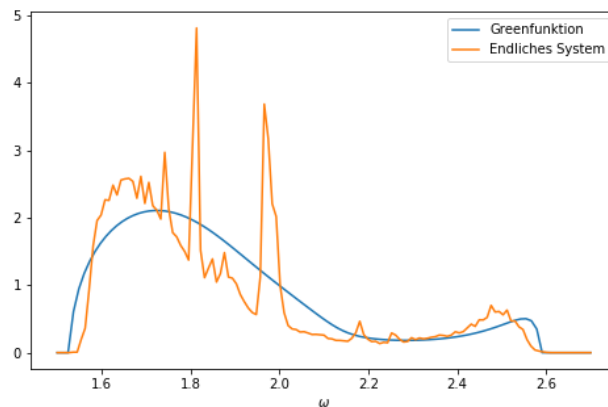


Abbildung 5.6: Schnitt durch den dynamischen Strukturfaktor bei $k_1 = \pi$, $k_2 = 2\pi$: Mit Greenscher Funktion $\lambda = 0.1$ und $\sigma = 0.8$, mit endlichem System $p = 0.5$, $J_A = 0.18$, $J_B = 0.02$.

Die Greenschen Funktionen haben aber andere Vorteile: Der wichtigste Punkt ist hier, dass die Rechnung komplett im thermodynamischen Limes stattfindet und perfekt gemittelt ist. Die Ergebnisse sind also im Gegensatz zur Simulation auf den endlichen System in keinsten Weise von der Systemgröße, der Konfiguration oder der Anzahl an Mittelungen abhängig. Das bringt weitere Vorteile mit sich: Möchte man bestimmte Größen, auch in Hinblick auf einen möglichen Phasenübergang, in nicht perturbativ zugängliche Bereiche extrapolieren,

ist dies mit dieser Methode möglich. Mit der Simulation auf den endlichen System wäre dies aufgrund der statistischen Schwankungen keinesfalls erreichbar. Allein aus diesem Grund ist es für zukünftige Forschung an Unordnung wichtig zu wissen, dass sich diese Methode gut für die Untersuchung von dynamischen Größen eignet.

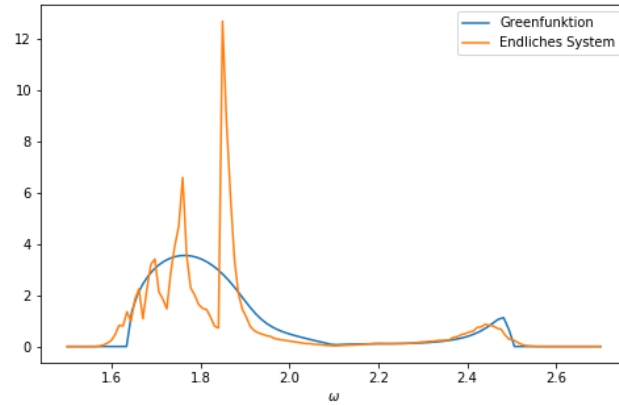


Abbildung 5.7: Schnitt durch den dynamischen Strukturfaktor bei $k_1 = \pi$, $k_2 = 2\pi$: Mit Greenscher Funktion $\lambda = 0.1$ und $\sigma = 0.5$, mit endlichem System $p = 0.8$, $J_A = 0.075$, $J_B = 0.2$.

6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das antiferromagnetische Ising-Modell im transversalen Feld auf dem Kagomegitter untersucht. Zunächst wurde die Takahashi-Störungstheorie und das Teilchenbild für Spins auf einem Gitter eingeführt. Damit wurde dann perturbativ die Einteilchen-Dispersion bis in zweite Ordnung berechnet. Die Ergebnisse stimmen überein mit [17]: Man erhält ein flaches und zwei dispersive Energiebänder. Als nächstes wurde der statische und dynamische Strukturfaktor bestimmt. Dabei fällt auf, dass der statische Strukturfaktor des Kagome dem Strukturfaktor des Dreiecksgitters trotz komplett verschiedener Bandstruktur sehr ähnlich ist. Für den dynamischen Strukturfaktor wurden die Intensitäten und die Gründe für fehlende Intensitäten auf manchen Bändern diskutiert.

