

**Flussphasen des Dreiband-Modells der
Kupratsupraleiter:
Hilfsteilchen-Molekularfeldtheorie**

Diplomarbeit

von

Stefan Kremer

Dezember 2007

Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Universität Karlsruhe

Referent: Prof. Dr. P. Wölfle

Koreferent: Priv.-Doz. Dr. F. Evers

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation und Aufbau der Arbeit	5
2	Modellierung	7
2.1	Quantenphasenübergänge und Flussphasen	7
2.2	Quantenchemie und mikroskopischer Ansatz	11
2.3	Hubbard-Modell	13
3	Methoden für starke Wechselwirkungen	19
3.1	Gutzwillerprojektion	19
3.2	Slave-Boson-Formalismus	23
3.3	Molekularfeldnäherung	27
4	Flussphasen in Molekularfeldnäherung	31
4.1	Erwartungswerte des Ersatzhamiltonoperators	31
4.2	Schwache Wechselwirkungen	36
4.2.1	Zerlegung in Stromoperatoren	36
4.2.2	Zerlegung in Strom- und Hüpfmodulierungsoperatoren	46
4.3	Starke Wechselwirkungen	50
4.3.1	Herleitung der Selbstkonsistenzgleichungen	50
4.3.2	Allgemeine Eigenschaften der Selbstkonsistenzgleichungen	53
4.3.3	Analytische Behandlung der Θ_I -Phase	56
4.3.4	Betrachtung der Θ_{II} -Phase	61
4.4	Einfluss weiterer Wechselwirkungen	63
5	Zusammenfassung	73
A	Kommutatoren der unitären Transformation	75
B	Berechnung der Besetzungszahlen	81
C	Numerische Verfahren	87
	Danksagungen und Selbstständigkeitserklärung	93

Kapitel 1

Motivation und Aufbau der Arbeit

Die Entdeckung [1] der ersten Keramiken, die schon bei der Temperatur des flüssigen Stickstoffs supraleitend werden, führte zu einer weiten theoretischen wie experimentellen Diskussion über das Verständnis dieser Materialien. Auch deren technischer Erfolg von Kernspintomographen bis Beschleunigerringen sorgte dafür, dass sich ein große Zahl von Autoren mit ihnen befassten. Dabei versuchte man, die erfolgreiche Beschreibung klassischer Phasenübergänge anzuwenden. Diese wurden erstmals systematisch von Van der Waals in einer Molekularfeldnäherung für den Übergang von einer Flüssigkeit zum Gas untersucht [2]. Die Generalisierung auf andere Phasenübergänge führte zur Landautheorie, bei der ein Ordnungsparameter in der einen Phase verschwindet, während er in der anderen einen endlichen Wert annimmt. Durch diese Theorie prägten sich die Begriffe der Universalität und der spontanen Symmetriebrechung, die sowohl auf die statistische als auch auf die Teilchenphysik einen großen Einfluss ausübten. Auch konnte durch sie die Supraleitung bei niedrigen Temperaturen verstanden werden. Dabei wurde ein neuer, supraleitender Zustand mit neuen Quasiteilchen, den Cooperpaaren, in die Theorie eingeführt.

Mit der Entwicklung der quantenmechanischen Vielteilchentheorie kam die Frage auf, ob diese die Phasenübergänge beeinflusst. Dies führte zu der Theorie der Quantenphasenübergänge. Nach dieser kann das Wechselspiel zwischen zwei Grundzuständen Phasen hervorrufen, die vollkommen neue Eigenschaften haben. Am Anfang des zweiten Kapitels werden wir daher erläutern, wie Experimente einen solchen versteckten Phasenübergang plausibel machen, der für die Entstehung von Supraleitung in den Kupraten verantwortlich sein könnte. Diesem Erklärungsansatz steht die Idee eines klassischen Phasenübergangs mit dekohärenten Cooperpaaren gegenüber, die hier aber nicht verfolgt werden soll. Wir werden beschreiben, dass die Hochtemperatursupraleitung durch das Wechselspiel zwischen dem Fermiflüssigkeitsverhalten und neuartigen Phasen erklärt werden könnte, den sogenannten Flussphasen. Solche Phasen wurden erstmals von I. Affleck 1988 [3] vorgeschlagen. Diese brachen jedoch die Translationsinvarianz und wurden somit wieder verworfen. C. M. Varma [4] zeigte allerdings vor kurzem, dass auch Strommuster existieren, die die Translationsinvarianz nicht brechen. Ziel dieser Arbeit ist es, diese systematischer abzuleiten. Die folgenden Abschnitte des zweiten Kapitels widmen sich dann der Modellierung

der Hochtemperatursupraleiter. Es wird dabei, ausgehend von Strukturanalysen und Bandstrukturrechnungen, das Drei-Band-Hubbard-Modell [5] entwickelt. Dieses Modell enthält eine starke Wechselwirkung U auf den Kupferorbitalen, die zu starken Korrelationen führt.

Um diesem Korrelationsproblem gerecht zu werden, sollen im folgenden dritten Kapitel Methoden entwickelt werden, mit denen wir Einteilchen-Aussagen über Besetzungszahlen und mikroskopische Ströme treffen können. Damit wollen wir nach neuen Grundzuständen mit endlichen Strömen suchen. Dazu werden wir eine unitäre Transformation herleiten, mit der die Aufteilung des Systems in zwei Hubbardbänder möglich ist. Durch die Betrachtung des niederenergetischsten Bandes können so die großen lokalen Wechselwirkungen, die bisher eine Molekularfeldnäherung verhinderten, eliminiert werden. Die mathematischen Probleme, die sich mit der Einschränkung auf das untere Hubbardband ergeben, können dann durch die Einführung neuer Teilchen, den Hilfsfermionen und -bosonen, wesentlich vereinfacht werden. Dabei werden wir unsere Betrachtungen hauptsächlich auf die Hilfsfermionen beschränken, da die Hilfsbosonen bei den hier betrachteten Temperaturen bereits kondensiert sind. Im Abschnitt 3.3 werden wir dann eine systematische Entwicklung der Molekularfeldnäherung über das Freie-Energie-Funktional wählen und so zu einem Satz Gleichungen, den sogenannten Selbstkonsistenzgleichungen, gelangen. Deren Lösung bestimmt den thermischen Gleichgewichtszustand und legt somit Einteilchen-Eigenschaften, wie die Besetzungszahlen, die renormierten Bandbreiten und die Einteilchenniveaus fest.

Im anschließenden vierten Kapitel wenden wir zunächst die im letzten Kapitel abgeleitete Form der Molekularfeldnäherung unter der Annahme kleiner Coulomb-Abstoßung U an. Wir werden zeigen, dass die wesentliche Wechselwirkung in Operatoren zerlegt werden kann, die Ströme am Rand der Einheitszelle beschreiben und abhängig von der gewählten Zerlegung unterschiedliche Selbstkonsistenzgleichungen liefern können. Im nachfolgenden Abschnitt betrachten wir dann den Fall großer lokaler Wechselwirkungen U und erkennen, dass die dabei erhaltenen Selbstkonsistenzgleichungen eine Verallgemeinerung der kleinen Wechselwirkungen darstellen. Die dabei gefundenen möglichen Strommuster werden sowohl analytisch als auch numerisch auf ihre Existenz untersucht. Zum Abschluss wird ein Ausblick auf die Störungstheorie höherer Ordnung sowie auf eine größere Wechselwirkung zwischen den Sauerstofforbitalen gegeben.

Kapitel 2

Modellierung

2.1 Quantenphasenübergänge und Flussphasen

Das Konzept der Quantenphasenübergänge wurde 1976 von J. Hertz [6] eingeführt. Im Gegensatz zu klassischen Phasenübergängen finden diese bei verschwindender Temperatur statt. Dadurch folgen die Fluktuationen des Ordnungsparameters nicht mehr der klassischen Theorie; statt dessen wird die Quantenstatistik benötigt. Systeme, die einen Quantenphasenübergang durchlaufen, besitzen mehrere Arten von Grundzuständen mit unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften. Der Übergangspunkt zwischen zwei den Grundzuständen zugehörigen Phasen wird, analog zu klassischen Übergängen, als quantenkritischer Punkt (QCP) bezeichnet. In der Nähe dieses Punktes kann es zur quantenmechanischen Überlagerung zwischen zwei unterschiedlichen Grundzuständen kommen. Dadurch erscheinen neue Phasen, die auch weit in endliche Temperaturen hineinreichen. Die neuen Phasen machen es allerdings schwer, einen solchen QCP zu erkennen. Wir verweisen den interessierten Leser auf die weiterführende Literatur [7].

Bei den Hochtemperatursupraleitern (HTSL) deuten einige experimentelle Erkenntnisse auf eine solche Verschleierung eines QCP hin. Neben der supraleitenden, der antiferromagnetischen und der durch die Theorie der Fermiflüssigkeit beschreibbaren metallischen Phase treten hier auch weitere metallische Phasen mit ungewöhnlichen Eigenschaften auf (s. Abb. 2.1). Zwischen der supraleitenden und antiferromagnetischen Phase befindet sich ein Bereich, in dem sowohl Tunnelexperimente [8] als auch Photoemissionsspektren [9] zeigen, dass die Energielücke des Supraleiters, ausgehend von der Diagonalen der Brillouinzone (s. Abb. 2.2), geschlossen wird. Die volle Fermioberfläche wird erst bei größeren Dotierungen x (d.h. Hinzufügen bzw. Substitution von bestimmten Atomen (s. Kapitel 2.2)), wieder hergestellt. Die Energielücke, in der sich nur wenige Zustände befinden, wird Pseudogap genannt. In diesem Bereich des Phasendiagramms verhalten sich auch andere physikalische Messgrößen unerwartet: Die spezifische Wärme als Funktion der Temperatur ist bei der Temperatur T^* , dem Öffnen der Energielücke, im Gegensatz zu klassischen Phasenübergängen, differenzierbar. Ihr Peak fällt ab einer gewissen Dotierung stark ab, während

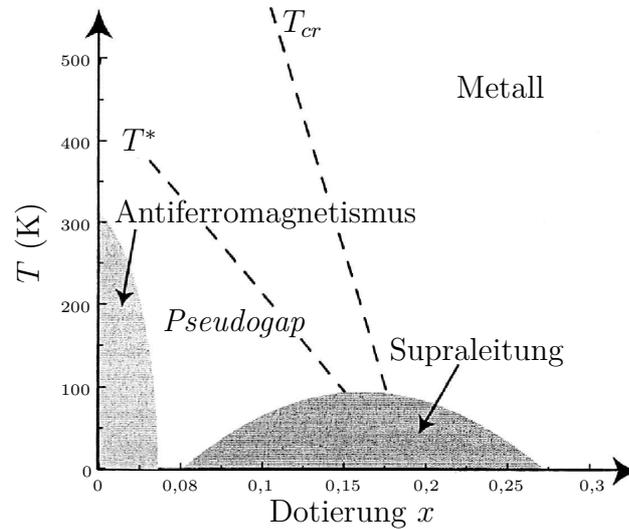


Abbildung 2.1: Das generische Phasendiagramm der Hochtemperatursupraleiter nach [10] enthält die sogenannte Pseudogapphase. In ihr verhalten sich physikalische Messgrößen ab bestimmten Temperaturen T^* und T_{cr} sonderbar. Setzt man die Abhängigkeit dieser Temperaturen von der Dotierung in die supraleitende Phase fort, so schneiden diese sich scheinbar in einem QCP.

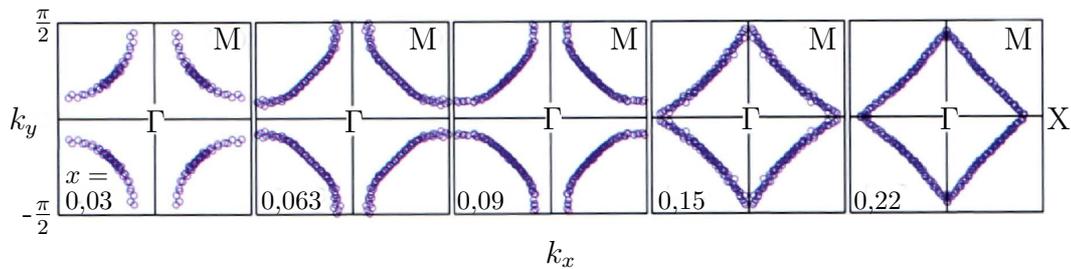


Abbildung 2.2: Erhöht man in der Pseudogapphase von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ die Dotierung x von 0,03 auf 0,22 bei $T = 20$ K, so zeigen die Messungen von X. J. Zhou [11], dass sich die Fermioberfläche schließt. Dies geschieht plötzlich, so als ob ein neuer elektronischer Zustand diese Lücke verursacht. Die Zustände mit niedriger Energie liegen in der Nähe der Zonenmitte und bilden die Fermibögen. Nähert man sich der Sprungtemperatur an, so verkleinern sich diese. Dies ist in dem Übergang von $x = 0,03$ zu $x = 0,09$ zu sehen. Der Wellenvektor wird in reziproken Einheiten des Kupfer-Sauerstoffabstands gemessen. Zur Erklärung der Punkte Γ , M , X vgl. Abb. 4.1.

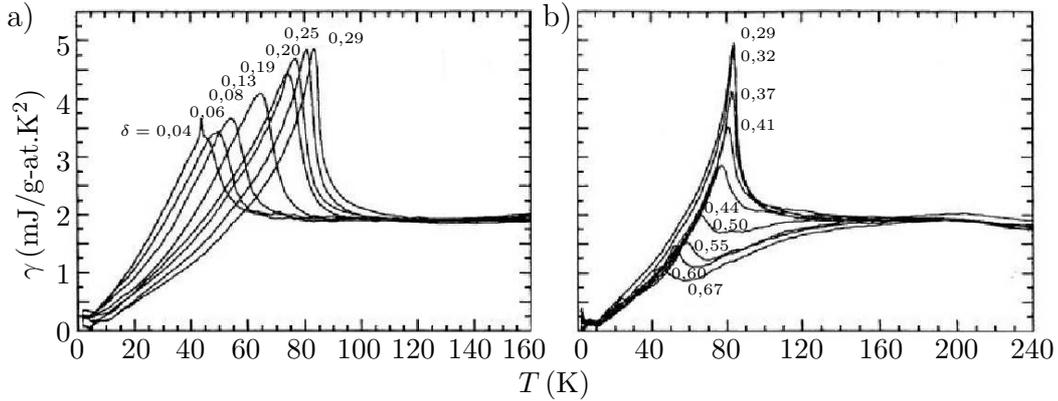


Abbildung 2.3: Temperaturabhängigkeit der elektronischen spezifischen Wärme $C_v^{el} = \gamma T$ von $\text{Y}_{0,8}\text{Ca}_{0,2}\text{Ba}_2\text{O}_{7-\delta}$ im a) überdotierten und b) unterdotierten Bereich. Die Abnahme des Peaks im unterdotierten Regime entspricht nach [12] einem Entropieverlust.

die Sprungtemperatur keine nennenswerten Änderungen erfährt (s. Abb. 2.3). Der daraus folgende plötzliche Entropieverlust deutet auf einen neuen nicht supraleitenden Grundzustand hin. Auch steigt die Spinrelaxationsrate ab einer bestimmten Temperatur T^* stärker als gewöhnlich an (s. Abb. 2.4). Die uniforme magnetische Suszeptibilität besitzt abhängig von der Dotierung ein Maximum (s. Abb. 2.5) bei der Temperatur T_{cr} . Durch die Fortsetzung der Abhängigkeit dieser Temperaturen von der Dotierung in die supraleitende Phase hinein (s. Abb. 2.1) treffen sich scheinbar beide Kurven bei verschwindender Temperatur - dem vermuteten kritischen Punkt [10]. Weitere Hinweise auf einen QCP ergeben sich, wenn durch ein starkes magnetisches Feld oder durch zunehmende Verunreinigung die supraleitende Phase unterdrückt wird. Es kommt dann zu einem Metall-Isolator-Übergang, bei dem ein beobachtbarer kritischer Punkt auftritt (s. Abb. 2.6).

Aus der negativen Steigung der magnetischen Suszeptibilität kann man auf einen Verlust magnetischer Freiheit schließen. Diesen Verlust assoziierte Varma [4] mit der Entstehung von magnetischen Momenten, die durch Ringströme innerhalb der Einheitszelle hervorgerufen werden. Dies soll die zweite stabile Phase sein, die für einen QCP nötig wäre. Die magnetischen Momente führen, zusammen mit der zweifachen Entartung des Grundzustands, auf das Askin-Teller-Modell. Aus diesem kann eine spezifische Wärme abgeleitet werden [16], die, in Übereinstimmung mit dem Experiment, eine glatte Funktion der Temperatur ist. Auch die Korrelationsfunktionen stimmen mit den von der phänomenologischen marginalen Fermiflüssigkeitstheorie [17] vorhergesagten überein. Fauqué konnte diese Theorie experimentell erhärten, indem er eine translationsinvariante magnetische Ordnung innerhalb der Einheitszelle nachwies, die durch ein Strommuster erzeugt werden könnte [18].

Ziel dieser Arbeit ist nun herauszufinden, ob solche Flussphasen aus dem für stark korrelierte Elektronen üblichem Hubbard-Modell folgen. Dazu werden auf den nächsten Seiten der mikroskopische Ansatz sowie dieses Modell erläutert.

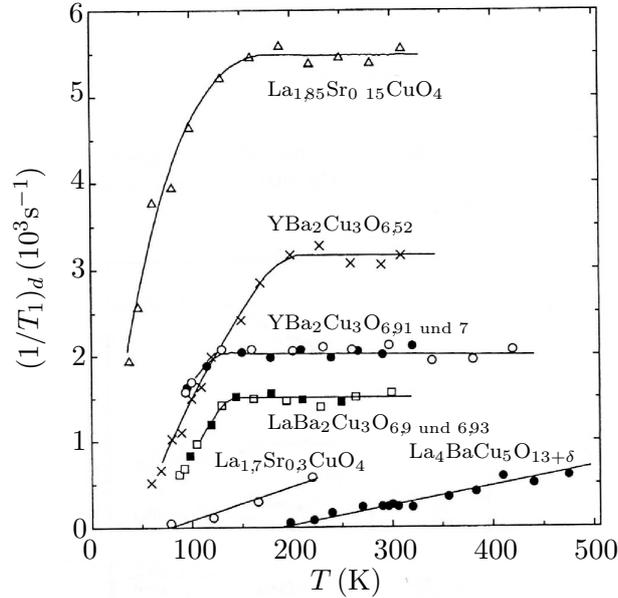


Abbildung 2.4: Die Spinrelaxationsrate der Leitungselektronen nach Abzug des üblichen hyperbolischen Anteils (Korringarelaxation) nach [13] zeigt ab einer Temperatur T^* eine deutliche Temperaturabhängigkeit. Die Verschiebung der Kurven entlang der Ordinate kommt aus der Dynamik der lokalisierten d-Elektronenspins der Kupferatome.

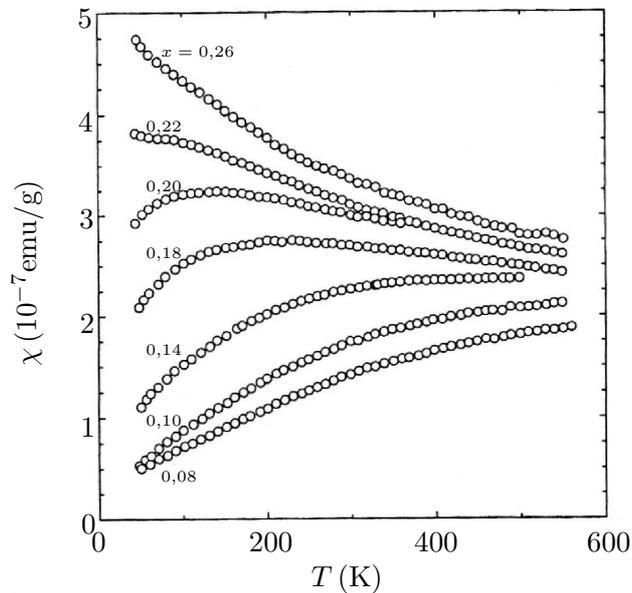


Abbildung 2.5: Die magnetische Suszeptibilität von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ nach [14] als Funktion der Temperatur entwickelt ab einer Dotierung x von etwa 0,15 ein Maximum an der Stelle T_{cr} . Die dadurch vorhandene negative Steigung der Kurve lässt auf einen Verlust an magnetischer Freiheit schließen.

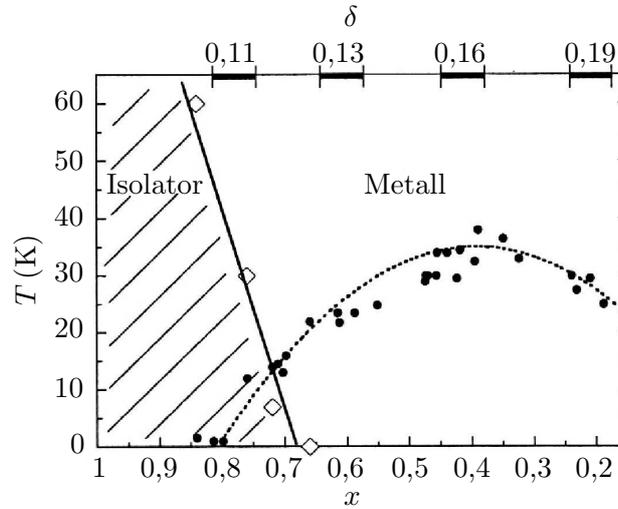


Abbildung 2.6: Das Phasendiagramm von $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ (gefüllte Kreise: Sprungtemperatur) ändert sich beim Anlegen eines gepulsten magnetischen Feldes von 60 T (Rauten: Metall-Isolator-Übergang) nach [15]. Der Schnittpunkt der Übergangsgeraden mit der Abszisse markiert den QCP.

2.2 Quantenchemie und mikroskopischer Ansatz

Die HTSL können in zwei große Klassen eingeteilt werden: Die erste besteht aus einer Zusammensetzung, die La_2CuO_4 ähnelt. Die zweite hingegen kann von $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ abgeleitet werden. Beide Klassen sind Abkömmlinge der Perowskitstruktur, bei denen jeweils die Verbindung der ursprünglichen Oktaeder gestört wird (s. Abb. 2.7).

Die charakteristischen Strukturelemente, die jeder Kupratsupraleiter enthält, sind die Kupferoxidebenen. Dies wird durch die starke Richtungsabhängigkeit des elektrischen Widerstands [19] sowie durch Neutronenstreuexperimente bestätigt [20]. Beide Klassen sind allerdings im undotierten Zustand Isolatoren. Erst durch die Substitution von Lanthan durch ein Erdalkali bzw. der Einlagerung von Sauerstoff in die Kupferoxidketten des $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ entstehen Löcher, die p-artige Orbitale in den Ebenen besetzen und Ladungstransport ermöglichen [21].