Im zweiten Teil der Arbeit wurde die Auswirkung von Unordnung auf das System untersucht. Dafür eignet sich der dynamische Strukturfaktor als Größe besonders gut. Die erste Methode, mit der der dynamische Strukturfaktor untersucht wurde, war die Simulation auf endlichen Systemen. Dabei konnte man sehen, dass vor allem das flache Band von der Unordnung beeinflusst wird. Besonders interessant ist auch, dass man Hinweise auf eine Erniedrigung der Energie dieses Bands findet. Außerdem wurden lokale Effekte wie die Bildung von isolierten Clustern für große Unordnung beobachtet, sowie die Bildung von schwächeren flachen Bändern für sehr einseitige Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Auch im $J_1 - J_2 - J_3$ -Modell wurde die Auswirkung von Unordnung untersucht.

Eine ganz andere Methode wurde bei der Rechnung mit Greenschen Funktionen gewählt. Mit einem selbstkonsistenten Ansatz konnte eine Selbstenergie bestimmt werden und mithilfe der gestörten Greenschen Funktion wieder der dynamische Strukturfaktor. Da die Ergebnisse sehr gut mit denen aus dem endlichen System übereinstimmen, wurde gezeigt, dass die Rechnung mit Greenschen Funktionen eine gute Methode ist Unordnung im thermodynamischen Limes zu beschreiben. In Bereichen mit großer Unordnung oder stark einseitiger Wahrscheinlichkeitsverteilung stößt die Methode aber an ihre Grenzen. Trotzdem fällt auch hier auf, dass die Energielücke zwischen Einteilchenanregung und Grundzustand durch Unordnung verringert werden kann.

Interessant wäre es nun zu untersuchen, ob durch Unordnung die Energielücke im Kagome schließen kann, es also einen Phasenübergang gibt. Eine denkbare Möglichkeit wäre der Übergang in eine Spin-Glas Phase [24].

Literaturverzeichnis

- [1] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1):253–258, Feb 1925. ISSN 0044-3328. doi: 10.1007/BF02980577. URL <https://doi.org/10.1007/BF02980577>.
- [2] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944. doi: 10.1103/PhysRev.65.117. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.65.117>.
- [3] P.G. de Gennes. Collective motions of hydrogen bonds. *Solid State Communications*, 1(6):132 – 137, 1963. ISSN 0038-1098. doi: [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(63\)90212-6](https://doi.org/10.1016/0038-1098(63)90212-6). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0038109863902126>.
- [4] Pierre Pfeuty. The one-dimensional ising model with a transverse field. *Annals of Physics*, 57(1):79 – 90, 1970. ISSN 0003-4916. doi: [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(70\)90270-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(70)90270-8). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491670902708>.
- [5] G. H. Wannier. Antiferromagnetism. the triangular ising net. *Phys. Rev.*, 79:357–364, Jul 1950. doi: 10.1103/PhysRev.79.357. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.79.357>.
- [6] Jan Koziol, Sebastian Fey, Sebastian C. Kapfer, and Kai Phillip Schmidt. Quantum criticality of the transverse-field ising model with long-range interactions on triangular-lattice cylinders. *Phys. Rev. B*, 100:144411, Oct 2019. doi: 10.1103/PhysRevB.100.144411. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.144411>.
- [7] Villain, J., Bidaux, R., Carton, J.-P., and Conte, R. Order as an effect of disorder. *J. Phys. France*, 41(11):1263–1272, 1980. doi: 10.1051/jphys:0198000410110126300. URL <https://doi.org/10.1051/jphys:0198000410110126300>.
- [8] R. Moessner and S. L. Sondhi. Ising models of quantum frustration. *Physical Review B*, 63(22), May 2001. ISSN 1095-3795. doi: 10.1103/physrevb.63.224401. URL <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.63.224401>.
- [9] M. Powalski, K. Coester, R. Moessner, and K. P. Schmidt. Disorder by disorder and flat bands in the kagome transverse field ising model. *Phys. Rev. B*, 87:054404, Feb 2013. doi: 10.1103/PhysRevB.87.054404. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.054404>.