Die elektronische Struktur in den Ebenen wird hauptsächlich von dem $d_{x^2-y^2}$ -Orbital des Kupfers und je einem p-Orbital des Sauerstoffs bestimmt (s. Abb. 2.8). Die fünffache Entartung der d-Orbitale des Kupfers wird, wie beim Perowskit, durch das kubische Kristallfeld aufgehoben. Bei den HTSL ist nun auch die Symmetrie in z -Richtung verzerrt, was zu einer weiteren Separierung in $x^2 - y^2$, $3z^2 - y^2$, xy , xz , yz Zustände führt (oktaedrisches Kristallfeld / Jahn-Teller-Effekt). Das $d_{x^2-y^2}$ -Orbital (im folgenden d) ist dadurch das energetisch höchste und zur Hälfte besetzt. Beim Sauerstoff bewirkt schon das kubische Kristallfeld die Aufhebung der Entartung. Da die Energien des Kupferorbitals und der Sauerstofforbitale eng benachbart liegen, kommt es zu einer starken Hybridisierung. Die

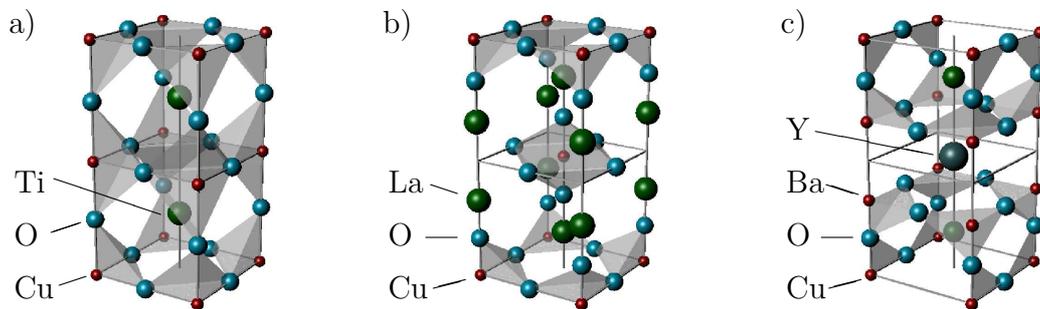


Abbildung 2.7: Die Struktur der beiden HTSL-Klassen La_2CuO_4 (b) und $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (c) lässt sich von der des Perowskits (a) ableiten, indem die Oktaeder getrennt oder zu Pyramiden und Quadraten deformiert werden.

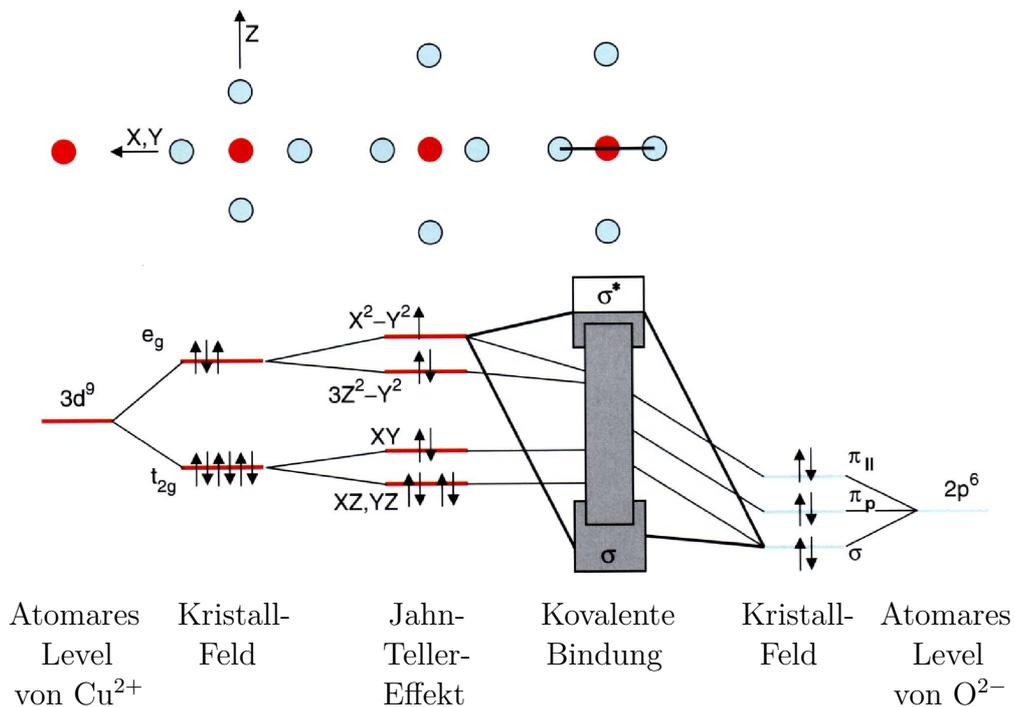


Abbildung 2.8: Der Bindungsmechanismus in der Kupferoxidebene nach [11] entsteht durch die Aufhebung der Entartung, die aus der Brechung der Kugelsymmetrie der Kupfer- (rote Kreise) und Sauerstoffatome (blaue Kreise) durch den Kristall folgt.

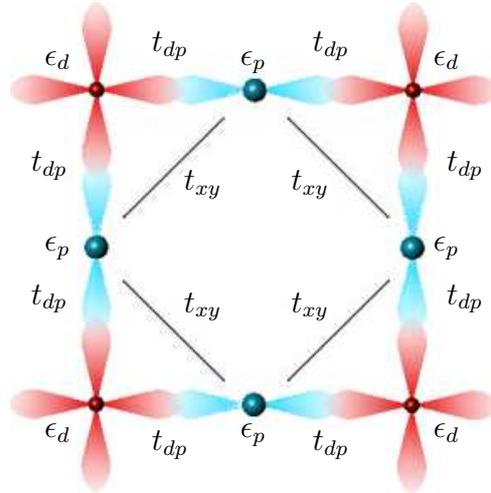


Abbildung 2.9: Die Einheitszelle der Kupferoxidebene besteht aus den d-Orbitalen des Kupfers und je einem p-Orbital des Sauerstoffs. Zusätzlich sind die Energie- und Hüpffparameter des theoretischen Modells (2.7) angegeben.

Bindung entsteht, da das durch diese Hybridisierung entstandene antibindende Orbital nur halb besetzt ist. Dieses Modell wird auch durch Bandstrukturechnungen unterstützt [22]. Um den kinetischen Teil zu beschreiben, bietet sich also ein zweidimensionales Gitter mit drei Bändern im Lochbild an (s. Abb. 2.9).

An der 2^+ -Valenz des Kupfers ändert sich durch die Dotierung nichts. Aus Neutronenstreuexperimenten lässt sich schließen, dass auch außerhalb des antiferromagnetischen Zustands starke magnetische Korrelationen in den Ebenen vorhanden sind [21]. Beides weist auf ein stark korreliertes Elektronensystem hin, bei dem aufgrund der starken Coulomb-Wechselwirkung die Elektronen versuchen, sich gegenseitig zu meiden und somit starke Korrelationen zwischen ihnen auftreten. Die Kopplung zwischen den Ebenen können also vernachlässigt werden und wir gelangen so zu einem zweidimensionalen Modell stark korrelierter Elektronen.

2.3 Hubbard-Modell

Das Ein-Band-Hubbard-Modell wurde 1963 von J. Hubbard eingeführt [23], um die Eigenschaften korrelierter fermionischer Systeme mit schmalen Bandbreiten zu beschreiben. Vernachlässigt man die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Gitter, so gelangt man zu einem rein elektronischen Hamiltonoperator. Dieser besteht in zweiter Quantisierung aus einem kinetischen Term und einem Teil, der durch die Coulomb-Wechselwirkung V bestimmt wird:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\mathbf{ij}\sigma} t_{\mathbf{ij}} c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{ij}\mathbf{i}'\mathbf{j}'\sigma\sigma'} \langle \mathbf{ij} | V | \mathbf{i}'\mathbf{j}' \rangle c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{j}'\sigma'} c_{\mathbf{i}'\sigma} \quad (2.1)$$

Die Operatoren $c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger$ bzw. $c_{\mathbf{i}\sigma}$ erzeugen oder vernichten ein Elektron mit Spin σ in der Einheitszelle am Ort \mathbf{i} (entsprechend \mathbf{j} , \mathbf{i}' , \mathbf{j}'). Sie erfüllen die fermionischen Antivertauschungsrelationen

$$\left[c_{\mathbf{i}\sigma}, c_{\mathbf{j}\sigma'}^\dagger \right]_+ = \delta_{\mathbf{ij}} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (2.2)$$

Wir betrachten im Folgenden nur Hüpfprozesse, die zwischen den nächsten Nachbarn stattfinden können (Tight-Binding-Modell). Das Hüpfen auf den selben Gitterplatz entspricht der Energie der Fermionen, so dass

$$t_{\mathbf{ij}} = -\epsilon \delta_{\mathbf{ij}} + t \delta_{\mathbf{i}-\mathbf{m},\mathbf{j}}. \quad (2.3)$$

Der Index \mathbf{m} ist dabei ein Vektor, der zu den nächsten Nachbarn zeigt.

In einem System stark korrelierter Elektronen führen die Bewegungen der Fermionen zu einer Abschirmung der elektrischen Ladung. Der Hauptteil der Wechselwirkung kommt damit von den Fermionen, die auf den gleichen Gitterplätzen sitzen, so dass

$$\langle \mathbf{ij} | V | \mathbf{i}'\mathbf{j}' \rangle = U \delta_{\mathbf{ij}} \delta_{\mathbf{i}'\mathbf{j}'} \delta_{\mathbf{i}\mathbf{i}'}. \quad (2.4)$$

Aus dem Pauli-Prinzip folgt, dass die Spins der wechselwirkenden Fermionen unterschiedlich sein müssen. So gelangen wir zu dem Hubbard-Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \epsilon \sum_{\mathbf{i}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i}\sigma} - t \sum_{\mathbf{im}\sigma} c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i}\downarrow}, \quad (2.5)$$

wobei $\hat{n}_{\mathbf{i}\sigma} = c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{i}\sigma}$ den Besetzungoperator bezeichnet.

Für verschwindende Wechselwirkung ($U = 0$) ergibt sich ein reines Bandverhalten, während im atomaren Limes ($t = 0$) die Fermionen lokalisieren und somit ein Mott-Isolator vorliegt. Die Konkurrenz zwischen beiden Grenzfällen wird maßgeblich durch den Parameter U/t bestimmt, der die Stärke der Korrelationen angibt. Im atomaren Limes kann nur bei halber Bandfüllung genau ein Fermion im Grundzustand einen Gitterplatz besetzen. Damit ist ein zweiter wichtiger Parameter die Dichte n der Elektronen im System oder im großkanonischen Fall das chemische Potential μ .

Um das Hubbard-Modell auf die HTSL anzuwenden, müssen wir dieses durch einen zusätzlichen Bandindex a bzw. b auf drei Bänder erweitern. Zwar sind die Bänder auch durch die Position i der Orbitale bestimmt, für die spätere Verwendung ist es allerdings zweckmäßig diesen Index explizit mit zu führen. Aufgrund der starken Hybridisierung der Kupfer- und Sauerstofforbitale berücksichtigen wir noch das Matrixelement der Wechselwirkung zwischen den verschiedenen Orbitalen innerhalb einer Einheitszelle U_{dp} sowie U_{xy} . Da diese Wechselwirkungsprozesse nicht mehr am gleichen Ort wirken, ist hier das Pauli-Verbot nicht relevant. Der Hamiltonoperator lautet mit Hilfe der Permutationssymmetrie

zwischen x - und y -Richtung

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{ai\sigma} \epsilon_a c_{ai\sigma}^\dagger c_{ai\sigma} - \sum_{a \neq b, \mathbf{im}\sigma} t_{ab} c_{ai\sigma}^\dagger c_{b, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} \\
&+ \sum_{ai\sigma \neq \sigma'} \frac{U_a}{2} c_{ai\sigma}^\dagger c_{ai\sigma} c_{ai\sigma'}^\dagger c_{ai\sigma'} \\
&+ \sum_{a \neq b, \mathbf{im}\sigma\sigma'} \frac{U_{ab}}{2} c_{ai\sigma}^\dagger c_{ai\sigma} c_{b, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{b, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'} .
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Die Summen über die Orbitale können ausgeschrieben werden (Der Index $\ell \in \{p_x, p_y\}$ steht noch für ein Sauerstofforbital, für den auch, abhängig von der Position in der Einheitszelle, die Indizes x und y verwendet werden):

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \epsilon_d \sum_{i\sigma} c_{di\sigma}^\dagger c_{di\sigma} + \epsilon_p \sum_{i\ell\sigma} c_{i\ell\sigma}^\dagger c_{i\ell\sigma} \\
&- t_{dp} \sum_{\mathbf{im}\ell\sigma} (c_{di\sigma}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} + h.c.) - t_{xy} \sum_{\mathbf{im}\sigma, \ell \neq \ell'} c_{i\ell\sigma}^\dagger c_{\ell', \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} \\
&+ \frac{U_d}{2} \sum_{i\sigma} c_{di\sigma}^\dagger c_{di\sigma} c_{di, -\sigma}^\dagger c_{di, -\sigma} + \frac{U_p}{2} \sum_{i\ell\sigma} c_{i\ell\sigma}^\dagger c_{i\ell\sigma} c_{i\ell, -\sigma}^\dagger c_{i\ell, -\sigma} \\
&+ U_{dp} \sum_{\ell \mathbf{im}\sigma\sigma'} c_{di\sigma}^\dagger c_{di\sigma} c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'} + U_{xy} \sum_{\mathbf{im}\sigma\sigma'} c_{xi\sigma}^\dagger c_{xi\sigma} c_{y, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{y, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Die lokale Coulomb-Wechselwirkung zwischen doppelt besetzten Sauerstoff- oder Kupferplätzen wurden dabei durch U_d bzw. U_p beschrieben. Damit eine gleichbleibende Valenz des Kupfers möglich ist, müssen an die Parameter folgende Forderungen gestellt werden:

$$U_d \gg t_{dp}, \quad U_d > \varepsilon, \quad \varepsilon > t_{dp} \tag{2.8}$$

Dabei gibt $\varepsilon = \epsilon_p - \epsilon_d$ den Bandabstand an. Das halb gefüllte antibindende Orbital entspricht damit einem Loch beim d-Orbital des Kupfers. Durch weitere Dotierung wird die Anzahl der Löcher im System auf insgesamt $1 + \delta$ in der Einheitszelle erhöht. Den Energie-Nullpunkt setzen wir auf die Energie des Kupferorbitals und beziehen anschließend das chemische Potential mit ein (s. Abb. 2.10). Damit folgt für die Diagonalelemente:

$$\epsilon_d = -\mu \tag{2.9}$$

$$\epsilon_p = -\mu + \varepsilon \tag{2.10}$$

Die Berechnung der Parameter kann auf zwei Arten erfolgen: Zum einen kann man die experimentellen Daten der Photoemission mit denen der direkten Diagonalisierung auf kleinen Clustern vergleichen [24]. Zum anderen ermöglicht die Gegenüberstellung von Dichtefunktionalansätzen mit Bandstrukturberechnungen solche Aussagen [25]. Die Literaturwerte

$$\begin{array}{l} \text{p} \text{ --- } \uparrow\downarrow \text{ --- } U_p + 2\varepsilon - 2\mu \\ \text{d} \text{ --- } \uparrow\downarrow \text{ --- } U_d - 2\mu \end{array}$$

$$\begin{array}{l} \text{p} \text{ --- } \uparrow \text{ --- } \varepsilon - \mu \\ \text{d} \text{ --- } \uparrow \text{ --- } -\mu \end{array}$$

Abbildung 2.10: Das qualitative Niveauschema im Fall vernachlässigbarer Hüpfprozesse t_{ab} und verschwindenden Wechselwirkungen U_{ab} zwischen nächsten Nachbarn ist geprägt von einer großen Energielücke zwischen einfach und doppelt besetzten Zuständen. Die rechte Energieskala entsteht, indem man den Energienullpunkt auf das niedrigste Niveau legt ($\varepsilon_d = 0$) und anschließend die Nebenbedingung der Teilchenzahl einbezieht.

sind allerdings nicht einheitlich:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= 1,5 - 3,6 \text{ eV} \\ t_{dp} &= 1,07 - 1,6 \text{ eV} \\ t_{xy} &= 0,53 - 0,65 \text{ eV} \\ U_d &= 8,5 - 10,5 \text{ eV} \\ U_p &= 4 - 7,3 \text{ eV} \\ U_{dp} &= 0,6 - 1,5 \text{ eV} \\ U_{xy} &= 0 - 1 \text{ eV} \end{aligned} \tag{2.11}$$

Das Drei-Band-Hubbard-Modell wurde erstmals von Emery vorgeschlagen [5]. Der Wechselwirkung U_{dp} zwischen den Sauerstofforbitalen und dem Kupferorbital maß er eine entscheidende Bedeutung zur Klärung der Supraleitung bei. Theoretisch interessant ist nun, dass man diese Wechselwirkung durch verschiedene physikalische Operatoren ausdrücken kann. In Kapitel 4.2 wird dargestellt, dass es möglich ist, das Produkt der Operatoren der Wechselwirkung durch die Besetzung von zwei verschiedenen Hüpfmodulierungsoperatoren, unterschieden durch den Index $n \in \{0, 1\}$,

$$K_{li}^{n\sigma\sigma'} := c_{di\sigma}^\dagger c_{\ell, i+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} + (-1)^{n+1} c_{di\sigma}^\dagger c_{\ell, i-\mathbf{e}_\ell, \sigma'} + h.c. \tag{2.12}$$

oder Stromoperatoren

$$J_{li}^{n\sigma\sigma'} := i \left(c_{di\sigma}^\dagger c_{\ell, i+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} + (-1)^{n+1} c_{di\sigma}^\dagger c_{\ell, i-\mathbf{e}_\ell, \sigma'} - h.c. \right) \tag{2.13}$$

auszudrücken. Damit ergibt sich für den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{dp-WW} &= U_{dp} \sum_{\ell \mathbf{i} \mathbf{m} \sigma \sigma'} c_{d\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{d\mathbf{i}\sigma} c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'} \\ &= 2U_{dp} \sum_{\mathbf{i}\sigma} \left(2\hat{n}_{d\mathbf{i}\sigma} + \sum_{\ell} \hat{n}_{\ell\mathbf{i}\sigma} \right) - \frac{U_{dp}}{4} \sum_{n\ell\mathbf{i}\sigma\sigma'} K_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} K_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$= 2U_{dp} \sum_{\mathbf{i}\sigma} \left(2\hat{n}_{d\mathbf{i}\sigma} + \sum_{\ell} \hat{n}_{\ell\mathbf{i}\sigma} \right) - \frac{U_{dp}}{4} \sum_{n\ell\mathbf{i}\sigma\sigma'} J_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} J_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'}. \quad (2.15)$$

Der Index n unterscheidet dabei zwischen verstärktem Hüpfen und Hüpfwellen bzw. gleich und entgegen gerichteten Strömen innerhalb einer Richtung \mathbf{e}_ℓ in der Einheitszelle (vgl. Abb. 2.11). Man kann auch die obigen Stromoperatoren für verschiedene Richtungen kombinieren und gelangt so zu Operatoren

$$\Theta_{\mathbf{i}}^{n'\sigma\sigma'} := \sum_{\ell} (-1)^{n'\ell} \left(c_{d\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} + (-1)^{\lceil n'/2 \rceil} c_{d\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{e}_\ell, \sigma'} \right), \quad (2.16)$$

die die Strommuster in Abb. 2.11 beschreiben. Da die Kombination der beiden Richtungen und der zwei unterschiedlichen Stromoperatoren insgesamt vier unterschiedliche Strommuster hervorbringt läuft der neue Index n' von 0 bis 4.

C. M. Varma [4] konnte in einer groben Näherung mit deren Hilfe zeigen, dass Flussphasen, falls diese die Selbstkonsistenzgleichungen erfüllen, eine niedrigere freie Energie haben. Auch Renormalisierungstechniken auf etwas modifizierten Modellen führen auf Flussphasen [26]. Dagegen zeigt die direkte Diagonalisierung [27] eines 5x5-Clusters des vom Hubbard-Modell abgeleiteten t-J-Modells (s. Kapitel 3.1) keine Hinweise auf die Existenz von Flussphasen. Ziel dieser Arbeit ist, das Modell in einer Molekularfeldnäherung (s. Kapitel 3.3) zu untersuchen. Da allerdings U_d groß ist, wird eine direkte Molekularfeldnäherung unzulässig sein. Wir werden daher im nächsten Kapitel Techniken beschreiben, die ermöglichen, diese zu eliminieren.

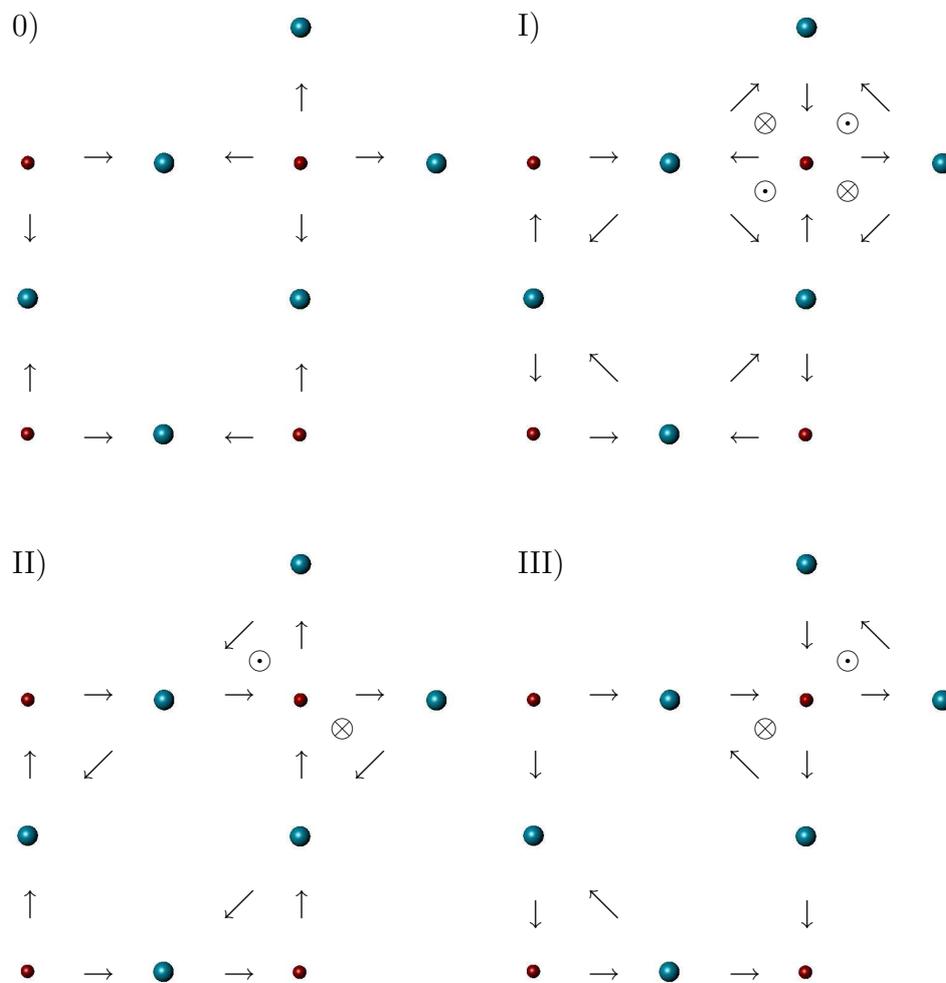


Abbildung 2.11: Die vier Strommuster in dem Fall, dass keine Nettoströme fließen, bestehen aus unterschiedlichen Stromrichtungen in der Einheitszelle (Pfeile). Die Symbole \otimes und \odot zeigen dabei die entstehenden magnetischen Flüsse an. Die Ströme von Kupfer- (kleine, rote Kugeln) auf Sauerstoffplätze (große, blaue Kugeln) in 0) und I) sind gleich gerichtet, während sie in II) und III) entgegen gerichtet sind.

Kapitel 3

Methoden für starke Wechselwirkungen

3.1 Gutzwillerprojektion

Wegen den großen Wechselwirkungen in einem stark korrelierten Elektronensystem ist eine direkte Molekularfeldnäherung nicht möglich. Da allerdings die großen Wechselwirkungen nur auf doppelt besetzte Niveaus wirken, aber diese bei schwacher Dotierung kaum besetzt sind, ist es zweckmäßig, diese Zustände herauszuprojizieren. Dies kann man sehr einfach mit dem Gutzwillerprojektionsoperator [28] bewerkstelligen. Um weitere Korrekturen zu untersuchen, schlug Kohn 1964 vor, durch eine unitäre Transformation die Ordnungen von t/U sukzessiv zu eliminieren [29]. Als niedrigste Ordnung in dieser Entwicklung erhält man wieder die Gutzwillerprojektion [30].

Der erste Schritt zur Eliminierung der Wechselwirkung auf einem Gitterplatz ist die Einführung der Hubbard-X-Operatoren [31]. Diese Transferoperatoren beschreiben den Übergang $X_{ai}^{\alpha\beta} = |ai\alpha\rangle\langle ai\beta|$ zwischen den unbesetzten $|ai0\rangle$, einfach mit Spin σ besetzten $|ai\sigma\rangle = c_{ai\sigma}^\dagger|ai0\rangle$ und doppelt besetzten Zuständen $|ai2\rangle = c_{ai\uparrow}^\dagger c_{ai\downarrow}^\dagger|ai0\rangle$ eines Orbitals. Der lokale Zustand $|ai0\rangle$ repräsentiert dabei das unbesetzte a -Orbital in der Einheitszelle am Ort i . Da der Projektor dieses Zustands in der Schreibweise der zweiten Quantisierung,

$$|ai0\rangle\langle ai0| = \left(1 - c_{ai\uparrow}^\dagger c_{ai\uparrow}\right) \left(1 - c_{ai\downarrow}^\dagger c_{ai\downarrow}\right), \quad (3.1)$$

eine gerade Anzahl von Erzeugern und Vernichtern besitzt, antivertauschen zwei Operatoren mit je einem spinartigen Index

$$\begin{aligned} \left[X_{ai}^{0\sigma}, X_{aj}^{0\sigma'}\right]_+ &= 0, & \left[X_{ai}^{2\sigma}, X_{aj}^{2\sigma'}\right]_+ &= 0, \\ \left[X_{ai}^{0\sigma}, X_{aj}^{\sigma'0}\right]_+ &= 0, & \left[X_{ai}^{2\sigma}, X_{aj}^{\sigma'2}\right]_+ &= 0, \\ \left[X_{ai}^{\sigma 0}, X_{aj}^{\sigma'0}\right]_+ &= 0, & \left[X_{ai}^{\sigma 2}, X_{aj}^{\sigma'2}\right]_+ &= 0, \\ \left[X_{ai}^{\sigma 0}, X_{aj}^{2\sigma'}\right]_+ &= 0, & \left[X_{ai}^{\sigma 2}, X_{aj}^{0\sigma'}\right]_+ &= 0, \\ \left[X_{ai}^{0\sigma}, X_{aj}^{2\sigma'}\right]_+ &= 0, & & \end{aligned} \quad (3.2)$$

während sie sonst vertauschen

$$\begin{aligned} \left[X_{ai}^{00}, X_{aj}^{\alpha\beta} \right]_- &= 0, & \left[X_{ai}^{22}, X_{aj}^{\alpha\beta} \right]_- &= 0, \\ \left[X_{ai}^{02}, X_{aj}^{\alpha\beta} \right]_- &= 0, & \left[X_{ai}^{\sigma\sigma'}, X_{aj}^{\alpha\beta} \right]_- &= 0. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Dies gilt allerdings nur für verschiedene Gitterplätze $\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$. Den Kommutator für gleiche Gitterplätze erhält man aus der lokalen Vollständigkeit

$$\mathbb{1}_{ai} = X_{ai}^{00} + \sum_{\sigma} X_{ai}^{\sigma\sigma} + X_{ai}^{22} \quad (3.4)$$

und Orthonormiertheit der Hubbard-X-Operatoren

$$X_{ai}^{\alpha\beta} X_{ai}^{\beta'\alpha'} = \delta_{\beta\beta'} X_{ai}^{\alpha\alpha'}. \quad (3.5)$$

Man erhält ihre Algebra, die durch den folgenden Kommutator gegeben ist:

$$\left[X_{ai}^{\alpha\beta}, X_{aj}^{\beta'\alpha'} \right]_{\pm} = \delta_{ij} \left(\delta_{\beta\beta'} X_{ai}^{\alpha\alpha'} \pm \delta_{\alpha\alpha'} X_{ai}^{\beta'\beta} \right) \quad (3.6)$$

Dabei gilt das obere Vorzeichen, falls beide Operatoren je einen spinartigen Index besitzen, sonst das untere Vorzeichen. Mit Hilfe der lokalen Vollständigkeitsrelation kann man die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren entwickeln. Man erhält

$$\begin{aligned} c_{ai\sigma} &= X_{ai}^{0\sigma} - \sigma X_{ai}^{-\sigma 2}, \\ c_{ai\sigma}^{\dagger} &= X_{ai}^{\sigma 0} - \sigma X_{ai}^{2-\sigma}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Mit der Umschreibung des Hamiltonoperators aus (2.6) ist eine Zerlegung in die folgenden Hubbardbänder (s. Abb. 3.1) möglich:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^h + \mathcal{H}^d + \mathcal{H}^{mix} \quad (3.8)$$

\mathcal{H}^h wirkt auf den Raum ohne Doppelbesetzungen und beschreibt somit den Transport der Löcher. Er ist gegeben durch die Energien E_a^h , dem kinetischen Anteil T_{ab}^h und dem Wechselwirkungsterm U_{ab}^h im unteren Hubbardband,

$$\mathcal{H}^h = \sum_a E_a^h + \sum_{a \neq b} T_{ab}^h + \sum_{a \neq b} U_{ab}^h \quad (3.9)$$

mit

$$\begin{aligned} E_a^h &= \epsilon_a \sum_{i\sigma} X_{ai}^{\sigma\sigma}, \\ T_{ab}^h &= -t_{ab} \sum_{i\mathbf{m}\sigma} X_{ai}^{\sigma 0} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}, \\ U_{ab}^h &= -\frac{U_{ab}}{2} \sum_{i\mathbf{m}\sigma\sigma'} X_{ai}^{\sigma\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{\sigma'\sigma'}, \end{aligned}$$

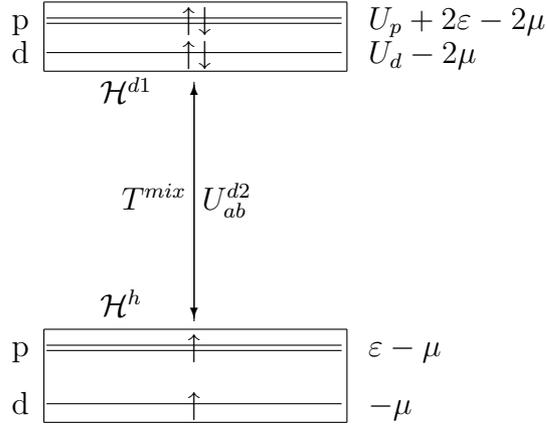


Abbildung 3.1: Das Niveauschema aus Abb. 2.8 wird in zwei Hubbardbänder zerlegt. Zwischen diesen können Löcher durch T_{ab}^{mix} hüpfen und durch U_{ab}^{d2} wechselwirken.

während \mathcal{H}^{d1} auf den dazu komplementären Raum wirkt und die Dynamik der doppelt besetzten Zustände charakterisiert. Zusammen mit der Wechselwirkung zwischen den Bändern bildet dieser den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}^d = \mathcal{H}^{d1} + \sum_{a \neq b} U_{ab}^{d2} = \sum_a E_a^d + \sum_{a \neq b} T_{ab}^d + \sum_{a \neq b} U_{ab}^d, \quad (3.10)$$

wobei analog wie im unteren Band

$$\begin{aligned} E_a^d &= (U_a + 2\varepsilon_a) \sum_{i\sigma} X_{ai}^{22}, \\ T_{ab}^d &= -t_{ab} \sum_{i\mathbf{m}\sigma} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{-\sigma 2}, \\ U_{ab}^d &= U_{ab}^{d1} + U_{ab}^{d2}, \\ U_{ab}^{d1} &= -\frac{U_{ab}}{2} \sum_{i\mathbf{m}\sigma} X_{ai}^{22} X_{b,i-\mathbf{m}}^{22}, \\ U_{ab}^{d2} &= -\frac{U_{ab}}{2} \sum_{i\mathbf{m}\sigma} (X_{ai}^{\sigma\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{22} + X_{ai}^{22} X_{b,i-\mathbf{m}}^{\sigma'\sigma'}). \end{aligned}$$

\mathcal{H}^{mix} mischt die beiden Hubbardbänder

$$\mathcal{H}^{mix} = \sum_{a \neq b} (T_{ab}^{mix} + T_{ab}^{mix\dagger}), \quad (3.11)$$

mit der Abkürzung

$$T_{ab}^{mix} = t_{ab} \sum_{i\mathbf{m}\sigma} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}.$$

Ziel ist es nun, durch eine unitäre Transformation S den Mischterm in niedrigster Ordnung zu eliminieren und somit die Dynamik des unteren Hubbardbands von den großen Wechselwirkungen, die das obere Hubbardband erzeugen, zu entkoppeln. Wir gelangen mit Hilfe der Baker-Hausdorff-Formel zu dem transformierten Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned}\bar{\mathcal{H}} &= \bar{\mathcal{H}}^h + \bar{\mathcal{H}}^d + \bar{\mathcal{H}}^{mix} \\ &= e^S \mathcal{H} e^{-S} \\ &= \mathcal{H} + [S, \mathcal{H}]_- + \frac{1}{2} [S, [S, \mathcal{H}]_-]_- + \dots\end{aligned}\quad (3.12)$$

Damit dies eine Störungsreihe in großen Wechselwirkungen U_d bzw. U_p ist, muss S von der Ordnung t/U sein. Die höheren Kommutatoren erzeugen dann die nächsten, höheren Ordnungen in der Störungsreihe, so dass die Mischung der beiden Hubbardbänder erst mit höheren Ordnungen an Gewicht gewinnt. Um durch den Mischterm auf das gleiche Band wieder einzuwirken, ist ein Übergang von einem Band auf das andere und wieder zurück notwendig. Dies ist ein Prozess zweiter Ordnung und somit verschwindet auch die erste Ordnung des transformierten Mischterms in der Störungsreihe. So besteht die Zerlegung des transformierten Hamiltonoperators in erster Ordnung aus zwei kommutierenden Energieoperatoren. Da das Energiespektrum mit Energien kleiner als die Wechselwirkungsenergien von Interesse ist, braucht nur noch $\bar{\mathcal{H}}^h$ betrachtet zu werden. Die Bedingung, dass $\bar{\mathcal{H}}^{mix}$ in niedrigster Ordnung verschwindet, lautet dann

$$[S, \mathcal{H}]_- + \mathcal{H}^{mix} = t \mathcal{O} \left(t/U \right). \quad (3.13)$$

Als Ansatz für S wählt man einen dem Störterm ähnelnden Ausdruck [32]. Wegen der oben genannten Bedingung ist allerdings die Antihermitizität von S zu beachten:

$$S = \sum_{a \neq b} s_{ab} \left(T_{ab}^{mix} - T_{ab}^{mix\dagger} \right)$$

Die Koeffizienten s_{ab} müssen dabei durch den Kommutator in (3.13) bestimmt werden. In Anhang A werden die dafür benötigten Kommutatoren berechnet. Sie lauten

$$\begin{aligned}[S, \mathcal{H}^h + \mathcal{H}^d]_- &= - \sum_{a \neq b} \left(U_a + \epsilon_a - \epsilon_b + 2U_{ab} \right) s_{ab} \left(T_{ab}^{mix} + T_{ab}^{mix\dagger} \right) \\ &\quad + \tilde{h}^h + h^d + h^{mix},\end{aligned}\quad (3.14)$$

$$[S, \mathcal{H}^{mix}]_- = 2 \sum_{a \neq b} \sum_{\mathbf{i} \mathbf{m} \sigma \sigma'} \sigma \sigma' t_{ab}^2 s_{ba} X_{ai}^{\sigma' \sigma} X_{b, \mathbf{i} - \mathbf{m}}^{-\sigma - \sigma'} + \tilde{h}^h + h^d + h^{mix}. \quad (3.15)$$

Darin beschreibt \tilde{h}^h Hüpfprozesse zu übernächsten Nachbarn im unteren und h^d Prozesse im oberen Hubbardband. Der Term h^{mix} mischt zwischen den beiden Bändern und ist mindestens von der Ordnung t/U . Dies eingesetzt in (3.13) ergibt für die Koeffizienten

$$s_{ab} = \frac{1}{U_a + \epsilon_a - \epsilon_b + 2U_{ab}}. \quad (3.16)$$

Aus der Transformationsgleichung (3.12) erhält man dann den Anteil des transformierten Hamiltonoperators im Raum ohne Doppelbesetzungen

$$\begin{aligned}
 H = \bar{\mathcal{H}}^h &= \sum_{ai\sigma} \epsilon_a X_{ai}^{\sigma\sigma} - \sum_{a \neq b} \sum_{im\sigma} t_{ab} X_{ai}^{\sigma 0} X_{b,i-m}^{0\sigma} \\
 &+ \sum_{a \neq b} \sum_{im\sigma\sigma'} \frac{U_{ab}}{2} X_{ai}^{\sigma\sigma} X_{b,i-m}^{\sigma'\sigma'} \\
 &- \sum_{a \neq b} \sum_{im\sigma\sigma'} \sigma\sigma' J_{ab} X_{ai}^{\sigma'\sigma} X_{b,i-m}^{-\sigma-\sigma'} ,
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

mit den Austauschkonstanten

$$J_{ab} = \frac{t_{ab}^2}{U_a + \epsilon_a - \epsilon_b + 2U_{ab}} , \tag{3.18}$$

den wir in den nachfolgenden Kapiteln betrachten wollen. Den Mischterm h^{mix} haben wir darin bereits vernachlässigt. Ebenso \tilde{h}^h , da dieser nur Hüpfsterme zu übernächsten Nachbarn enthält. Diese werden wir in der hier behandelten Molekularfeld-Theorie nicht betrachten (s. Kapitel 3.3).

Die neuen komplizierteren Hüpfsterme sind die ursprünglichen, projiziert mit dem Gutzwilleoperator $\mathcal{P} = \prod_{ai}(1 - \hat{n}_{ai\uparrow}\hat{n}_{ai\downarrow})$, der auf den Raum ohne Doppelbesetzungen abbildet:

$$\sum_{im\sigma} X_{ai}^{\sigma 0} X_{b,i-m}^{0\sigma} = \mathcal{P} \sum_{im\sigma} c_{ai\sigma}^\dagger c_{b,i-m,\sigma} \mathcal{P} \tag{3.19}$$

Die effektiven Wechselwirkungen führen unterdessen zu Heisenberg-Spinwechselwirkungen:

$$\sum_{im\sigma\sigma'} \sigma\sigma' X_{ai}^{\sigma'\sigma} X_{b,i-m}^{-\sigma-\sigma'} = -\frac{1}{2} \mathcal{P} \sum_{im} \left(\sigma_{ai} \sigma_{b,i-m} - \sum_{\sigma} \hat{n}_{ai\sigma} \sum_{\sigma'} \hat{n}_{b,i-m,\sigma'} \right) \mathcal{P} \tag{3.20}$$

Für $U_{dp} = 0$ erhält man das t-J-Modell. Dieses beschreibt die Konkurrenz von reinem Bandverhalten ($J = 0$) und der vollständigen Ausrichtung der Spins ($t = 0$, Heisenberg-Modell), sofern keine Frustration auftritt. Man unterscheidet dabei zwischen antiferromagnetischer ($J > 0$) und ferromagnetischer ($J < 0$) Ausrichtung.

3.2 Slave-Boson-Formalismus

Durch die Projektion des Hilbertraums auf den Raum ohne Doppelbesetzung im letzten Kapitel gingen wir von Locherzeugern/-vernichtern auf die Transferoperatoren über. Durch den Projektionsoperator erfüllen diese allerdings weder Bose- noch Fermistatistik (vgl. (3.19)). Dadurch kann das Wicktheorem nicht mehr angewendet und keine Feynmansche Störungsrechnung betrieben werden. Barnes schlug 1976 vor, den Hilbertraum wieder zu erweitern, indem man die Hubbard-X-Operatoren als Produkt von fermionischen und bosonischen Operatoren schreibt [33]. Diese Einführung von Hilfsteilchen ist

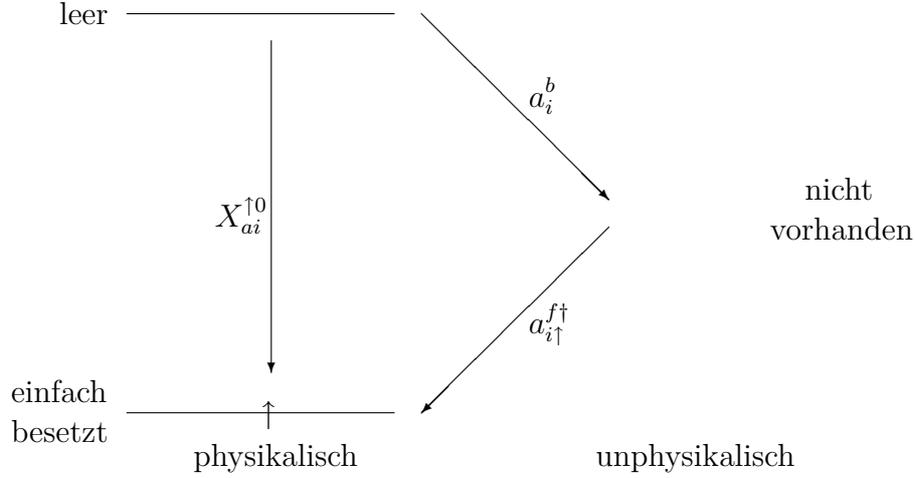


Abbildung 3.2: Die Hubbard-X-Operatoren werden durch Hilfsteilchen ausgedrückt, die auch die Anzahl der Orbitale verändern können. Dadurch entstehen unphysikalische Zustände.

allerdings nicht eindeutig. Beispielsweise führt man in der Darstellung von Kotliar und Ruckenstein zwei bosonische und zwei fermionische Hilfsteilchen ein, um den Metall-Isolator-Übergang zu studieren [34]. Dabei tragen die Hilfsbosonen einen Spin, was zur Einführung von Spinonen und Holonen führt. Da wir durch die Projektion, die wir im letzten Kapitel vornahmen, bereits keine doppelt besetzten Zustände in unserem Modell besitzen, wollen wir der Formulierung nach Coleman [35] folgen und nur ein bosonisches und zwei fermionische Hilfsteilchen pro Gitterplatz einführen. Das Fermionenduplett entsteht aus der gewohnheitsmäßigen Zuordnung des Spins zu den Fermionen. Die unbesetzten Zustände werden dabei von den Hilfsbosonen repräsentiert, während die einfach besetzten durch die Hilfsfermionen dargestellt werden. Die Besetzung eines a -Orbitals wird dann durch

$$X_{ai}^{\sigma 0} = a_{i\sigma}^{f\dagger} a_i^b \quad (3.21)$$

beschrieben (s. Abb. 3.2). Eine analoge Aufteilung gilt für das hermitesch konjugierte $X_{ai}^{0\sigma}$. Bei dieser Aufteilung kann allerdings eine komplexe Phase auf die beiden Hilfsteilchen verteilt werden. Dies entspricht dem Umeichen dieser Operatoren

$$a_{i\sigma}^f \rightarrow a_{i\sigma}^f e^{i\phi_a}, \quad a_i^b \rightarrow a_{i\sigma}^b e^{i\phi_a} \quad (3.22)$$

und soll in Kapitel 4.3.2 diskutiert werden. Aus der Kontraktion der Hubbard-X-Operatoren (3.5) erhält man nun die restlichen Operatoren in der Darstellung der Hilfsteilchen:

$$\begin{aligned} X_{ai}^{00} &= X_{ai}^{0\sigma} X_{ai}^{\sigma 0} = a_i^{b\dagger} a_{i\sigma}^f a_{i\sigma}^{f\dagger} a_i^b = \hat{n}_i^b (1 - \hat{n}_{i\sigma}^f) \\ X_{ai}^{\sigma\sigma'} &= X_{ai}^{\sigma 0} X_{ai}^{0\sigma'} = a_{i\sigma}^{f\dagger} a_i^b a_i^{b\dagger} a_{i\sigma'}^f = a_{i\sigma}^{f\dagger} a_{i\sigma'}^f (1 + \hat{n}_i^b) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Da die erste Gleichung nicht abhängig von der Wahl des eingeschobenen Spinzustands sein kann, muss der letzte Faktor im physikalischen Unterraum ein Projektor sein. Anschaulich

bedeutet diese Bedingung, dass ein Orbital entweder leer oder besetzt sein kann. Doppelte Besetzung wurde bereits im letzten Kapitel ausgeschlossen. Nach dieser Argumentation muss dann auch der Faktor in der letzten Zeile ein Projektor sein, bei dem durch die Kommutatorrelation der Bosonen das Vorzeichen anders als bei üblichen Projektoren ist: Da beim zweiten Summanden der bosonische Besetzungsoperator nur nicht verschwindet, wenn das Orbital leer ist, kann der anschließende fermionische Vernichter kein Teilchen vernichten. Man erhält somit

$$\begin{aligned} X_{ai}^{00} &= \hat{n}_i^b, \\ X_{ai}^{\sigma\sigma'} &= a_{i\sigma}^{f\dagger} a_{i\sigma'}^f. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Hubbard-X-Operatoren mit gleichen Indizes beschreiben also die Besetzung der Hilfsteilchen. Die Projektoreigenschaft der Hilfsteilchen ist auch für die algebraischen Relationen der Hubbard-X-Operatoren nötig: Während durch die Algebra der Hilfsfermionen und -bosonen

$$[a_{i\sigma}^f, a_{j\sigma'}^{f\dagger}]_+ = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (3.25)$$

$$[a_i^b, a_j^{b\dagger}]_- = \delta_{ij}, \quad (3.26)$$

die Kommutatorrelation der Hubbard-X-Operatoren (3.6) stets erfüllt ist, gilt dies nicht für die Vollständigkeitsrelation (3.4). Diese führt auf eine Zwangsbedingung

$$\mathbb{1}_{ai} = \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^{f\dagger} a_{i\sigma}^f + a_i^{b\dagger} a_i^b =: Q_{ai}, \quad (3.27)$$

der die Hilfsteilchen unterliegen und zusammen mit den möglichen Fermionenbesetzungen die projizierende Eigenschaft der Hilfsteilchen enthält, die von (3.23) auf (3.24) führte. Anschaulich ist dies das Verbot unphysikalischer Zustände (s. Abb. 3.2), die durch die Erweiterung des Hilbertraums entstanden sind. Ein Gitterplatz kann, wie bereits oben angesprochen, entweder mit einem Hilfsfermion oder mit einem Hilfsboson besetzt werden. Da die Bosonen nicht mehr frei sind, sondern der Zwangsbedingung unterliegen, wird diese Methode Slave-Boson-Formalismus genannt. Der Hamiltonoperator aus (3.17) kann nun durch die Hilfsteilchen ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{ai\sigma} \epsilon_a \hat{n}_{ai\sigma}^f - \sum_{a \neq b, \mathbf{im}\sigma} t_{ab} a_i^b b_{i-\mathbf{m}}^{b\dagger} a_{i\sigma}^{f\dagger} b_{i-\mathbf{m},\sigma}^f \\ &+ \sum_{a \neq b} \sum_{\mathbf{im}\sigma\sigma'} \frac{U_{ab}}{2} \hat{n}_{ai\sigma}^f \hat{n}_{b,i-\mathbf{m},\sigma'}^f \\ &- \sum_{a \neq b} \sum_{\mathbf{im}\sigma\sigma'} \sigma\sigma' J_{ab} a_{i\sigma}^{f\dagger} a_{i\sigma'}^f b_{i-\mathbf{m},-\sigma}^{f\dagger} b_{i-\mathbf{m},-\sigma'}^f \end{aligned} \quad (3.28)$$

Hier äußert sich die Einschränkung der Hilfsbosonen in den Hüpftermen, die zu der korrelierten Bewegung von Fermionen und Bosonen führen. Diese neue Wechselwirkung werden wir im nächsten Kapitel durch eine Molekularfeldnäherung entkoppeln.