- [10] Lukas Heunisch. Magnetische anregungen des $j_1 - j_2 - j_3$ -ising-modells mit transversalem feld auf dem kagomegitter. Bachelor's thesis, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 2020.
- [11] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109: 1492–1505, Mar 1958. doi: 10.1103/PhysRev.109.1492.
- [12] Max Hörmann and Kai Phillip Schmidt. Dynamic structure factor of heisenberg bilayer dimer phases in the presence of quenched disorder and frustration. *arXiv preprint arXiv:2004.00565*, 2020.
- [13] Simon Nathan Ernleigh Ward. *Spin ladder physics and the effect of random bond disorder*. PhD thesis, UNIVERSITY COLLEGE LONDON, 2014.
- [14] Lukas Heunisch and Calvin Krämer. Dispersion, statischer und dynamischer strukturfaktor im ising-modell mit transversalem feld auf dem kagomegitter.
- [15] Minoru Takahashi. Half-filled hubbard model at low temperature. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 10:1289, 02 2001. doi: 10.1088/0022-3719/10/8/031.
- [16] T. Matsubara and H. Matsuda. “a lattice model of liquid helium, i. *Prog. Theor. Phys* 16.6 (1956), pp. 569–582, 1956. doi: 10.1143/PTP.16.569.
- [17] Michael Powalski. Quantum paramagnetism in the kagome and triangular transverse field ising model. Master's thesis, Technische Universität Dortmund, 2012.
- [18] Stephan Humeniuk. Quantum monte carlo study of long-range transverse-field ising models on the triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 93:104412, Mar 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.93.104412. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.104412>.
- [19] Christian Harrer. Green'sche funktionen ungeordneter quantensysteme. Diplomarbeit, Universität Bayreuth, 2008.
- [20] Eric Akkermans and Gilles Montambaux. *Mesoscopic physics of electrons and photons*. Cambridge : Cambridge university press, 2007. ISBN 0521855128. URL <http://lib.ugent.be/catalog/rug01:001276755>.
- [21] Max Hörmann. Green's functions in systems with quenched disorder.
- [22] J. M. Ziman. *Models of disorder : the theoretical physics of homogeneously disordered systems / J. M. Ziman*. Cambridge University Press Cambridge [Eng.] ; New York, 1979. ISBN 0521292808 0521217849.
- [23] Eleftherios N. Economou. *Green's functions in quantum physics*. Springer, Berlin, 2006.
- [24] M Schmidt, F M Zimmer, and S G Magalhaes. Spin liquid and infinitesimal-disorder-driven cluster spin glass in the kagome lattice. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(16):165801, mar 2017. doi: 10.1088/1361-648x/aa6060.

Danksagung

Zunächst möchte ich mich bei Prof. Kai P. Schmidt für die Vergabe des spannenden Themas und die sehr gute Betreuung bedanken.

Ein großer Dank gilt Max Hörmann und Jan Koziol für ihre Geduld, die zahlreichen Treffen und das Beantworten so vieler Fragen. Auch beim Rest der Arbeitsgruppe möchte ich mich dafür bedanken, dass sie mich und die anderen Bacheloranden so freundlich willkommen geheißen haben.

Meiner Familie bin ich dankbar für die große Unterstützung meines Studiums.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit bestätige ich, dass ich diese Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Erlangen, den 11.08.2020

Calvin Krämer