Zunächst wollen wir noch die Einbeziehung der Zwangsbedingung an die Operatoren in unseren Formalismus diskutieren. Diese kann auf unterschiedliche Weise erfolgen. Bei halber Bandfüllung und im Heisenberg-Modell kann dies recht elegant durch die Popov-Fedotov-Methode mit einem imaginären chemischen Potential realisiert werden [36]. Da wir das Modell bei endlicher Dotierung untersuchen wollen, werden wir wie Coleman die großkanonische Gesamtheit um weitere Potentiale λ_{ai} ergänzen:

$$H \longrightarrow H + \sum_{ai} \lambda_{ai} Q_{ai} \quad (3.29)$$

Im Rahmen einer Molekularfeld-Theorie kann man nun zu unabhängigen Hilfsteilchen übergehen und die Erhaltung der Zwangsbedingung nur im thermischen Mittel fordern:

$$Q_{ai} \longrightarrow \langle Q_{ai} \rangle = \sum_{\sigma} \langle a_{i\sigma}^{f\dagger} a_{i\sigma}^f \rangle + \langle a_i^{b\dagger} a_i^b \rangle = 1 \quad (3.30)$$

Die enthaltenen Erwartungswerte müssen dabei mit einem Ersatzhamiltonoperator gebildet werden, der aus den entkoppelten Fermionen- und Bosonenanteilen besteht. Da durch die Aufweichung der Zwangsbedingung die Projektoreigenschaft der Hilfsteilchen nicht mehr streng gilt, sind dessen Erwartungswerte nicht mehr eindeutig festgelegt. Beispielsweise kann die Besetzungszahl der Fermionen mit Hilfe weiterer Übergangsoperatoren zu einer Mischung aus fermionischen und bosonischen Erwartungswerten umgeformt werden:

$$\begin{aligned} \langle X_{ai}^{\sigma\sigma} \rangle &= \langle X_{ai}^{\sigma 0} X_{ai}^{0\sigma} \rangle \\ &= \langle a_{i\sigma}^{f\dagger} a_{i\sigma}^f a_i^b a_i^{b\dagger} \rangle \\ &= \langle a_{i\sigma}^{f\dagger} a_{i\sigma}^f \rangle \left(1 + \langle a_i^{b\dagger} a_i^b \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Wir definieren daher die Erwartungswerte konsistent mit (3.30) durch

$$\begin{aligned} \langle X_{ai}^{\sigma\sigma} \rangle &= \langle a_{i\sigma}^{f\dagger} a_{i\sigma}^f \rangle = n_{i\sigma}^f, \\ \langle X_{ai}^{00} \rangle &= \langle a_i^{b\dagger} a_i^b \rangle = n_i^b, \\ \langle X_{ai}^{\sigma 0} X_{b,i-m}^{0\sigma} \rangle &= \langle a_{i\sigma}^{f\dagger} b_{i-m,\sigma}^f a_i^b b_{i-m}^{b\dagger} \rangle = n_{abmi\sigma}^f n_{bami}^b. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Dabei wurden die lokalen fermionischen und bosonischen Besetzungszahlen $n_{i\sigma}^f$, n_i^b sowie Hüpfamplituden $n_{abmi\sigma}^f$, n_{bami}^b eingeführt.

Durch den Slave-Boson-Formalismus kann also die problematische Algebra der Hubbard-X-Operatoren vereinfacht werden, allerdings zu dem Preis, dass der kinetische Anteil an Komplexität gewinnt. In ihm manifestiert sich die korrelierte Bewegung der Hilfsteilchen. Diese muss auch durch die zusätzliche Zwangsbedingung mitgeführt werden. Beide Probleme können durch eine Molekularfeldnäherung, die einer Minimierung der freien Energie entspricht, gelöst werden. Dieser Formalismus soll im nächsten Kapitel eingeführt werden. Dabei werden wir die oberen Indizes, die die Art der Hilfsteilchen verdeutlichen, der besseren Übersichtlichkeit wegen unterdrücken. Die Hilfsfermionen kann man durch den Spinindex von den Hilfsbosonen unterscheiden.

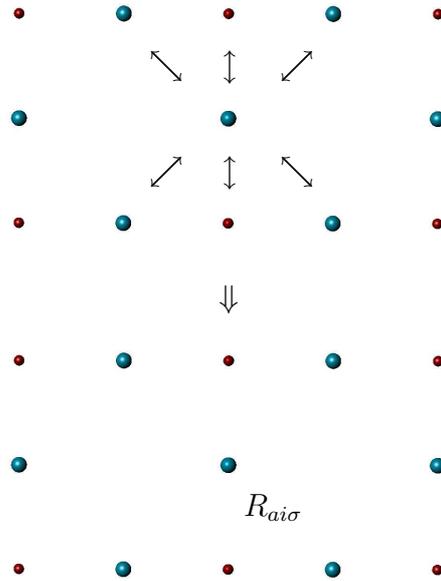


Abbildung 3.3: Die Idee der Molekularfeldtheorie besteht darin, dass die Wirkung der Wechselwirkung mit allen Nachbaratomen durch ein konfigurationsabhängiges Feld am jeweiligen Gitterplatz ersetzt wird.

3.3 Molekularfeldnäherung

Wir wollen nun ein Verfahren anwenden, durch das die Effekte der Korrelationen zwischen den Teilchen in einem Einteilchenbild beschreibbar werden. Die Idee der Molekularfeldnäherung ist, diese Wechselwirkungen als ein mittleres, lokales Feld R zu betrachten (s. Abb. 3.3). Das Fermion an einem Gitterplatz soll nur dieses Feld, jedoch keine Effekte der anderen Teilchen spüren. Die Fluktuationen der Fermionen untereinander sind also zu vernachlässigen. In Operatoranschreibweise lautet dies

$$\hat{n}_{ai\sigma} \hat{n}_{b,i-m,\sigma'} \rightarrow \hat{n}_{ai\sigma} R_{ai\sigma}, \quad (3.33)$$

$$(\hat{n}_{b,i-m,\sigma'} - R_{ai\sigma})^2 \rightarrow 0. \quad (3.34)$$

Betrachtet man das Feld als Teil eines Ersatzhamiltonoperators \tilde{H} , so ergibt sich das Problem, den bestmöglichen Ersatzhamiltonoperator zu finden. Die Anforderungen an ihn sind, dass er hermitesch ist und einfach diagonalisiert werden kann, um so die Einteilcheneigenschaften untersuchen zu können. Er enthält somit alle Paare von Operatoren, die sich durch Kontraktionen im ursprünglichen Hamiltonoperator H gewinnen lassen. Um spontane Symmetriebrechungen und damit Phasenübergänge untersuchen zu können, werden zusätzlich alle Arten von Ordnungsphänomenen wie Magnetismus (Spinanordnung), Ladungsdichtewellen (Ladungsanordnung), Supraleitung (Paarkondensation der Hilfsfermionen), Bosekondensation (Kondensation der Hilfsbosonen) oder Flussphasen mit eingebunden. Da jedoch die Wechselwirkung, wie schon am Ende von Kapitel 2.3 dargestellt

wurde, in vielfältiger Weise umgeschrieben werden kann, sind die dabei auftretenden Operatoren nicht eindeutig (s. Kapitel 4.2). Sie sollten aber gleiche physikalische Ergebnisse liefern. Um nun die besten Matrixelemente des Ersatzhamiltonoperators zu ermitteln, verwenden wir das Feynmansche Variationsverfahren [37], indem wir in dem Ausdruck der freien Energie

$$F = U - TS = \langle H \rangle_\rho - \frac{1}{\beta} \langle \ln \rho \rangle_\rho \quad (3.35)$$

den kanonischen statistischen Operator ρ durch einen Variationsansatz $\tilde{\rho}$ ersetzen:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Sp}(e^{-\beta H})} \longrightarrow \tilde{\rho} = \frac{e^{-\beta \tilde{H}}}{\text{Sp}(e^{-\beta \tilde{H}})} \quad (3.36)$$

Dieser ist durch \tilde{H} wieder von den Matrixelementen abhängig, wodurch auch die Erwartungswerte

$$\langle O \rangle_{\tilde{\rho}} = \frac{\text{Sp}(e^{-\beta \tilde{H}} O)}{\text{Sp} e^{-\beta \tilde{H}}} \quad (3.37)$$

davon abhängig werden. Das damit erhaltene Freie-Energie-Funktional

$$F \longrightarrow F[\tilde{\rho}] = \langle H - \tilde{H} \rangle_{\tilde{\rho}} - \frac{1}{\beta} \ln(\text{Sp}(e^{-\beta \tilde{H}})) \quad (3.38)$$

muss nun minimiert werden. Beziehen wir noch die abgeschwächte Form der Zwangsbedingung des Slave-Boson-Formalismus (3.30) und die Nebenbedingung der Teilchenzahl mit ein, so erhalten wir das Minimierungsproblem

$$F[\tilde{\rho}] = \langle H - \tilde{H} \rangle_{\tilde{\rho}} - \frac{1}{\beta} \ln(\text{Sp}(e^{-\beta \tilde{H}})) + \sum_{\mathbf{ai}} \lambda_{\mathbf{ai}} (\langle Q_{\mathbf{ai}} \rangle_{\tilde{\rho}} - 1) + \mu N(1 + \delta). \quad (3.39)$$

Dieses wiederum wird durch die Suche nach einem verschwindenden Gradienten

$$\frac{\partial F}{\partial x_\nu} = 0 \quad (3.40)$$

nach den Matrixelementen und Potentialen x_ν und den Vergleich der absoluten Werte von F an den Extremalstellen gelöst. Die Matrixelemente sind nach den letzten Gleichungen durch die Erwartungswerte unter dem Ersatzhamiltonoperator bestimmt.

Da die Abhängigkeit der Erwartungswerte von den Matrixelementen meist recht komplex ist, kann im Allgemeinen nur eine näherungsweise oder numerische Lösung dieser Selbstkonsistenzgleichungen angegeben werden. In den folgenden Kapiteln werden deshalb einige Vereinfachungen angenommen. Entsprechend den experimentellen Ergebnissen gehen wir weder von einer Brechung der Translationssymmetrie noch von einer Verletzung der Spinerhaltung aus. Die möglichen Flussphasen gehen durch komplexe Hüpfparameter

in unsere Betrachtung ein. Die Invarianz unter Drehungen von $\pi/2$ soll deshalb nur in die Beträge dieser Parameter eingehen. Da wir an der Pseudogapphase interessiert sind, betrachten wir auch keine Paarkondensation der Fermionen. Die globale Eichinvarianz der Fermionen soll daher nicht verletzt sein. Wir postulieren daher den Ersatzhamiltonoperator

$$\tilde{H} = \sum_{a\mathbf{i}\sigma} E_a \hat{n}_{a\mathbf{i}\sigma} + \sum_{a\mathbf{b}\mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} T_{a\mathbf{b}\mathbf{m}} a_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma} \quad (3.41)$$

mit den Energien der Hilfsfermionen E_a und den Hüpfparametern $T_{a\mathbf{b}\mathbf{m}} = T_{\mathbf{b}a,-\mathbf{m}}^*$. Durch diesen treten nur die folgenden fermionischen Erwartungswerte auf:

$$\begin{aligned} n_d &:= \langle d_{\mathbf{i}\uparrow}^\dagger d_{\mathbf{i}\uparrow} \rangle_{\tilde{\rho}} = \langle d_{\mathbf{i}\downarrow}^\dagger d_{\mathbf{i}\downarrow} \rangle_{\tilde{\rho}} && \text{unabhängig von } \mathbf{i} \\ n_p &:= \langle p_{\ell\mathbf{i}\uparrow}^\dagger p_{\ell\mathbf{i}\uparrow} \rangle_{\tilde{\rho}} = \langle p_{\ell\mathbf{i}\downarrow}^\dagger p_{\ell\mathbf{i}\downarrow} \rangle_{\tilde{\rho}} && \text{unabhängig von } \mathbf{i}, \ell \\ n_{d\ell\mathbf{m}} &= n_{dp} e^{i\alpha_{\ell\mathbf{m}}} \\ &:= \langle d_{\mathbf{i}\uparrow}^\dagger p_{\ell,\mathbf{i}-\mathbf{m},\uparrow} \rangle_{\tilde{\rho}} = \langle d_{\mathbf{i}\downarrow}^\dagger p_{\ell,\mathbf{i}-\mathbf{m},\downarrow} \rangle_{\tilde{\rho}} && \text{unabhängig von } \mathbf{i} \\ n_{xy\mathbf{m}} &= n_{xy} e^{i\alpha_{xy\mathbf{m}}} \\ &:= \langle p_{x\mathbf{i}\uparrow}^\dagger p_{y,\mathbf{i}-\mathbf{m},\uparrow} \rangle_{\tilde{\rho}} = \langle p_{x\mathbf{i}\downarrow}^\dagger p_{y,\mathbf{i}-\mathbf{m},\downarrow} \rangle_{\tilde{\rho}} && \text{unabhängig von } \mathbf{i} \end{aligned} \quad (3.42)$$

Bei den Bosonen hingegen nehmen wir an, dass diese vollständig kondensiert sind. Dies bedeutet allerdings nicht, dass Supraleitung vorliegt, da dafür beide Hilfsteilchen kondensieren müssen. In [38] wurde eine Bosekondensationstemperatur von $T \approx 1500 \text{ K} \approx 0,125 \frac{\text{eV}}{\text{k}_B}$ abgeschätzt. Diese liegt also weit oberhalb der Temperaturen, die wir hier betrachten. Wir nehmen also an, dass die Boseoperatoren durch je eine komplexe Zahl, dem sogenannten Ordnungsparameter, ersetzt werden dürfen:

$$\begin{aligned} d_{\mathbf{i}} &\rightarrow \langle d_{\mathbf{i}} \rangle_{\tilde{\rho}} = d && \text{unabhängig von } \mathbf{i} \\ p_{\ell\mathbf{i}} &\rightarrow \langle p_{\ell\mathbf{i}} \rangle_{\tilde{\rho}} = p_\ell = p e^{i\varphi_\ell} && \text{unabhängig von } \mathbf{i} \end{aligned} \quad (3.43)$$

Die freie Energie muss auch nach diesen Zahlen minimiert werden. Aus der Translations- und Invarianz der Erwartungswerte unter Drehungen von $\pi/2$ folgen die gleichen Symmetrien für die Potentiale der Hilfsbosonen,

$$\begin{aligned} \lambda_{d\mathbf{i}} &= \lambda_d && \text{unabhängig von } \mathbf{i}, \\ \lambda_{\ell\mathbf{i}} &= \lambda_\ell && \text{unabhängig von } \mathbf{i}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Ausgangspunkt unserer Betrachtung soll nun H_0 , die nullte Ordnung der Störungsreihe in t/U aus Kapitel 3.1 sein, d.h. $U_d = U_p = \infty$. Weiterhin vernachlässigen wir zunächst die Wechselwirkung U_{xy} zwischen den Sauerstofforbitalen. In den folgenden Kapiteln werden wir dann noch den Einfluss einer endlichen Sauerstoffwechselwirkung H_{O-O} und der ersten Ordnung Störungstheorie H_{1Ord} untersuchen. Bei letzterem betrachten wir wie in [27] nur den Anteil des Hüpfens zwischen nächsten Nachbarn. Der Hamiltonoperator aus (3.28) wird also wie folgt zerlegt:

$$H = H_0 + H_{O-O} + H_{1Ord} \quad (3.45)$$

mit

$$H_0 = \sum_{ai\sigma} \epsilon_a \hat{n}_{ai\sigma} - \sum_{a \neq b, \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} t_{ab} a b^* a_{i\sigma}^\dagger b_{\mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma} + U_{dp} \sum_{\ell \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma\sigma'} \hat{n}_{di\sigma} \hat{n}_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'} , \quad (3.46)$$

$$H_{O-O} = U_{xy} \sum_{\mathbf{i}\mathbf{m}\sigma, \sigma'} \hat{n}_{xi\sigma} \hat{n}_{y, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'} , \quad (3.47)$$

$$H_{1Ord} = -J_d \sum_{\ell \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma\sigma'} \sigma\sigma' d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma'}^\dagger p_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, -\sigma}^\dagger p_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, -\sigma'} - J_p \sum_{\mathbf{i}\mathbf{m}\sigma\sigma'} \sigma\sigma' p_{xi\sigma}^\dagger p_{xi\sigma'}^\dagger p_{y, \mathbf{i}-\mathbf{m}, -\sigma}^\dagger p_{y, \mathbf{i}-\mathbf{m}, -\sigma'} \quad (3.48)$$

und

$$J_d = t_{dp}^2 \left(\frac{1}{U_d - \varepsilon + 2U_{dp}} + \frac{1}{U_p + \varepsilon + 2U_{dp}} \right) , \quad (3.49)$$

$$J_p = 2 \frac{t_{xy}^2}{U_p} . \quad (3.50)$$

Durch den hermiteschen Ersatzhamiltonoperator aus (3.41)

$$\tilde{H} = \sum_{ai\sigma} E_a \hat{n}_{ai\sigma} + \sum_{ab\mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} T_{ab\mathbf{m}} a_{i\sigma}^\dagger b_{\mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma} \quad (3.51)$$

ist der Parameterraum durch

$$x = \left(\mu, E_d, E_p, \operatorname{Re} T_{d\ell\mathbf{m}}, \operatorname{Im} T_{d\ell\mathbf{m}}, \operatorname{Re} T_{xy\mathbf{m}}, \operatorname{Im} T_{xy\mathbf{m}}, \lambda_d, \lambda_\ell, d, p \right) \quad (3.52)$$

bestimmt. Die zu lösenden Selbstkonsistenzgleichungen (3.40) ergeben sich aus

$$0 = \frac{\partial}{\partial x_\nu} \left\{ \frac{1}{N} \left(\langle H - \tilde{H} \rangle_{\tilde{\rho}} + \sum_{ai} \lambda_a (\langle Q_{ai} \rangle_{\tilde{\rho}} - 1) \right) + \mu(1 + \delta) \right\} + \frac{1}{N} \left\langle \frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_\nu} \right\rangle_{\tilde{\rho}} \quad (3.53)$$

mit

$$\langle Q_{ai} \rangle = \sum_{\sigma} \langle a_{i\sigma}^{f\dagger} a_{i\sigma}^f \rangle + \langle a_i^{b\dagger} a_i^b \rangle . \quad (3.54)$$

Der Index des statistischen Operators wird der besseren Übersichtlichkeit wegen bei den nachfolgenden Rechnungen unterdrückt.

Kapitel 4

Flussphasen in Molekularfeldnäherung

4.1 Erwartungswerte für reelles Sauerstoffhüpfen

Um in den nächsten Kapiteln die Selbstkonsistenzgleichungen studieren zu können, werden die fermionischen Erwartungswerte des Hamiltonoperators aus (3.51) benötigt. Diese sollen nun für einen reellen Sauerstoffhüpfparameter hergeleitet werden. Die spätere komplexe Berechnung findet dabei in Anhang B statt. Zunächst werden die Wannierzustände in Blochwellen entwickelt

$$a_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}(2\mathbf{j}+\mathbf{r}_a)}. \quad (4.1)$$

Dabei wurde als Einheitslänge der Kupfer-Sauerstoff-Abstand gewählt. Der Vektor $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ nimmt die Werte $k_\ell = \frac{\pi}{2} \frac{n_\ell}{N}$ mit $n_\ell = -\lfloor \frac{N}{2} \rfloor \dots \lfloor \frac{N}{2} \rfloor$ und $\ell \in \{x, y\}$ an (s. Abb. 4.1) und \mathbf{r}_a bestimmt die Position des Orbitals innerhalb der Einheitszelle. Als Bravaisgitter verwenden wir das Kupfergitter, so dass $\mathbf{r}_d = \mathbf{0}$ und $\mathbf{r}_\ell = \mathbf{e}_\ell$. Der transformierte Hamiltonoperator

$$\tilde{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, p_{x\mathbf{k}\sigma}^\dagger, p_{y\mathbf{k}\sigma}^\dagger \right) \begin{pmatrix} E_d & \gamma_{x\mathbf{k}} T_{dp} & \gamma_{y\mathbf{k}} T_{dp} \\ \gamma_{x\mathbf{k}}^* T_{dp} & E_p & \gamma_{\mathbf{k}} T_{xy} \\ \gamma_{y\mathbf{k}}^* T_{dp} & \gamma_{\mathbf{k}} T_{xy} & E_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{\mathbf{k}\sigma} \\ p_{x\mathbf{k}\sigma} \\ p_{y\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

ist nun diagonal im \mathbf{k} -Raum. Dabei haben wir die in Kapitel 3.3 postulierte Symmetrie der Erwartungswerte auch auf die Parameter des Ersatzhamiltonoperators

$$T_{d\ell\mathbf{m}} = T_{dp} e^{i(\phi^0 + (-1)^\ell \phi^I + m_\ell \phi^{II} + (-1)^\ell m_\ell \phi^{III})} \quad (4.3)$$

angewandt. Die Phase des Parameters unterteilen wir in gleich- und gegenphasige Anteile bezüglich ℓ und \mathbf{m} , um die Formfaktoren

$$\gamma_{\ell\mathbf{k}} = 2 \cos \left(k_\ell + \phi^{II} + (-1)^\ell \phi^{III} \right) e^{i(\phi^0 + (-1)^\ell \phi^I)}, \quad (4.4)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = 4 \cos k_x \cos k_y \quad (4.5)$$

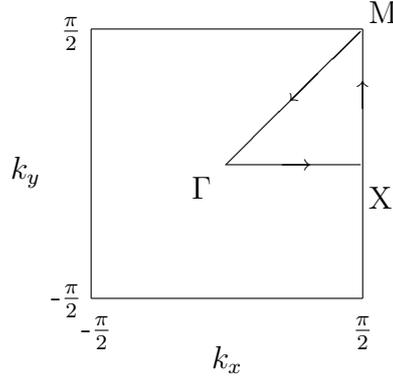


Abbildung 4.1: Der Wellenvektor \mathbf{k} kann nur Werte innerhalb der Brillouinzone annehmen. Diese ist um den Kupferplatz zentriert und hat die ausgezeichneten Punkte Γ in der Mitte, X an der Seite und M an der Ecke der Zone.

einfacher zu schreiben. Die oberen Indizes werden wir im folgenden als Θ -Phasen referenzieren. Die komplexe Phase der Formparameter ist durch die Θ_0 und die Θ_I -Phase bestimmt.

Als nächstes soll nun der Hamiltonoperator im Raum der p-Orbitale diagonalisiert werden. Dies geschieht durch die kanonische Transformation

$$p_{\ell\mathbf{k}\sigma} = 1/\sqrt{2} \left(p_{+\mathbf{k}\sigma} + (-1)^\ell p_{-\mathbf{k}\sigma} \right), \quad (4.6)$$

wobei $\ell = x$ mit 0 und $\ell = y$ entsprechend mit 1 identifiziert wurde. Der resultierende Hamiltonoperator lautet dadurch

$$\tilde{H} = \sum_{a\mathbf{k}\sigma} \xi_{a\mathbf{k}} \hat{n}_{a\mathbf{k}\sigma} + \sum_{v\mathbf{k}\sigma} \left(\tau_{v\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{v\mathbf{k}\sigma} + h.c. \right). \quad (4.7)$$

Der Index v bezeichnet darin die neuen Quantenzahlen $+$ und $-$, die äquivalent zu den x - und y -Quantenzahlen die p-Bänder indizieren. Die neuen Diagonalelemente ergeben sich zu

$$\xi_{d\mathbf{k}} = E_d, \quad (4.8)$$

$$\xi_{v\mathbf{k}} = E_p + v\gamma_{\mathbf{k}} T_{xy}. \quad (4.9)$$

Für verschwindende d-p-Hybridisierung

$$\tau_{v\mathbf{k}} = 1/\sqrt{2} T_{dp} (\gamma_{\mathbf{k}x} + v\gamma_{\mathbf{k}y}) \quad (4.10)$$

beschreiben die beiden \mathbf{k} -veränderlichen Bänder $\xi_{v\mathbf{k}}$ eine zweidimensionale Tight-Binding-Bandstruktur (s. Abb. 4.2). Bei einer endlichen Hybridisierung stoßen sich diese beiden Bänder gegen das untere Band ab, welches sich dadurch auch bezüglich \mathbf{k} ändert (s. Abb. 4.3).

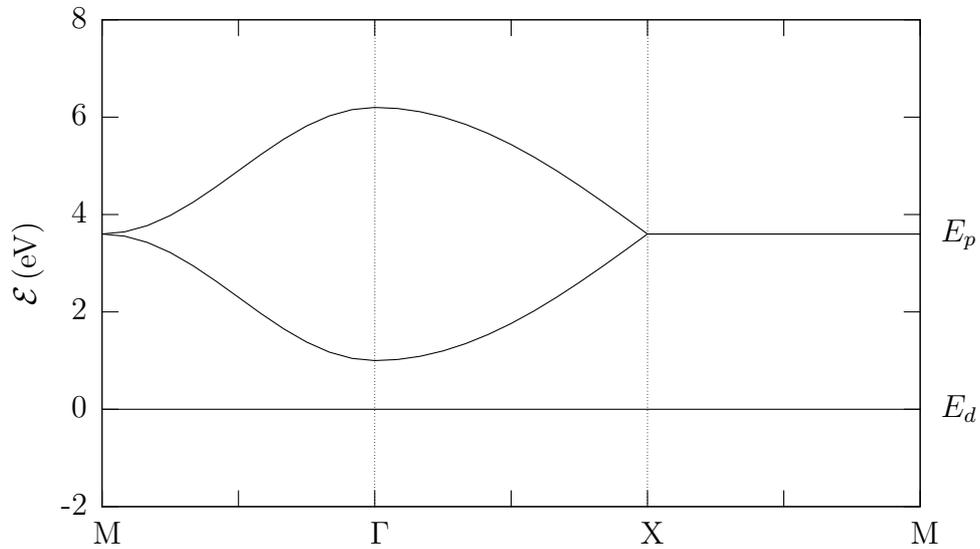


Abbildung 4.2: Die Bandstruktur der oberen beiden Bänder des Ersatzhamiltonoperators aus (4.2) zeigt für verschwindende d-p-Hybridisierung die typische Bandabstoßung in der Zonenmitte Γ und die Entartung am Zonenrand. Die Parameterwerte sind $E_d = 0 \text{ eV}$, $E_p = 3,6 \text{ eV}$, $T_{xy} = 0,65 \text{ eV}$.

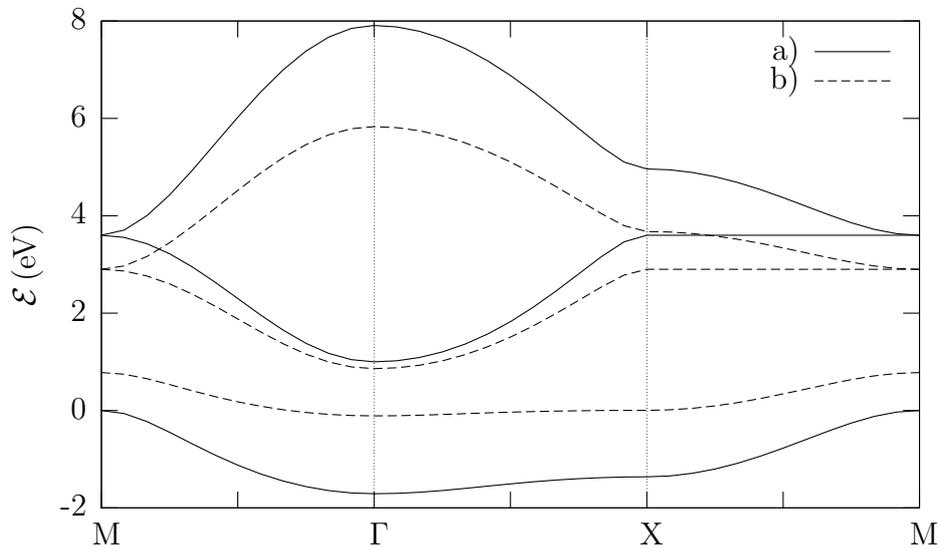


Abbildung 4.3: (a) Durch Einschalten der Hybridisierung ($T_{dp} = 1,3 \text{ eV}$) stoßen sich nun auch die beiden oberen Bänder gegen das untere ab. Dadurch wird die Entartung am Zonenrand aufgehoben. (b) Auch für realistischere Werte, wie sie später aus den Selbstkonsistenzgleichungen folgen ($E_d = 0,78 \text{ eV}$, $E_p = 2,9 \text{ eV}$, $T_{dp} = 0,75 \text{ eV}$, $T_{xy} = 0,51 \text{ eV}$), erhält man dieses Bild.

Mit Hilfe dieses vereinfachten Hamiltonoperators kann man nun die Greenschen Funktionen aus der fermionischen Bewegungsgleichung,

$$z \langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma}; b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle(z) = \langle\langle [a_{\mathbf{k}\sigma}, \tilde{H}]_-; b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle(z) + \langle [a_{\mathbf{k}\sigma}, b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ \rangle, \quad (4.11)$$

ermitteln. Dies führt auf ein vierdimensionales Gleichungssystem, welches in Anhang B gelöst wird. Durch die retardierten Greenschen Funktionen können dann die Erwartungswerte im Impulsraum durch

$$\langle b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \sum_n f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) \text{Res}_{z=\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}} \langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma}; b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle(z) \quad (4.12)$$

bestimmt werden. Durch Fouriertransformation erhält man die Erwartungswerte im Ortsraum. Mit Hilfe der Rechnung in Anhang B erhält man die folgenden Ergebnisse:

$$n_d = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{nk}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p)^2 - T_{xy}^2 \gamma_{\mathbf{k}}^2 \right) \quad (4.13)$$

$$n_p = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{nk}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \cdot \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_d)(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p) - \frac{1}{2} T_{dp}^2 (|\gamma_{\mathbf{k}x}|^2 + |\gamma_{\mathbf{k}y}|^2) \right) \quad (4.14)$$

$$n_{d\ell\mathbf{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{nk}} e^{i\mathbf{m}\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \cdot \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p) \gamma_{\ell\mathbf{k}}^* + T_{xy} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{1-\ell, \mathbf{k}}^* \right) T_{dp} \quad (4.15)$$

$$n_{xy\mathbf{m}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{nk}} e^{-i\mathbf{m}\sigma_z \mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \cdot \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_d) T_{xy} \gamma_{\mathbf{k}} + T_{dp}^2 \gamma_{x\mathbf{k}} \gamma_{y\mathbf{k}}^* \right) \quad (4.16)$$

Dabei bezeichnen $\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}$ die Anregungsenergien der Hilfsfermionen, die durch die kubische Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}^3 - (\xi_d + \xi_{+\mathbf{k}} + \xi_{-\mathbf{k}}) \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}^2 \\ &+ \left(\xi_d \xi_{+\mathbf{k}} + \xi_d \xi_{-\mathbf{k}} + \xi_{+\mathbf{k}} \xi_{-\mathbf{k}} - \sum_v |\tau_{v\mathbf{k}}|^2 \right) \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} \\ &+ \sum_v |\tau_{v\mathbf{k}}|^2 \xi_{-v, \mathbf{k}} - \xi_d \xi_{+\mathbf{k}} \xi_{-\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} &= \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}^3 - (E_d + 2E_p) \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}^2 \\ &+ \left(2E_d E_p + E_p^2 - T_{xy}^2 \gamma_{\mathbf{k}} - T_{dp}^2 (\gamma_{x\mathbf{k}} + \gamma_{y\mathbf{k}}) \right) \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} \\ &+ E_p T_{dp}^2 (\gamma_{x\mathbf{k}} + \gamma_{y\mathbf{k}}) - 2T_{xy} T_{dp}^2 \gamma_{\mathbf{k}} \text{Re} \gamma_{x\mathbf{k}} \gamma_{y\mathbf{k}}^* - E_d (E_p^2 - T_{xy}^2 \gamma_{\mathbf{k}}^2) \end{aligned} \quad (4.18)$$

gegeben sind. Die Paulimatrix σ_z wurde dabei benutzt, um die Fouriertransformation der Sauerstofforbitale darzustellen:

$$\mathbf{m}\sigma_z \mathbf{k} = m_x k_x - m_y k_y \quad (4.19)$$

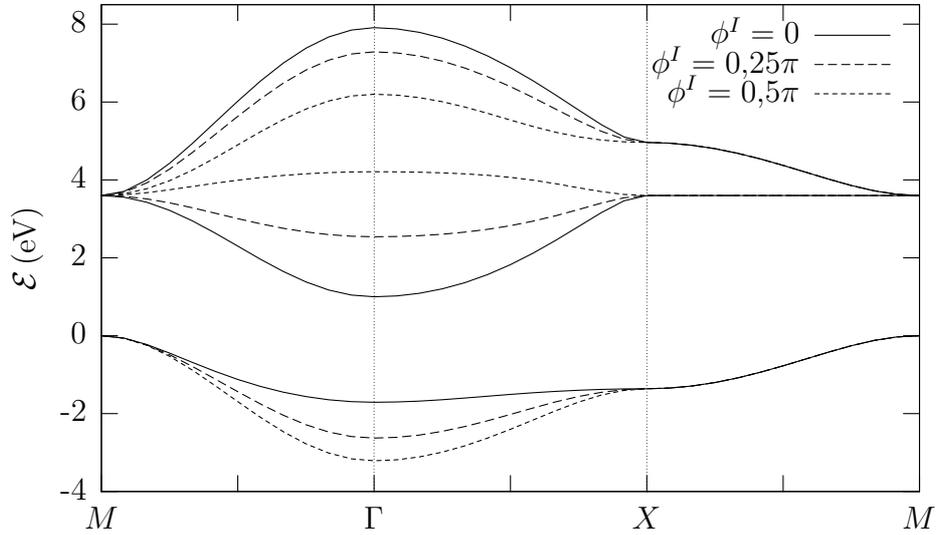


Abbildung 4.4: Im Θ_I -Fall bewirkt die Phase ϕ^I des d-p-Matrixelements in der Bandstruktur eine vertikale Verschiebung der Extrema. Für $\phi^I = 0,75\pi$ ist die Kurve identisch mit der von $\phi^I = 0,25\pi$.

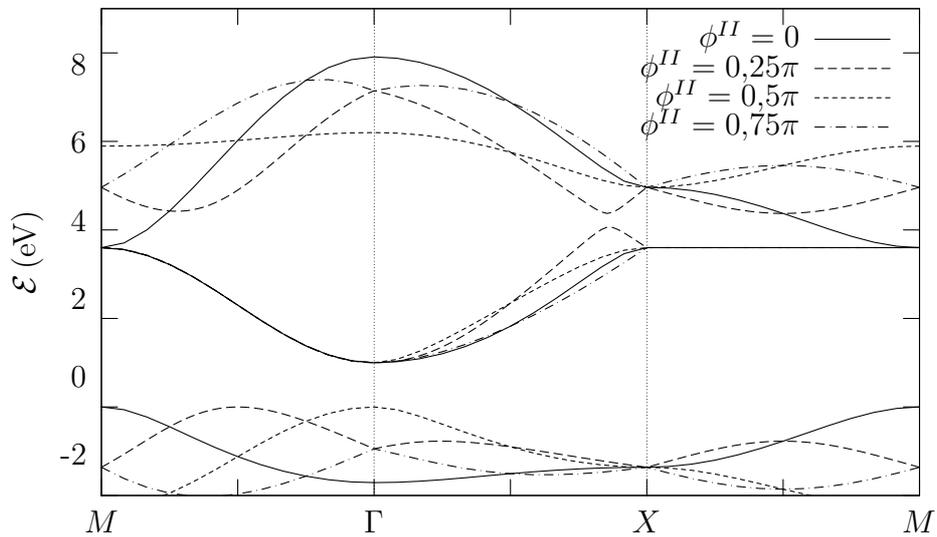


Abbildung 4.5: In der Θ_{II} -Phase verschiebt sich durch die Phase ϕ^{II} des d-p-Hüpfparameters das obere und untere Band entlang der Diagonalen der Brillouinzone. Gleichzeitig verformt sich auch das obere Band stark. Dadurch erfahren auch die anderen beiden Bänder leichte Verformungen.

Die Phase im Θ_I -Fall geht also nur in den vorletzten Term der Bestimmungsgleichung der Energie ein. Dieser hängt von der Phase ϕ^I des d-p-Matrixelements in der folgenden Weise ab:

$$- 64T_{xy}T_{dp}^2 \cos^2 k_x \cos^2 k_y \cos 2\phi^I \quad (4.20)$$

Die Bandstruktur ist also π periodisch in ϕ^I und symmetrisch um $\phi^I = \frac{\pi}{2}$ (s. Abb. 4.4). Im Θ_{II} -Fall führt nach (4.4) die Phase ϕ^{II} des d-p-Matrixelements zu einer Verschiebung der Bänder innerhalb der Brillouinzone. Da aber nach (4.5) $\gamma_{\mathbf{k}}$ diese Verschiebung nicht zeigt, deformieren sich zusätzlich die Bänder (s. Abb. 4.5).

4.2 Schwache Wechselwirkungen

Bevor wir uns dem Slave-Boson-Hamiltonoperator zuwenden wollen, werden wir uns in diesem Kapitel die Selbstkonsistenzgleichungen für schwache Wechselwirkungen anschauen. Die Sauerstoff-Sauerstoff-Wechselwirkung vernachlässigen wir dabei. Die Gleichungen betrachten wir für die Zerlegungen der d-p-Wechselwirkung in Stromoperatoren und eine Kombination aus Strom- und Hüpfmodulierungsoperatoren.

4.2.1 Zerlegung in Stromoperatoren

Um zu einem Operatorenausdruck für den Strom von einem Kupferorbital am Ort \mathbf{i} zu einem Sauerstofforbital am Ort $\mathbf{i} - \mathbf{m}$ zu gelangen, betrachten wir die Kontinuitätsgleichung. Dort schreiben wir im Fall diskreter Ortswerte die Divergenz durch einen Differenzenquotienten mit der Einheitslänge (Kupfer-Sauerstoff-Abstand) im Nenner:

$$\begin{aligned} \sum_{\ell\mathbf{m}\sigma} J_{\ell\mathbf{im}}^\sigma &= \nabla \sum_{\sigma} J_{\mathbf{i}}^\sigma \\ &= - \frac{\partial \sum_{\sigma} e\hat{n}_{d\mathbf{i}\sigma}}{\partial t} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Der Strom einer Spinsorte σ von einem Kupferorbital am Ort \mathbf{i} in \mathbf{m} -Richtung zu einem Sauerstofforbital wurde dabei mit $J_{\ell\mathbf{im}}^\sigma$ bezeichnet, während mit $J_{\mathbf{i}}^\sigma$ der von einer Spinsorte σ auf ein Kupferorbital am Ort \mathbf{i} übertragene Strom ist. Die Ableitung können wir mit Hilfe der Heisenbergschen Bewegungsgleichung durch einen Kommutator mit dem Hamiltonoperator ausdrücken. Betrachten wir den Ersatzhamiltonoperator aus (3.51), so kann

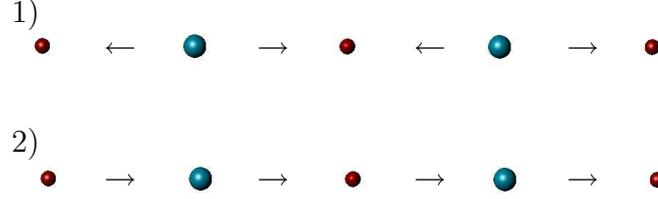


Abbildung 4.6: Die zwei verschiedenen Ströme in der Einheitszelle können durch gleich (1) oder entgegen (2) gerichtete Strommuster ersetzt werden. Bei ersteren fließen die Ströme zu d-Orbitalen, bei letzteren durch sie hindurch.

dieser Kommutator leicht berechnet werden:

$$\begin{aligned}
\sum_{\ell\mathbf{m}\sigma} J_{\ell\mathbf{im}}^\sigma &= -i\frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma} [\tilde{H}, \hat{n}_{d\mathbf{i}\sigma}]_- \\
&= -i\frac{e}{\hbar} \sum_{\mathbf{j}\sigma\sigma'} \left(T_d [\hat{n}_{d\mathbf{j}\sigma'}, \hat{n}_{d\mathbf{i}\sigma}]_- + \sum_{\ell\mathbf{m}} T_{d\ell\mathbf{m}} [d_{\mathbf{j}\sigma'}^\dagger p_{\ell, \mathbf{j}-\mathbf{m}, \sigma'}, \hat{n}_{d\mathbf{i}\sigma}]_- \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\ell\mathbf{m}} T_{d\ell\mathbf{m}}^* [p_{\ell, \mathbf{j}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger d_{\mathbf{j}\sigma'}, \hat{n}_{d\mathbf{i}\sigma}]_- \right) \\
&= i\frac{e}{\hbar} \sum_{\ell\mathbf{m}\sigma} \left(T_{d\ell\mathbf{m}} d_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger p_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} - h.c. \right) \tag{4.22}
\end{aligned}$$

Aufgrund der auftretenden Summen liegt es nun nahe, den folgenden Ausdruck für den Stromoperator zu verwenden:

$$J_{\ell\mathbf{im}}^\sigma = i\frac{e}{\hbar} \left(T_{d\ell\mathbf{m}} d_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger p_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} - h.c. \right) \tag{4.23}$$

In diesem Kapitel wollen wir uns mit Strömen des Hubbard-Hamiltonoperators (2.6) beschäftigen. Da für diesen die Kommutatoren komplizierter werden, lassen wir zur Berechnung der analytischen Eigenschaften die Vorfaktoren weg. Wir berücksichtigen zudem zunächst auch Ströme mit Verletzung der Spinerhaltung. Statt mit zwei verschiedenen Strömen entlang einer Richtung in der Einheitszelle zu operieren, werden wir zu gleich bzw. entgegen gerichteten Operatoren übergehen (s. Abb. 4.6). Wir stellen also Ströme einer Richtung zu d-Orbitalen ($n = 1$) oder durch d-Orbitale hinweg ($n = 2$) durch

$$\begin{aligned}
J_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} &:= i \left(c_{d\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} + (-1)^{n+1} c_{d\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{e}_\ell, \sigma'} - h.c. \right) \\
&= i \left(\sum_{\mathbf{m}} m_\ell^{n+1} c_{d\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'} \right) - h.c. \tag{4.24}
\end{aligned}$$

dar. Deren Quadrat kann die Hubbard-Wechselwirkung zwischen den Sauerstoff- und

Kupferorbitalen beschreiben:

$$\begin{aligned}
J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} &= \sum_{\mathbf{m}\mathbf{m}'} (m_\ell + m'_\ell)^{n+1} \left(c_{d i \sigma}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'} c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}', \sigma}^\dagger c_{d i \sigma} \right. \\
&\quad \left. + c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{d i \sigma} c_{d i \sigma}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}', \sigma'} \right) \\
&= \sum_{\mathbf{m}\mathbf{m}'} (m_\ell + m'_\ell)^{n+1} \left(c_{d i \sigma}^\dagger c_{d i \sigma} \delta_{\mathbf{m}\mathbf{m}'} + c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}', \sigma'} \right. \\
&\quad \left. - 2c_{d i \sigma}^\dagger c_{d i \sigma} c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}', \sigma'} \right) \\
&= \sum_{\mathbf{m}} \left(c_{d i \sigma}^\dagger c_{d i \sigma} + c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'} - 2c_{d i \sigma}^\dagger c_{d i \sigma} c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma'} \right) \\
&\quad + (-1)^{n+1} \left(c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{e}_\ell, \sigma'}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} - 2c_{d i \sigma}^\dagger c_{d i \sigma} c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{e}_\ell, \sigma'}^\dagger c_{\ell, \mathbf{i}+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} + h.c. \right) \quad (4.25)
\end{aligned}$$

Dabei wurde im ersten Schritt das Pauli-Prinzip ausgenutzt:

$$c_{d i \sigma}^\dagger c_{d i \sigma}^\dagger = 0 \quad (4.26)$$

Der dritte Term ist gerade der Operatorenausdruck der d-p-Wechselwirkung, während die letzte Zeile mit der Summation über n , den gleich oder entgegen gerichteten Strömen, verschwinden würde. Dadurch kann der Hamiltonoperator aus (2.6) ohne Wechselwirkung zwischen den Sauerstofforbitalen mit Hilfe des Abzählens der Summen über die nächsten Nachbarn in der folgenden Form geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{a i \sigma} (\epsilon_a - 2U_{dp} - 2\delta_{ad} U_{dp}) \hat{n}_{a i \sigma} - \sum_{a \neq b, \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} t_{ab} c_{a i \sigma}^\dagger c_{b, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} \\
&\quad - \frac{U_{dp}}{4} \sum_{n \ell \mathbf{i}\sigma\sigma'} J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} + \sum_{a i \sigma} \frac{U_a}{2} c_{a i \sigma}^\dagger c_{a i \sigma} c_{a i, -\sigma}^\dagger c_{a i, -\sigma} \quad (4.27)
\end{aligned}$$

Da die Wechselwirkung die Korrelation zweier Ströme gleichen Typs beschreibt, ersetzen wir einen von diesen, im Rahmen einer Molekularfeldnäherung, durch ein Feld R_ℓ^n . Wir verwenden somit für den Ersatzhamiltonoperator den folgenden Ansatz:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \sum_{a i \sigma} E_a c_{a i \sigma}^\dagger c_{a i \sigma} + \sum_{a \neq b, \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} \mathcal{T}_{ab} c_{a i \sigma}^\dagger c_{b, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} + \sum_{n \ell \mathbf{i}\sigma} R_\ell^n J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \quad (4.28)$$

Die Parameter E_a und \mathcal{T}_{ab} drücken dabei analog zum Ersatzhamiltonoperator (3.51) die Energien bzw. das Hüpfen der Quasielektronen aus. Verwenden wir die Definition der Stromoperatoren (4.23), um diesen Hamiltonoperator mit dem aus (3.51) zu vergleichen, so erkennt man, dass das Stromfeld R_ℓ^n den Imaginärteil des dortigen Martixelements darstellt. Wir wählen daher diese Parameter reell, was auch einer Zerlegung in hermitesches (mit reellem Matrixelement) und antihermitesches Hüpfen (mit imaginärem Matrixelement) entspricht. Der Hamiltonoperator wird für $R_\ell^n = 0$ durch die ersten Terme dominiert, die reines Bandverhalten beschreiben, während er im Grenzfall $R_\ell^n \rightarrow \infty$ vom letzten Term

bestimmt wird. Dieser drückt die vollständige Ausprägung von Flussphasen aus. Um diese nachzuweisen, suchen wir also im Nachfolgenden nach endlichen Feldern R_ℓ^n .

Zunächst soll allerdings auf die Besonderheiten der Stromoperatoren eingegangen werden: Der Kommutator der beiden Arten von Stromoperatoren verschwindet nicht, führt allerdings zu Hüpfprozessen übernächster Nachbarn:

$$\begin{aligned} [J_{\ell i}^{1\sigma\sigma'}, J_{\ell i}^{2\sigma\sigma'}]_- &= \sum_{\mathbf{m}\mathbf{m}'} m'_\ell \left([c_{di\sigma}^\dagger c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'}, c_{\ell, i-\mathbf{m}', \sigma'}^\dagger c_{di\sigma}]_- \right. \\ &\quad \left. + [c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{di\sigma}, c_{di\sigma}^\dagger c_{\ell, i-\mathbf{m}', \sigma'}]_- \right) \\ &= 2 \left(c_{\ell, i-\mathbf{e}_\ell, \sigma'}^\dagger c_{\ell, i+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} - h.c. \right) \end{aligned} \quad (4.29)$$

Analoges gilt für den Kommutator mit reellen Hüpfprozessen, so dass ein Stromoperator mit dem Ersatzhamiltonoperator

$$\left\langle [J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'}, \tilde{\mathcal{H}}]_- \right\rangle = 0 \quad (4.30)$$

sowie mit dem anderen Stromoperator

$$\left\langle [J_{\ell i}^{1\sigma\sigma'}, J_{\ell i}^{2\sigma\sigma'}]_- \right\rangle = 0 \quad (4.31)$$

im statistischen Mittel, gebildet mit $\tilde{\mathcal{H}}$ aus (4.28), vertauscht. Dies legt die Vermutung nahe, dass die beiden Flussphasen im Ersatzhamiltonoperator separat betrachtet werden dürfen.

Um nun das Minimalproblem der freien Energie aus (3.39) zu lösen, müssen zunächst die Erwartungswerte bekannt sein. Der Erwartungswert der Ströme hängt mit dem Imaginärteil des Hüpfwartungswerts nach

$$\begin{aligned} \left\langle J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \right\rangle &= -2 \sum_{\mathbf{m}} m_\ell^{n+1} \text{Im } n_{d\ell\mathbf{m}} \\ &= -2n_{dp} \sum_{\mathbf{m}} m_\ell^{n+1} \sin \alpha_{\ell\mathbf{m}} \end{aligned} \quad (4.32)$$

zusammen. Dabei wurden die Symmetrierelationen aus (3.42) verwendet. Betrachtet man die beiden Strommuster, so erkennt man, dass der Summationsfaktor gerade dessen Symmetrien widerspiegelt:

$$\begin{aligned} \Theta_I : \quad \alpha_{\ell\mathbf{e}_\ell} &= \alpha_{\ell, -\mathbf{e}_\ell} \\ \Theta_{II} : \quad \alpha_{\ell\mathbf{e}_\ell} &= -\alpha_{\ell, -\mathbf{e}_\ell} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Wir können daher $\alpha_{\ell\mathbf{m}}$ in eine neue, von \mathbf{m} unabhängige Phase transformieren

$$\alpha_{\ell\mathbf{m}} = \sum_n m_\ell^{n+1} \alpha_\ell^n \quad (4.34)$$

und damit kann (4.32) wie folgt einfacher geschrieben werden:

$$\sum_{\mathbf{m}} m_{\ell}^{n+1} \sin \alpha_{\ell \mathbf{m}} = \sum_{\mathbf{m}} \sin \sum_{n'} m_{\ell}^{n+n'} \alpha_{\ell}^{n'} = 2 \sin \alpha_{\ell}^n \cos \alpha_{\ell}^{3-n} \quad (4.35)$$

Für die letzte Umformung nutzten wir die Erkenntnis, dass sich für $n' \neq n$ die beiden Terme der \mathbf{m} -Summe nach Anwendung des Additionstheorems gegenseitig aufheben. Da der Kosinusterm den jeweils anderen Typ Ströme beschreibt, kann dieser weggelassen werden, falls man die Strommuster unabhängig voneinander betrachtet. Den Erwartungswert der Korrelationen kann man nicht direkt mit dem Wicktheorem spalten, da die Stromoperatoren wegen ihrer Hermitezität weder fermionische noch bosonische Vertauschungsrelationen erfüllen. Drückt man sie allerdings nach der Relation (4.25) durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus, so kann man die auftretenden Operatoren kontrahieren:

$$\begin{aligned} \sum_{ni} \langle J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \rangle &= 2 \sum_{\mathbf{im}} \left(\langle c_{di\sigma}^{\dagger} c_{di\sigma} \rangle + \langle c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'}^{\dagger} c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'} \rangle \right. \\ &\quad - 2 \left(\langle c_{di\sigma}^{\dagger} c_{di\sigma} \rangle \langle c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'}^{\dagger} c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'} \rangle \right. \\ &\quad \left. \left. - \langle c_{di\sigma}^{\dagger} c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'} \rangle \langle c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'}^{\dagger} c_{di\sigma} \rangle \right) \right) \\ &= 4N \left(n_d + n_p - \sum_{\mathbf{m}} (n_d n_p - n_{dp}^2) \right) \\ &= 4N (n_d + n_p - 2n_d n_p + 2n_{dp}^2) \\ &= 4N \left(n_d + n_p - 2n_d n_p + \frac{\langle J_{\ell i}^{n'\sigma\sigma'} \rangle \langle J_{\ell i}^{n'\sigma\sigma'} \rangle}{8 \sin^2 \alpha_{\ell}^{n'} \cos^2 \alpha_{\ell}^{3-n'}} \right) \end{aligned} \quad (4.36)$$

Dabei wurde im letzten Schritt n_{dp} durch den Imaginärteil eines Stromoperators nach (4.32) ausgedrückt. Da in den Betrag des Hüpfwartungswerts beide Arten von Strömen eingehen, kann man diesen durch einen beliebigen Typ Stromoperator ersetzen. Dieser Typ n' kann im folgenden frei gewählt werden. Man kann sich ihn beispielsweise als das zu untersuchende Strommuster vorstellen. Wenn die Strommuster wie oben angesprochen als unabhängig von einander betrachtet werden darf, sollte der Kosinus im Nenner verschwinden. Der Bruch des letzten Terms muss also unabhängig von der Wahl der verwendeten

Stromerwartungswerte sein. Im Freien-Energie-Funktional aus (3.39)

$$\begin{aligned}
 F &= \langle \mathcal{H} - \tilde{\mathcal{H}} \rangle - \frac{1}{\beta} \ln(\text{Sp}(e^{-\beta\tilde{\mathcal{H}}})) + \mu N(1 + \delta) \\
 &= \frac{1}{N} \left(\sum_{ai\sigma} (\epsilon_a - E_a) \langle c_{ai\sigma}^\dagger c_{ai\sigma} \rangle \right. \\
 &\quad - \sum_{a \neq b, i, m\sigma} (t_{ab} + \mathcal{T}_{abm}) \langle c_{ai\sigma}^\dagger c_{b, i-m, \sigma} \rangle \\
 &\quad + \sum_{aim\sigma} \frac{U_a}{2} \langle c_{ai\sigma}^\dagger c_{ai\sigma} \rangle \langle c_{ai, -\sigma}^\dagger c_{ai, -\sigma} \rangle \\
 &\quad \left. - \frac{U_{dp}}{4} \sum_{n\ell i\sigma\sigma'} (\langle J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \rangle + R_\ell^n \delta_{\sigma\sigma'} \langle J_{\ell i}^{n\sigma\sigma} \rangle) \right) \quad (4.37)
 \end{aligned}$$

können nun die beiden Ausdrücke für die Erwartungswerte eingesetzt sowie die nicht benötigten Spinsummen abgezählt werden und man erhält

$$\begin{aligned}
 F &= N \left(\left(\epsilon_d + \frac{U_d}{2} n_d - E_d \right) n_d \right. \\
 &\quad + 4 \left(\epsilon_p + \frac{U_p}{2} n_p - E_p \right) n_p \\
 &\quad - \sum_{\ell\mathbf{m}} (\mathcal{T}_{d\ell\mathbf{m}} + t_{dp}) n_{d\ell\mathbf{m}} - \sum_{\mathbf{m}} (\mathcal{T}_{xy\mathbf{m}} + t_{xy}) n_{xy\mathbf{m}} + h.c. \\
 &\quad - 2 \sum_{n\ell i} \left(\frac{U_{dp} \langle J_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle}{8 \sin^2 \alpha_\ell^n \cos^2 \alpha_\ell^{3-n}} \delta_{n,n'} + R_\ell^n \right) \langle J_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle \\
 &\quad \left. + 16 U_{dp} n_d n_p - \frac{1}{\beta} \ln(\text{Sp}(e^{-\beta\tilde{\mathcal{H}}})) + (1 + \delta)\mu \right). \quad (4.38)
 \end{aligned}$$

Nach der dritten Zeile ist es günstig die reellen Hüpfparameter des Ersatzhamiltonoperators zu

$$\mathcal{T}_{d\ell\mathbf{m}} = -t_{dp}, \quad \mathcal{T}_{xy\mathbf{m}} = -t_{xy} \quad (4.39)$$

zu wählen. Die Wechselwirkungen zwischen unterschiedlichen Spinrichtungen können, da wir einen spininvarianten Ersatzhamiltonoperator verwenden, nur in Besetzungszahlen kontrahiert werden. Sie renormalisieren damit nur die Diagonalelemente, beeinflussen also nur den Bandabstand ε und das chemische Potential μ . Die vierte Zeile zeigt, dass die Minimierung des Funktionals bezüglich des Stromfelds R_ℓ^n dem Minimierungsproblem einer

Parabel entspricht. Dieses kann einfach durch quadratische Ergänzung

$$\begin{aligned}
& - \left\{ \frac{U_{dp} \langle J_{\ell i}^{n' \uparrow \uparrow} \rangle}{8 \sin^2 \alpha_{\ell}^{n'} \cos^2 \alpha_{\ell}^{3-n'} + R_{\ell}^{n'}} \right\} \langle J_{\ell i}^{n' \uparrow \uparrow} \rangle \\
& = - \left(\frac{U_{dp}}{8 \sin^2 \alpha_{\ell}^{n'} \cos^2 \alpha_{\ell}^{3-n'}} \left\{ \langle J_{\ell i}^{n' \uparrow \uparrow} \rangle + \frac{4 \sin^2 \alpha_{\ell}^{n'} \cos^2 \alpha_{\ell}^{3-n'}}{U_{dp}} R_{\ell}^{n'} \right\}^2 \right. \\
& \quad \left. - \frac{2 \sin^2 \alpha_{\ell}^{n'} \cos^2 \alpha_{\ell}^{3-n'}}{U_{dp}} R_{\ell}^{n'} \right) \quad (4.40)
\end{aligned}$$

ermittelt werden. Wie man erkennt, würden endliche Erwartungswerte des Stromoperators und damit auch ein reelles, endliches Feld diesen Teil des Freien-Energie-Funktionalen erniedrigen, wie schon C. M. Varma in [4] zeigen konnte. Da jedoch dieser Erwartungswert in komplizierter Form von dem Feld R_{ℓ}^n abhängt und dieses auch in die anderen Teile des Freien-Energie-Funktionalen eingeht, muss untersucht werden, ob die Selbstkonsistenzgleichungen solche Lösungen zulassen. Diese Abhängigkeit des Funktionalen ist bestimmt durch (4.32) und den Erwartungswerten (4.13) - (4.15), die schon im letzten Kapitel berechnet wurden:

$$n_d = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{nk}} \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{nk}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - \mathcal{E}_{n' \mathbf{k}})} \left((\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - E_p)^2 - t_{xy}^2 \gamma_{\mathbf{k}}^2 \right) \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned}
n_p &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{nk}} \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{nk}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - \mathcal{E}_{n' \mathbf{k}})} \\
& \quad \cdot \left((\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - E_d)(\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - E_p) - \frac{1}{2} (t_{dp}^2 + R_{\ell}^{n2}) (|\gamma_{\mathbf{k}x}|^2 + |\gamma_{\mathbf{k}y}|^2) \right) \quad (4.42)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle J_{\ell i}^{n \uparrow \uparrow} \rangle &= -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{m}} m_{\ell}^{n+1} \text{Im} \sum_{\mathbf{nk}} e^{i\mathbf{m}\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{nk}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - \mathcal{E}_{n' \mathbf{k}})} \\
& \quad \cdot \left((\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - E_p) \gamma_{\ell \mathbf{k}}^* - t_{xy} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{1-\ell, \mathbf{k}}^* \right) \sqrt{t_{dp}^2 + R_{\ell}^{n2}} \quad (4.43)
\end{aligned}$$

mit den Formfaktoren

$$\gamma_{\ell \mathbf{k}} = 2 \cos \left(k_{\ell} + \phi^{II} + (-1)^{\ell} \phi^{III} \right) e^{i(\phi^0 + (-1)^{\ell} \phi^I)}, \quad (4.44)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = 4 \cos k_x \cos k_y \quad (4.45)$$

und Anregungsenergien, die durch

$$\begin{aligned}
0 &= \mathcal{E}_{\mathbf{nk}}^3 - (E_d + 2E_p) \mathcal{E}_{\mathbf{nk}}^2 \\
& + \left(2E_d E_p + E_p^2 - t_{xy}^2 \gamma_{\mathbf{k}} - (t_{dp}^2 + R_{\ell}^{n2}) (\gamma_{x\mathbf{k}} + \gamma_{y\mathbf{k}}) \right) \mathcal{E}_{\mathbf{nk}} \\
& + E_p (t_{dp}^2 + R_{\ell}^{n2}) (\gamma_{x\mathbf{k}} + \gamma_{y\mathbf{k}}) \\
& + 2t_{xy} (t_{dp}^2 + R_{\ell}^{n2}) \gamma_{\mathbf{k}} \text{Re} \gamma_{x\mathbf{k}} \gamma_{y\mathbf{k}}^* - E_d (E_p^2 - t_{xy}^2 \gamma_{\mathbf{k}}^2) \quad (4.46)
\end{aligned}$$

bestimmt sind und durch die auch eine Abhängigkeit der Besetzungszahlen vom Stromfeld folgt. Dabei wurde die Phase von $-t_{dp} + iR_\ell^n$ in gleich und entgegen gerichtete Phasen ϕ^0 - ϕ^{III} im Strommuster n bezüglich ℓ unterteilt.

Die Ableitung des Freie-Energie-Funktional, z.B. nach einem Diagonalelement E_a , kann nun berechnet werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial E_a} = & N \left(2\{\epsilon_d + U_d n_d - E_d + 8U_{dp} n_p\} \frac{\partial n_d}{\partial E_a} \right. \\ & + 4\{\epsilon_p + U_p n_p - E_p + 4U_{dp} n_d\} \frac{\partial n_p}{\partial E_a} \\ & - 2 \sum_{n\ell i} \left\{ \frac{U_{dp} \langle J_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle}{8 \sin^2 \alpha_\ell^n \cos^2 \alpha_\ell^{3-n}} \delta_{n,n'} + R_\ell^n \right\} \frac{\partial \langle J_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle}{\partial E_a} \\ & \left. + 2n_a - \left\langle \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial E_a} \right\rangle \right) \end{aligned} \quad (4.47)$$

Durch den letzten Term fällt die direkte Ableitung heraus, da

$$\left\langle \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial E_a} \right\rangle = 2n_a. \quad (4.48)$$

Dies gilt auch für die Ableitungen nach anderen Parametern x_ν , da sie nur linear in den Ersatzhamiltonoperator eingehen. Die Klammern $\{ \dots \}$ werden für andere Matrixelemente des Ersatzhamiltonoperators mit anderen Vorfaktoren reproduziert. Bei der Ableitung nach dem chemischen Potential μ muss beachtet werden, dass ϵ_d und ϵ_p nach (2.9) und (2.10) davon abhängen. Diese Ableitung produziert zusätzlich den Term

$$N\{-2n_d - 4n_p + (1 + \delta)\}, \quad (4.49)$$

dessen Ausdruck in der Klammer verschwindet, falls die Nebenbedingung der Teilchenzahl erfüllt wird. Für ein Minimum ist es hinreichend und sogar notwendig, dass alle geschweiften Klammern einzeln verschwinden. Man erhält so die Selbstkonsistenzgleichungen:

$$(1 + \delta) = 2n_d + 4n_p \quad (4.50)$$

$$E_d = \epsilon_d + U_d n_d + 8U_{dp} n_p \quad (4.51)$$

$$E_p = \epsilon_p + U_p n_p + 4U_{dp} n_d \quad (4.52)$$

$$\mathcal{T}_{xy} = -t_{xy} \quad (4.53)$$

$$\mathcal{T}_{d\ell m} = -t_{dp} \quad (4.54)$$

$$\begin{aligned} R_\ell^n &= -\delta_{n,n'} \frac{U_{dp} \langle J_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle}{4 \sin^2 \alpha_\ell^n \cos^2 \alpha_\ell^{3-n}} \\ &= \begin{cases} \frac{U_{dp} n_{dp}}{\sin \alpha_\ell^n \cos \alpha_\ell^{3-n}} & \text{falls } n = n' \\ 0 & \text{falls } n \neq n' \end{cases} \end{aligned} \quad (4.55)$$

Würde für n' ein vorhandenes Strommuster gewählt, so kann somit das andere nicht auftreten. Die Flussphasen sind also getrennt und der Kosinus im Nenner des Stromfeldes entfällt. Da allerdings für n' in (4.36) auch das jeweils andere Strommuster gewählt werden kann, erwarten wir, dass keine Flussphasen auftreten: Möchte man die Gleichungen auf die Existenz des ersten Strommusters prüfen, so kann man $n' = 2$ wählen und man erhält

$$R_\ell^1 = 0. \quad (4.56)$$

Dies bedeutet, dass dieses Strommuster nicht auftritt. Analog kann man das zweite Strommuster überprüfen, indem man $n' = 1$ wählt. Würde ein Strommuster vorliegen, so könnten wir also für n' das jeweils andere wählen und wir würden ein verschwindendes Feld erhalten.

Um die offensichtliche Asymmetrie der Selbstkonsistenzgleichungen bezüglich n' weiter zu untersuchen, wenden wir uns nun dem ersten Fall in (4.55) zu. Diese hätten wir auch für beide Strommuster bekommen, wenn wir in (4.36) statt ein beliebiges Strommuster n' , eine symmetrische Kombination beider Strommuster betrachtet hätten. Für $n \neq n'$ dominiert das Stromfeld R_ℓ^n allerdings für $\alpha_\ell^n \rightarrow 0$ bzw. π , dem Fall ohne Ströme, während es für $\alpha_\ell^n = \frac{1}{2}\pi$ bzw. $\frac{3}{2}\pi$ seinen Minimalwert annimmt. Da also die Dominanz des letzten Terms im Hamiltonoperator (4.28) gleichbedeutend mit dem Verschwinden von Strömen ist, wird auch hier nicht mit einem Auftreten von Strömen gerechnet. Allerdings wurde bei der Herleitung des Erwartungswerts der Korrelationen (4.36) der Fall $\alpha_1^n = 0$ bzw. π ausgeschlossen. Die dort für diesen Fall auftretende Singularität hat zur Folge, dass auch die Selbstkonsistenzgleichungen an dieser Stelle divergieren. Betrachtet man eine Funktion

$$f(x) = \begin{pmatrix} (1 + \delta) - 2n_d - 4n_p \\ \epsilon_d + U_d n_d + 8U_{dp} n_p - E_d \\ \epsilon_p + U_p n_p + 4U_{dp} n_d - E_p \\ \frac{U_{dp} n_{dp}}{\sin \alpha_\ell^n} - R_\ell^n \end{pmatrix}, \quad (4.57)$$

die die Abweichung vom Erfüllen der Selbstkonsistenzgleichungen angibt, so erwartet man naiverweise für verschwindendes Feld R_ℓ^n , dass diese Funktion stetig gegen 0 verläuft, da Lösungen ohne Ströme existieren. Unterhalb eines bestimmten Wertes des Feldes R_ℓ^n , wird sich allerdings die Singularität bemerkbar machen, so dass f an den Stellen mit $R_\ell^n = 0$ divergiert. Dies führt zu Minima, die auch für Nullstellen gehalten werden können und somit eventuell Lösungen mit Strömen entsprechen. Mit der Berechnung der Erwartungswerte aus dem letzten Kapitel ist die numerische Lösung der Selbstkonsistenzgleichungen möglich. Abb. 4.7 zeigt das Verhalten von f für verschiedene Parameter x . Letztere wurden dabei rein zufällig in einem Bereich ermittelt, dessen Mittelwert sich durch ein Newtonverfahren ergibt (s. Anhang C). Die gefundenen Funktionswerte wurden anschließend auf die f - R_ℓ^n -Ebene projiziert. Lösungen der Selbstkonsistenzgleichungen entsprechen daher Nullstellen in dem Schaubild. Diese haben aufgrund der Analytizität von f einen Einzugsbereich und sollten daher durch ein angedeutetes Minimum erkennbar sein. Die Numerik zeigt deutlich zwei Minima symmetrisch um den Ursprung. Bei geringer Auflösung könnten diese also Nullstellen und somit Lösungen mit Strömen sein. Erst die Vergrößerung

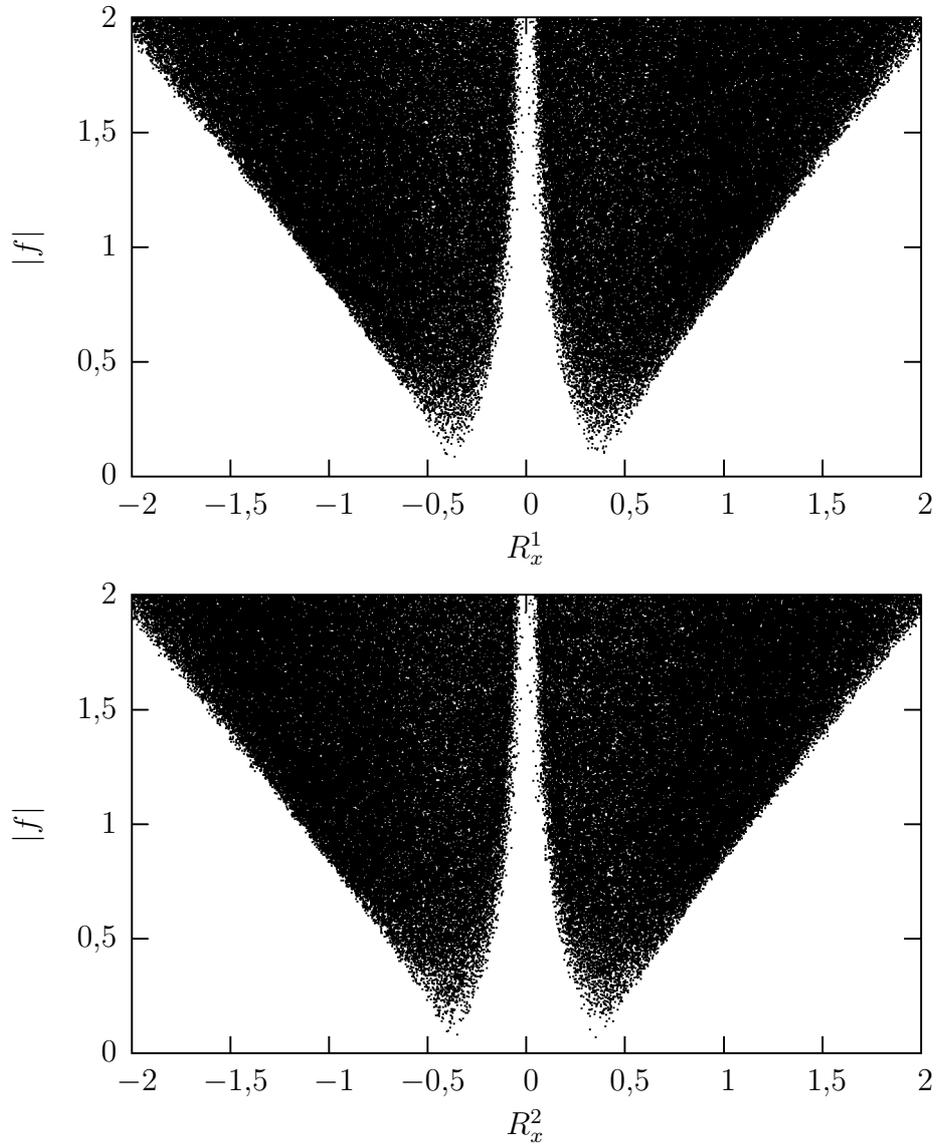


Abbildung 4.7: Die Singularität der Selbstkonsistenzgleichungen zeigt sich in deren numerischer Berechnung im Θ_I - (oben) und Θ_{II} -Fall (unten). Die Parameter des Ersatzhamiltonoperators \tilde{H} wurden dabei zufällig bestimmt (je 250000 Punkte mit 25%, 50% und 100% Abweichung von dem Wert, der mit Hilfe eines Newtonverfahrens für ein positives Feld R_x^n gefunden wurde; Varianz des Feldes siehe Achse) und die Werte auf das Feld R_x^n projiziert. Dadurch entsprechen Lösungen der Selbstkonsistenzgleichungen Nullstellen. Diese treten aufgrund der Unwahrscheinlichkeit des Ratens des genauen Wertes im Diagramm nicht auf. Es sollte allerdings der Einzugsbereich dieser Nullstellen sichtbar sein. Dies könnten die beiden Minima in den zwei Diagrammen sein. Als Modell-Parameter wurden die Werte von Hybertsen [25] $\varepsilon = 3,6$ eV, $t_{dp} = 1,3$ eV, $t_{xy} = 0,65$ eV, $U_d = 10,5$ eV, $U_p = 4$ eV, $U_{dp} = 1,2$ eV sowie $\delta = 0,2$ und $T = 0,01 \frac{\text{eV}}{\text{k}_B} \approx 116$ K verwendet.

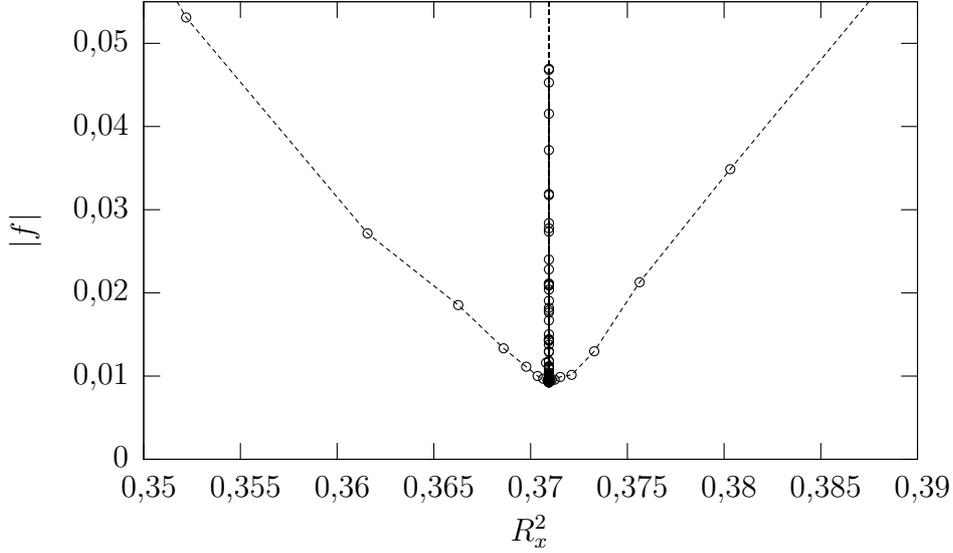


Abbildung 4.8: Die Vergrößerung des rechten Minimums der Θ_{II} -Phase aus Abb. 4.7 mittels eines Drei-Punkte-Verfahrens (s. Anhang C) zeigt, dass es sich nicht um eine Nullstelle handelt. Dadurch sind diese Stellen keine Lösung der Selbstkonsistenzgleichungen. Die Punkte des Verfahrens wurden dabei zur Illustration verbunden.

beispielsweise des positiven Minimums (s. Abb. 4.8) enthüllt, dass dies nur Minima, aber keine Nullstellen sind.

Um in den nachfolgenden Kapiteln den Einfluss der Singularität auszuschließen, werden wir uns in den nächsten Kapiteln mit einer anderen Zerlegung der Wechselwirkung beschäftigen, bei der dieses Problem nicht auftritt.

4.2.2 Zerlegung in Strom- und Hüpfmodulierungsoperatoren

Man kann nun analog zu den Stromoperatoren reelle, hermitesche Operatoren definieren, die zusätzliches Hüpfen ($n = 1$) oder Modulierung der Hüpfparameter ($n = 2$) beschreiben (s. Abb. 4.9):

$$K_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} := c_{di\sigma}^\dagger c_{\ell, i+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} + (-1)^{n+1} c_{di\sigma}^\dagger c_{\ell, i-\mathbf{e}_\ell, \sigma'} + h.c. \quad (4.58)$$

Die Umschreibung der d-p-Wechselwirkung erhält man analog zu den Stromoperatoren. Der einzige Unterschied in den Gleichungen ergibt sich durch ein anderes Vorzeichen bei Termen, bei denen Fermionen doppelt erzeugt bzw. vernichtet werden:

$$\begin{aligned} K_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} K_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} &= \sum_{\mathbf{m}} \left(c_{di\sigma}^\dagger c_{di\sigma} + c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'} - 2c_{di\sigma}^\dagger c_{di\sigma} c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'}^\dagger c_{\ell, i-\mathbf{m}, \sigma'} \right) \\ &+ (-1)^{n+1} \left(c_{\ell, i-\mathbf{e}_\ell, \sigma'}^\dagger c_{\ell, i+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} - 2c_{di\sigma}^\dagger c_{di\sigma} c_{\ell, i-\mathbf{e}_\ell, \sigma'}^\dagger c_{\ell, i+\mathbf{e}_\ell, \sigma'} + h.c. \right) \end{aligned} \quad (4.59)$$

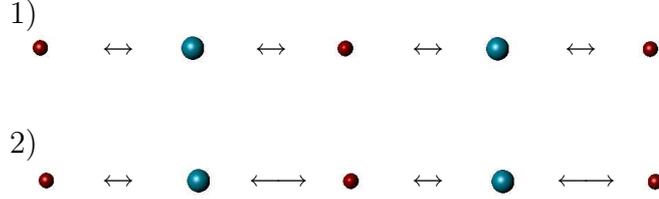


Abbildung 4.9: Die K Operatoren beschreiben zum einen normale Hüpferprozesse (1), zum anderen Dichtewellen in den Hüpferamplituden $n_{d\ell\mathbf{m}}$ (2), bei denen die Amplituden eines Sauerstoff-Kupferhüpfers innerhalb der Einheitszelle geschwächt (im Grenzfall sogar aufgehoben und die Fermionen innerhalb der Einheitszelle lokalisiert) werden.

Dies legt die Schreibweise der Wechselwirkung als Summe der beiden Zerlegungen nahe, da man so das Pauli-Prinzip nicht benötigt. Der Hamiltonoperator in dieser Zerlegung lautet

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{a\mathbf{i}\sigma} (\epsilon_a + 2U_{dp} + 2\delta_{ad}U_{dp}) \hat{n}_{a\mathbf{i}\sigma} - \sum_{a \neq b, \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} t_{ab} c_{a\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{b, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} \\ & - \frac{U_{dp}}{8} \sum_{n\ell\mathbf{i}\sigma\sigma'} \left(K_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} K_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} + J_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} J_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} \right). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Wegen der zusätzlichen Operatoren ergänzen wir den Ersatzhamiltonoperator um weitere Felder S_ℓ^n :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} = & \sum_{a\mathbf{i}\sigma} E_a a_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{i}\sigma} + \sum_{a \neq b, \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} \tilde{T}_{ab} a_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} \\ & + \sum_{n\ell\mathbf{i}\sigma} R_\ell^n J_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma} + \sum_{n\ell\mathbf{i}\sigma} S_\ell^n K_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma} \end{aligned} \quad (4.61)$$

Eine weitere Besonderheit an dieser Zerlegung ist, dass der Erwartungswert der neuen Operatoren mit dem Realteil des d-p-Hüpferwartungswerts verknüpft ist:

$$\langle K_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{m}} m_\ell^{n+1} \text{Re } n_{d\ell\mathbf{m}} \quad (4.62)$$

Dadurch kann der Betrag des Hüpferwartungswerts n_{dp} , zerlegt in den Real- und Imaginärteil, einfach durch die Summe der hermiteschen Operatoren ausgedrückt werden (vgl. (4.32)):

$$n_{d\ell\mathbf{e}_\ell} = \frac{1}{2} \sum_n \left(\langle K_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} \rangle - i \langle J_{\ell\mathbf{i}}^{n\sigma\sigma'} \rangle \right) \quad (4.63)$$

Die Einführung der Singularität, wie im vorherigen Kapitel, ist hier also nicht nötig. Der Ausdruck für den Korrelator, der analog zu (4.36) im letzten Kapitel berechnet werden

kann, vereinfacht sich dadurch zu

$$\begin{aligned}
\sum_{ni} \langle K_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} K_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \rangle &= \sum_{ni} \langle J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \rangle \\
&= 4N \left(n_d + n_p - 2n_d n_p \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_n \left(\langle J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \rangle \langle J_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \rangle + \langle K_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \rangle \langle K_{\ell i}^{n\sigma\sigma'} \rangle \right) \right). \tag{4.64}
\end{aligned}$$

Dadurch lässt sich auch die freie Energie

$$\begin{aligned}
F &= N \left(2 \left\{ \epsilon_d + \frac{U_d}{2} n_d - E_d \right\} n_d \right. \\
&\quad + 4 \left\{ \epsilon_p + \frac{U_p}{2} n_p - E_p \right\} n_p \\
&\quad - \sum_{\ell \mathbf{m}} \{ \mathcal{T}_{d\ell \mathbf{m}} + t_{dp} \} n_{d\ell \mathbf{m}} - \sum_{\mathbf{m}} \{ \mathcal{T}_{xy \mathbf{m}} + t_{xy} \} n_{xy \mathbf{m}} + h.c. \\
&\quad - 2 \sum_{n\ell i} \left\{ \frac{U_{dp}}{4} \langle J_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle + R_\ell^n \right\} \langle J_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle \\
&\quad - 2 \sum_{n\ell i} \left\{ \frac{U_{dp}}{4} \langle K_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle + S_\ell^n \right\} \langle K_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle \\
&\quad \left. + 16U_{dp} n_d n_p - \frac{1}{\beta} \ln(\text{Sp}(e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}})) + (1 + \delta)\mu \right) \tag{4.65}
\end{aligned}$$

symmetrischer schreiben. Die Selbstkonsistenzgleichungen ergeben sich analog zum letzten Kapitel durch Ableiten dieses Ausdrucks. Dabei entstehen die gleichen Faktoren vor den Ableitungen der Besetzungszahlen n_a und der Hüpfwartungswerte $n_{ab\mathbf{m}}$. Es ergeben sich damit die folgenden Selbstkonsistenzgleichungen:

$$(1 + \delta) = 2n_d + 4n_p \tag{4.66}$$

$$E_d = \epsilon_d + U_d n_d + 8U_{dp} n_p \tag{4.67}$$

$$E_p = \epsilon_p + U_p n_p + 4U_{dp} n_d \tag{4.68}$$

$$\mathcal{T}_{xy} = -t_{xy} \tag{4.69}$$

$$\mathcal{T}_{d\ell \mathbf{m}} = -t_{dp} \tag{4.70}$$

$$R_\ell^n = -\frac{U_{dp}}{2} \langle J_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle \tag{4.71}$$

$$S_\ell^n = -\frac{U_{dp}}{2} \langle K_{\ell i}^{n\uparrow\uparrow} \rangle \tag{4.72}$$

Das Feld R_ℓ^n muss im Gegensatz zum letzten Kapitel eine etwas andere Selbstkonsistenzgleichung erfüllen. Eine analoge Gleichung gilt für das neue Feld S_ℓ^n . Identifizieren wir

die Matrixelemente des Ersatzhamiltonoperators mit denen aus (3.51), so erhalten wir die folgenden neuen Selbstkonsistenzgleichungen:

$$E_d = \epsilon_d + U_d n_d + 8U_{dp} n_p \quad (4.73)$$

$$E_p = \epsilon_p + U_p n_p + 4U_{dp} n_d \quad (4.74)$$

$$T_{xy} = \mathcal{T}_{xy} = -t_{xy} \quad (4.75)$$

$$\begin{aligned} T_{d\ell\mathbf{m}} &= \mathcal{T}_{d\ell\mathbf{m}} + \sum_n \left(S_\ell^n + iR_\ell^n \right) \\ &= -t_{dp} - \frac{U_{dp}}{2} \sum_{n\mathbf{m}'} (m_\ell + m'_\ell)^{n+1} n_{d\ell\mathbf{m}'}^* \\ &= -t_{dp} - U_{dp} n_{d\ell\mathbf{m}}^* \end{aligned} \quad (4.76)$$

Das Feld S_ℓ^n bewirkt also eine Korrektur des Realteils des d-p-Matrixelements, während das Feld R_ℓ^n einen Imaginärteil erzeugt. Für Ströme ist daher das Feld R_ℓ^n maßgeblich. Bei der analytischen Herleitung der Selbstkonsistenzgleichungen sollte aber das Feld S_ℓ^n nicht vernachlässigt werden, da sonst die Singularität des letzten Kapitels auftreten kann. Wegen der begrenzten Genauigkeit numerischer Analysen kann man so, wie dort gezeigt wurde, auf vermeintliche Stromlösungen kommen. Ob in den hier vorliegenden Gleichungen Ströme enthalten sind, werden wir im nächsten Abschnitt untersuchen. Die dort auftretenden Selbstkonsistenzgleichungen sind eine Verallgemeinerung derer, die hier hergeleitet wurden. Wie dort gezeigt wird, ist die Aufteilung in Strom- und Hüpfmodulierungsoperatoren mit der direkten Kontraktion der Erzeuger und Vernichter konsistent. Zum Vergleich sei noch darauf hingewiesen, dass die Identifikation der Matrixelemente des letzten Abschnitts mit denen aus (3.51) einen etwas anderen Ausdruck für die Selbstkonsistenzgleichungen ergibt:

$$\begin{aligned} T_{d\ell\mathbf{m}} &= \mathcal{T}_{d\ell\mathbf{m}} + i \sum_n R_\ell^n \\ &= -t_{dp} + i \frac{U_{dp}}{2 \sin \alpha_\ell^n} n_{dp} \end{aligned} \quad (4.77)$$

Bei diesen tritt die Phase im Nenner der rechten Seite auf. Der Unterschied zwischen beiden Herleitungen entsteht nur durch die Verwendung des Pauli-Prinzips. Dadurch fallen bei Anwendung des Wicktheorems Kontraktionen weg, die im anderen Fall vorhanden waren. Sie sollten daher beide die gleichen Lösungen liefern. Die Selbstkonsistenzgleichungen (4.77) und (4.76) entsprechen sich nur für einen rein imaginären Hüpfwert $\alpha_\ell^n = \pm \frac{\pi}{2}$. Wie im nächsten Abschnitt gezeigt werden kann, folgt diese Bedingung im Θ_I -Fall ($n = 1$) auch aus der mikroskopischen Stromerhaltung. Jedoch kann dort aus der Betrachtung von (4.15) gefolgert werden, dass dafür der Hüpfparameter t_{dp} und somit auch der Strom verschwinden muss (vgl. (4.23)).

4.3 Starke Wechselwirkungen

4.3.1 Herleitung der Selbstkonsistenzgleichungen

In diesem Kapitel wenden wir uns nun dem Slave-Boson-Hamiltonoperator

$$\begin{aligned}
H_0 = & \sum_{a\mathbf{i}\sigma} \epsilon_a \hat{n}_{a\mathbf{i}\sigma} - \sum_{a \neq b, \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} t_{ab} ab^* a_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma}, \\
& + U_{dp} \sum_{\ell \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma\sigma'} \hat{n}_{d\mathbf{i}\sigma} \hat{n}_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma'}
\end{aligned} \tag{4.78}$$

aus (3.46) in seiner vereinfachten Form (Störungstheorie nullter Ordnung in t/U ohne Sauerstoff-Sauerstoff-Wechselwirkung) zu. Dieser soll mittels der Molekularfeldnäherung mit dem Ersatzhamiltonoperator

$$\tilde{H} = \sum_{a\mathbf{i}\sigma} E_a \hat{n}_{a\mathbf{i}\sigma} + \sum_{a\mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} T_{ab\mathbf{m}} a_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma} \tag{4.79}$$

aus (3.51) diskutiert werden. Im Gegensatz zu den letzten Kapiteln werden wir hier die Erwartungswerte der Wechselwirkung direkt mit Hilfe des Wicktheorems kontrahieren. Durch die Betrachtung großer Wechselwirkungen ist außerdem der Parameterraum um die Ordnungsparameter der Bosekondensation sowie um die Potentiale der Slave-Boson-Zwangsbedingung erweitert (s. (3.52)):

$$x = (\mu, E_d, E_p, \text{Re } T_{d\ell\mathbf{m}}, \text{Im } T_{d\ell\mathbf{m}}, \text{Re } T_{xy\mathbf{m}}, \text{Im } T_{xy\mathbf{m}}, \lambda_d, \lambda_\ell, d, p) \tag{4.80}$$

Die ersten Terme der Extremalbedingung aus (3.53) lauten mit Hilfe des Wicktheorems

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N} \left(\langle H_0 - \tilde{H} \rangle + \sum_{a\mathbf{i}} \lambda_a (\langle Q_{a\mathbf{i}} \rangle - 1) \right) \\
& = \frac{1}{N} \left(\sum_{a\mathbf{i}\sigma} (\epsilon_a - E_a + \lambda_a) \langle a_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{i}\sigma} \rangle \right. \\
& \quad - \sum_{a \neq b, \mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} (t_{ab} ab^* + T_{ab\mathbf{m}}) \langle a_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma} \rangle \\
& \quad + U_{dp} \sum_{\mathbf{i}\mathbf{m}\ell\sigma\sigma'} (\langle d_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{i}\sigma} \rangle \langle p_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma'}^\dagger p_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma'} \rangle - \langle d_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger p_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma'} \rangle \langle p_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma'}^\dagger d_{\mathbf{i}\sigma} \rangle) \\
& \quad \left. + \sum_{a, \mathbf{i}} \lambda_a |a|^2 - \sum_a \lambda_a \right)
\end{aligned} \tag{4.81}$$

und den Symmetrierelationen aus (3.42)

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{N} \left(\langle H_0 - \tilde{H} \rangle + \sum_{ai} \lambda_a (\langle Q_{ai} \rangle - 1) \right) \\
 &= 2n_d(\epsilon_d - E_d + \lambda_d + 8U_{dp}n_p) + 4n_p(\epsilon_p - E_p + \lambda_p) \\
 & \quad - 2 \sum_{\ell m} \left((t_{dp}dp_{\ell}^* + T_{d\ell m}) n_{d\ell m} + c.c. \right) + U_{dp}n_{\ell d, -m}n_{d\ell m} \\
 & \quad - 2 \sum_{\mathbf{m}} \left((t_{xy}p_y^*p_x + T_{xy\mathbf{m}}) n_{xy\mathbf{m}} + c.c. \right) \\
 & \quad + \lambda_d d^*d + \sum_{\ell} \lambda_p p_{\ell}^*p_{\ell} - \lambda_d - \sum_{\ell} \lambda_{\ell}. \tag{4.82}
 \end{aligned}$$

Dabei konnten einige der Spinsummen sowie die Summen über die verschiedenen, aber betragsmäßig gleichwertigen p-Orbitale ausgeführt werden. So entstanden die angegebenen Vorfaktoren, wobei noch beim ersten Wechselwirkungsterm über die vier nächsten Sauerstofforbitale summiert wurde. Aus (3.53) ergibt sich für die Ableitung nach einem Diagonalelement des Ersatzhamiltonoperators

$$\begin{aligned}
 0 &= 2 \frac{\partial n_d}{\partial E_a} \{ \epsilon_d - E_d + \lambda_d + 8U_{dp}n_p \} + 4 \frac{\partial n_p}{\partial E_a} \left\{ \epsilon_p - E_p + \frac{1}{2} \sum_{\ell} \lambda_{\ell} \right\} \\
 & \quad - 2 \sum_{\ell m} \{ t_{dp}dp_{\ell}^* + T_{d\ell m} + U_{dp}n_{\ell d, -m} \} \frac{\partial n_{d\ell m}}{\partial E_a} + c.c. \\
 & \quad - 2 \sum_{\mathbf{m}} \{ t_{xy}p_y^*p_x + T_{xy\mathbf{m}} \} \frac{\partial n_{xy\mathbf{m}}}{\partial E_a} + c.c. \\
 & \quad - 2n_d + \frac{1}{N} \left\langle \frac{\partial \tilde{H}}{\partial E_a} \right\rangle. \tag{4.83}
 \end{aligned}$$

Die Ableitung nach einem anderen Matrixelement des Ersatzhamiltonoperators reproduziert wieder analoge Gleichungen. Die direkten Ableitungsbeträge fallen auch hier, wegen der linearen Abhängigkeit des Hamiltonoperators von den Erwartungswerten, durch den letzten Term heraus:

$$\frac{1}{N} \left\langle \frac{\partial \tilde{H}}{\partial E_a} \right\rangle = 2n_a \tag{4.84}$$

Da die Ableitungen der Erwartungswerte als Funktion der Parameter x_{ν} linear unabhängig sind, müssen die Ausdrücke in den Klammern $\{ \dots \}$ verschwinden. Man erhält so den ersten Teil der Selbstkonsistenzgleichungen:

$$E_d = \lambda_d + \epsilon_d + 8U_{dp}n_p \tag{4.85}$$

$$E_p = \lambda_{\ell} + \epsilon_p + 4U_{dp}n_d \tag{4.86}$$

$$T_{d\ell m} = -t_{dp}dp_{\ell}^* - U_{dp}n_{\ell d, -m} \tag{4.87}$$

$$T_{xy\mathbf{m}} = -t_{xy}p_y^*p_x \tag{4.88}$$

An den ersten zwei Gleichungen erkennt man, dass die Slave-Boson-Potentiale λ_a reell sein müssen. Diese ersetzen die schwachen lokalen Wechselwirkungen des letzten Abschnitts. Aus dem Verschwinden des Imaginärteils der Potentiale der Sauerstofforbitale folgt, dass diese unabhängig von der Position innerhalb der Einheitszelle sein müssen:

$$\lambda_p := \lambda_x = \lambda_y$$

Nach diesen Potentialen und nach dem chemischen Potential μ muss nun zusätzlich abgeleitet werden. Durch sie erhält man sowohl die Slave-Boson-Zwangsbedingung als auch die Nebenbedingung der Teilchenzahl (vgl. (4.49))

$$1 = 2n_d + |d|^2, \quad (4.89)$$

$$2 = 4n_p + \sum_{\ell} |p_{\ell}|^2, \quad (4.90)$$

$$(1 + \delta) = 2n_d + 4n_p. \quad (4.91)$$

Damit die Hilfsbosonen kondensieren, muss das Freie-Energie-Funktional an der Stelle der Ordnungsparameter d und p_{ℓ} minimal sein. Es kommen hier also auch Ableitungen nach diesen Parametern hinzu. Sie ergeben

$$0 = -2t_{dp} \sum_{\ell \mathbf{m}} p_{\ell}^* n_{d\ell \mathbf{m}} + \lambda_d d^*, \quad (4.92)$$

$$0 = -2t_{dp} d^* \sum_{\mathbf{m}} n_{xd, -\mathbf{m}} - 2t_{xy} p_y^* \sum_{\mathbf{m}} n_{xy \mathbf{m}} + \lambda_p p_x^*, \quad (4.93)$$

$$0 = -2t_{dp} d^* \sum_{\mathbf{m}} n_{yd, -\mathbf{m}} - 2t_{xy} p_x^* \sum_{\mathbf{m}} n_{yx, -\mathbf{m}} + \lambda_p p_y^*. \quad (4.94)$$

Durch deren Realteil können nun einfach die Slave-Boson-Potentiale λ_d , λ_p berechnet werden, während der Imaginärteil die Ladungserhaltung auf den Kupfer- und ℓ' -Sauerstoffplätzen angibt (vgl. (4.23) und Abb. 4.10). Um diese Erhaltungssätze zu erkennen, müssen die letzten Gleichungen mit den jeweiligen Ordnungsparametern der Bo-

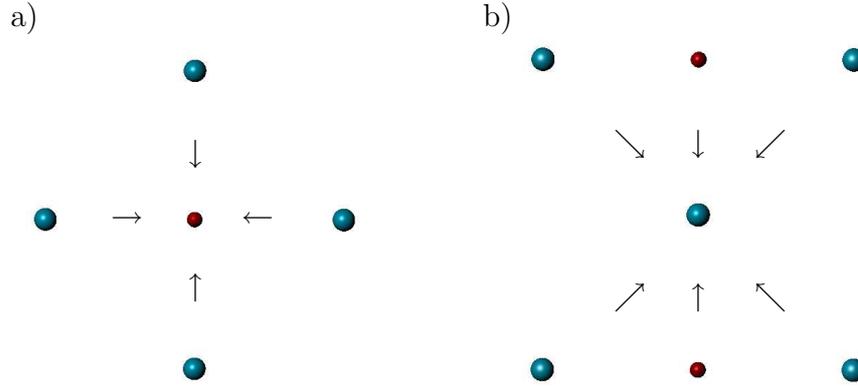


Abbildung 4.10: Die ankommenden Ströme auf einem Kupferplatz (a) bestehen aus einzelnen Strömen, die von Kupfer- zu Sauerstoffatomen fließen, während solche eines Sauerstoffplatzes (b) zusätzlich die von Sauerstoff-Sauerstoff-Strömen beinhalten.

sekondensation multipliziert werden, durch deren Ableitung sie entstanden sind:

$$\begin{aligned}
 0 &= 2t_{dp} \sum_{\ell \mathbf{m}} \text{Im} dp_{\ell}^* n_{d\ell \mathbf{m}} \\
 &= t_{dp} \sum_{\ell \mathbf{m} \sigma} \text{Im} \langle c_{d\mathbf{i}\sigma}^{\dagger} c_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} \rangle \\
 &= \sum_{\ell \mathbf{m}} J_{d\ell \mathbf{m}} \\
 &= -\frac{\partial n_d}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{4.95}$$

$$\begin{aligned}
 0 &= 2t_{dp} \sum_{\mathbf{m}} \text{Im} p_{\ell} d^* n_{\ell d, -\mathbf{m}} + (-1)^{\ell} 2t_{xy} \sum_{\mathbf{m}} \text{Im} p_x p_y^* n_{xy \mathbf{m}} \\
 &= \sum_{\mathbf{m}} J_{\ell d, -\mathbf{m}} + (-1)^{\ell} \sum_{\mathbf{m}} J_{xy \mathbf{m}} \\
 &= -\frac{\partial n_p}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{4.96}$$

4.3.2 Allgemeine Eigenschaften der Selbstkonsistenzgleichungen

Wir betrachten nun die beliebige Phasenwahl zwischen Hilfsfermionen und -bosonen. Dazu wenden wir die Transformation

$$\begin{aligned}
 d &\rightarrow d e^{i\phi_d}, \\
 p_{\ell} &\rightarrow p_{\ell} e^{i\phi_{\ell}}, \\
 d_{\mathbf{i}\sigma} &\rightarrow d_{\mathbf{i}\sigma} e^{i\phi_d}, \\
 p_{\ell \mathbf{i}\sigma} &\rightarrow p_{\ell \mathbf{i}\sigma} e^{i\phi_{\ell}}
 \end{aligned} \tag{4.97}$$

(vgl. (3.22)) auf die Selbstkonsistenzgleichungen (4.85) - (4.94) an. Die in diesen Gleichungen vorkommenden Erwartungswerte ändern sich dadurch zu

$$\begin{aligned} n_{d\ell\mathbf{m}} &\rightarrow n_{d\ell\mathbf{m}} e^{i(\phi_\ell - \phi_d)}, \\ n_{xy} &\rightarrow n_{xy} e^{i(\phi_y - \phi_x)} \end{aligned} \quad (4.98)$$

Damit der transformierte Ersatzhamiltonoperator

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \sum_{a\mathbf{i}\sigma} E_a \hat{n}_{a\mathbf{i}\sigma} + \sum_{\ell\mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} T_{d\ell\mathbf{m}} e^{i(\phi_\ell - \phi_d)} d_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger p_{\ell, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} \\ &+ \sum_{\mathbf{i}\mathbf{m}\sigma} T_{xy\mathbf{m}} e^{i(\phi_y - \phi_x)} p_{x\mathbf{i}\sigma}^\dagger p_{y, \mathbf{i}-\mathbf{m}, \sigma} + h.c. \end{aligned} \quad (4.99)$$

invariant bleibt, müssen sich seine Matrixelemente zu

$$\begin{aligned} E_a &\rightarrow E_a, \\ T_{d\ell\mathbf{m}} &\rightarrow T_{d\ell\mathbf{m}} e^{-i(\phi_\ell - \phi_d)}, \\ T_{xy} &\rightarrow T_{xy} e^{-i(\phi_y - \phi_x)} \end{aligned} \quad (4.100)$$

transformieren. Da die Transformation weder eine Auswirkung auf die Besetzungszahlen noch auf die diagonalen Matrixelemente hat, bleiben die Gleichungen (4.85) und (4.86) sowie die der Nebenbedingungen (4.89) - (4.91) unverändert. Auch die Stromerhaltung (4.92) - (4.94) verändert sich nicht (s. Diskussion zu (3.22)). Die Gleichungen der Nebendiagonalelemente werden durch die Transformation nur um einen komplexen Faktor ergänzt:

$$\begin{aligned} T_{d\ell\mathbf{m}} &= -t_{dp} d p_\ell^* - U_{dp} n_{\ell d, -\mathbf{m}} \\ &\rightarrow T_{d\ell\mathbf{m}} e^{-i(\phi_\ell - \phi_d)} = -t_{dp} d p_\ell^* e^{-i(\phi_\ell - \phi_d)} - U_{dp} n_{\ell d, -\mathbf{m}} e^{-i(\phi_\ell - \phi_d)} \\ T_{xy\mathbf{m}} &= -t_{xy} p_y^* p_x \\ &\rightarrow T_{xy\mathbf{m}} e^{-i(\phi_y - \phi_x)} = -t_{xy} p_y^* p_x e^{-i(\phi_y - \phi_x)} \end{aligned} \quad (4.101)$$

Diese Symmetrie wird also durch imaginäre Matrixelemente des Ersatzhamiltonoperators nicht gebrochen. Wir wählen daher im folgenden die Bosonen rein reell:

$$\begin{aligned} d &= |d| \\ p &= |p_x| = |p_y| \end{aligned} \quad (4.102)$$

Die Erwartungswerte können also, wie in Kapitel 4.1 beschrieben, ausgewertet werden. Dadurch ist die rechte Seite der vierten Selbstkonsistenzgleichung (4.88) reell und somit $T_{xy\mathbf{m}}$ unabhängig von der Richtung \mathbf{m} des Sauerstoff-Sauerstoff-Hüpfens. Die für Flussphasen entscheidende Gleichung ist also die Selbstkonsistenzgleichung für $T_{d\ell\mathbf{m}}$ (4.87).

Wir wollen nun die Abhängigkeit des Betrages der dritten Selbstkonsistenzgleichung (4.87) von der Richtung des Hüpfens betrachten:

$$T_{dp}^2 = |T_{d\ell\mathbf{m}}|^2 = t_{dp}^2 d^2 p^2 + U_{dp}^2 n_{dp}^2 + 2t_{dp} d p U_{dp} n_{dp} \cos \alpha_{\ell\mathbf{m}}, \quad (4.103)$$

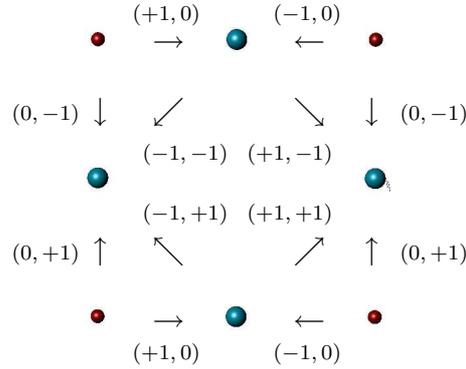


Abbildung 4.11: Das d-p-Hüpfen entlang der Achsen ergibt $\mathbf{m} = \mathbf{e}_\ell$, entgegen $\mathbf{m} = -\mathbf{e}_\ell$. Auch die Werte von \mathbf{m} für das x-y-Hüpfen sind für die Verwendung in Kapitel 4.4 angegeben.

Diese sollte nach unseren Symmetrierelationen (3.42) unabhängig von ℓ und \mathbf{m} sein. Die Abhängigkeit der Phase der Hüpfparameter $\alpha_{\ell\mathbf{m}}$ von diesen Parametern darf also nur ein Wechsel des Vorzeichens sein. Es ist deshalb naheliegend, diese Phase durch gleich bzw. entgegen gerichtete Anteile auszudrücken. Mit der Transformation

$$\begin{pmatrix} \alpha^0 \\ \alpha^I \\ \alpha^{II} \\ \alpha^{III} \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{x(1,0)} \\ \alpha_{y(0,1)} \\ \alpha_{x(-1,0)} \\ \alpha_{y(0,-1)} \end{pmatrix} \quad (4.104)$$

lässt sich die Phase wie folgt schreiben (vgl. (4.34)):

$$\alpha_{\ell\mathbf{m}} = \alpha^0 + (-1)^\ell \alpha^I + m_\ell \alpha^{II} + (-1)^\ell m_\ell \alpha^{III} \quad (4.105)$$

Der Faktor m_ℓ ist dabei für d-p-Hüpfen entlang der ℓ -Richtung $+1$, entgegen -1 , andernfalls 0 (vgl. Abb. 4.11). Die Unabhängigkeit des Betrags der Hüpfparameter $T_{d\ell\mathbf{m}}$ im Ersatzhamiltonoperator von dessen Richtung führt also zur Trennung der Phasen, die durch den oberen Index in der letzten Gleichung referenziert sind. Wie schon am Anfang des Kapitels bezeichnen wir diese als Θ -Phasen. Durch die Selbstkonsistenzgleichungen überträgt sich die Symmetrie der Phasen auch auf die Matrixelemente der Hüpfparameter. Sie unterteilen den Lösungsraum somit in Strommuster, von denen nur je eines gleichzeitig existieren kann.

Diese Strommuster wurden schon in Abb. 2.11 visualisiert. Dabei entsprechen die Muster Θ_I und Θ_{II} denen von C. M. Varma in [4] untersuchten. Θ_{III} ergibt sich aus dem Strommuster Θ_{II} durch Drehung des Koordinatensystems um $\pi/2$. Das 0. Strommuster verletzt allerdings bei endlichen Strömen die Ladungserhaltung (4.96):

$$0 = 8t_{dp}dp|n_{d\ell\mathbf{m}}| \sin \alpha^0 \quad (4.106)$$

Wir betrachten daher im folgenden nur die Strommuster Θ_I und Θ_{II} . Für Θ_I gilt die folgende Phasenverteilung:

$$\alpha_{x(1,0)} = \alpha_{x(-1,0)} = -\alpha_{y(0,1)} = -\alpha_{y(0,-1)} \quad (4.107)$$

während sich für das Strommuster Θ_{II}

$$\alpha_{x(1,0)} = -\alpha_{x(-1,0)} = \alpha_{y(0,1)} = -\alpha_{y(0,-1)} \quad (4.108)$$

ergibt.

Berechnet man die Slave-Boson-Potentiale λ_a aus der Bedingung für Bosekondensation (4.92) - (4.94), so lauten die Selbstkonsistenzgleichungen mit den in diesem Abschnitt eingeführten Vereinfachungen:

$$1 + \delta = 2n_d + 4n_p \quad (4.109)$$

$$E_d = 8t_{dp} \frac{p}{d} \operatorname{Re} n_{dx(1,0)} + \epsilon_d + 8U_{dp} n_p \quad (4.110)$$

$$E_p = 4t_{dp} \frac{d}{p} \operatorname{Re} n_{dx(1,0)} + 4t_{xy} (\operatorname{Re} n_{xy(-1,1)} + \operatorname{Re} n_{xy(1,1)}) + \epsilon_p + 4U_{dp} n_d \quad (4.111)$$

$$T_{d\ell\mathbf{m}} = -t_{dp} dp - U_{dp} n_{\ell d, -\mathbf{m}} \quad (4.112)$$

$$T_{xy\mathbf{m}} = -t_{xy} p^2 \quad (4.113)$$

$$d^2 = 1 - 2n_d \quad (4.114)$$

$$p^2 = 1 - 2n_p \quad (4.115)$$

Für Θ_I stellt die Ladungserhaltung (4.93) eine zusätzliche Bedingung

$$0 = 4t_{dp} d \operatorname{Im} n_{dx(1,0)} + 8t_{xy} p \operatorname{Im} n_{xy(1,1)} \quad (4.116)$$

dar. Wir bekamen sie, da wir zunächst verschiedene Ordnungsparameter für die Bosekondensation auf x - und y -Sauerstoffplätzen annahmen (vgl. (3.42) mit (4.102)). Postuliert man bereits im Ansatz rein reelle Ordnungsparameter, sind also die beiden p -artigen Ordnungsparameter gleich, so erhält man in den Gleichungen eine weitere Summe über die verschiedenen Orbitale. Statt der lokalen Stromerhaltung auf den Sauerstoffgitterplätzen ergibt sich dann eine Stromerhaltung für die gesamte Einheitszelle. Diese ist mit Ausnahme der Θ_0 -Phase immer erfüllt. Die lokale Stromerhaltung muss dadurch zusätzlich postuliert werden.

Gibt man den Ordnungsparametern ebenfalls einen Index \mathbf{m} , der die Richtung des Hüpfens im Hamiltonoperator (3.46) beschreibt, so fallen in den Gleichungen der Ladungserhaltung die \mathbf{m} -Summen weg, da nun nach den Parametern mit unterschiedlicher Richtung auch getrennt abgeleitet werden muss. Auch für den Θ_{II} -Fall würde sich dann eine zusätzliche Bedingung ergeben. Diese drückt dann die makroskopische Ladungserhaltung in der Θ_{II} -Phase aus.

4.3.3 Analytische Behandlung der Θ_I -Phase

In diesem Abschnitt werden wir nur die Θ_I -Phase behandeln. Wie sich herausstellen wird, existiert bei dieser eine einfache Abhängigkeit zwischen dem Real- und Imaginärteil des d - p

und dem Imaginärteil des x-y-Hüpfwartungswerts. Dadurch wird sich die Stromerhaltung stark vereinfachen, woraus starke Einschränkungen an den d-p-Erwartungswert folgen.

Wegen der Unabhängigkeit der Erwartungswerte von \mathbf{m} können wir den Real- und Imaginärteil des d-p-Hüpfwartungswerts aus (4.15) wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} n_{dx(1,0)} &= \frac{2T_{dp}}{N} \sum_{\mathbf{nk}} \cos k_x \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{nk}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \\ &\quad \cdot \left((\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - E_p) \cos k_x + 4T_{xy} \cos k_x \cos^2 k_y \right) \cos \phi^I \\ &= T_{dp} \mathcal{I}_T^+ \cos \phi^I \end{aligned} \quad (4.117)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} n_{dx(1,0)} &= \frac{2T_{dp}}{N} \sum_{\mathbf{nk}} \cos k_x \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{nk}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \\ &\quad \cdot \left((\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - E_p) \cos k_x - 4T_{xy} \cos k_x \cos^2 k_y \right) \sin \phi^I \\ &= T_{dp} \mathcal{I}_T^- \sin \phi^I \end{aligned} \quad (4.118)$$

Die dabei auftretenden Integrale \mathcal{I}_T^+ und \mathcal{I}_T^- sind durch die Anregungsenergien der Hilfsteilchen nur schwach von der Phase des d-p-Matrixelements ϕ^I abhängig. Mit diesen kann man auch den Imaginärteil des Sauerstoff-Sauerstoff-Hüpfwartungswerts ausdrücken:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} n_{xy} &= \frac{4T_{dp}^2}{N} \sum_{\mathbf{nk}} \cos^2 k_x \cos^2 k_y \frac{f(\mathcal{E}_{\mathbf{nk}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{\mathbf{nk}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \sin 2\phi^I \\ &= \frac{T_{dp}^2}{2T_{xy}} \left(\mathcal{I}_T^+ - \mathcal{I}_T^- \right) \sin \phi^I \cos \phi^I \end{aligned} \quad (4.119)$$

Führt man diese Integrale auch in der Darstellung der Selbstkonsistenzgleichung des d-p-Matrixelements $T_{dx(1,0)}$ (4.112) ein, so lauten diese

$$T_{dp} \cos \phi^I = -t_{dp} dp - U_{dp} T_{dp} \mathcal{I}_T^+ \cos \phi^I, \quad (4.120)$$

$$T_{dp} \sin \phi^I = U_{dp} T_{dp} \mathcal{I}_T^- \sin \phi^I \quad (4.121)$$

bzw. nach kurzem Umstellen

$$T_{dp} \left(1 + U_{dp} \mathcal{I}_T^+ \right) \cos \phi^I = -t_{dp} dp, \quad (4.122)$$

$$T_{dp} \left(1 - U_{dp} \mathcal{I}_T^- \right) \sin \phi^I = 0. \quad (4.123)$$

Mit deren Hilfe vereinfacht sich die Stromerhaltung zu

$$\begin{aligned} 0 &= t_{dp} dp T_{dp} \mathcal{I}_T^- \sin \phi^I + 2t_{xy} p^2 \frac{T_{dp}^2}{2T_{xy}} \left(\mathcal{I}_T^+ - \mathcal{I}_T^- \right) \sin \phi^I \cos \phi^I \\ &= T_{dp}^2 \left(\left(1 + U_{dp} \mathcal{I}_T^+ \right) \cos \phi^I \mathcal{I}_T^- \sin \phi^I + \left(\mathcal{I}_T^+ - \mathcal{I}_T^- \right) \sin \phi^I \cos \phi^I \right) \\ &= T_{dp}^2 \left(1 + U_{dp} \mathcal{I}_T^- \right) \mathcal{I}_T^+ \sin \phi^I \cos \phi^I \end{aligned} \quad (4.124)$$

Deutlich zu erkennen ist die stromlose Lösung für $\phi^I = 0$ bzw. π :

$$T_{dp}^0 = \mp \frac{t_{dp} dp}{1 + U_{dp} \mathcal{I}_T^+} \quad (4.125)$$

Auch eine stromlose Lösung mit $T_{dp} = 0$ und $d = 0$ existiert. Deren freie Energie am Minimum liegt allerdings stets über der vorherigen. Nach (4.124) muss für eine Lösung mit Strömen wegen der Stromerhaltung der d-p-Hüpfervorgangswert $n_{d\ell m}$ rein imaginär sein. Dies kann entweder durch ein verschwindendes \mathcal{I}_T^+ oder durch ein rein imaginäres d-p-Matrixelement ($\phi^I = \pm\pi/2$) erfüllt werden. Der Ausdruck in den Klammern von (4.124) kann wegen der Selbstkonsistenzgleichung (4.123) nicht verschwinden.

Der erste Fall tritt ebenfalls nicht auf, da für tiefe Temperaturen \mathcal{I}_T^+ negativ ist. Um dies zu sehen, betrachten wir die bei der Definition auftretenden Summanden:

$$\mathcal{I}_T^+ = \frac{2}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \cos^2 k_x \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \quad (4.126)$$

$$\left(\underbrace{(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p)}_{<0} + \underbrace{4T_{xy} \cos^2 k_y}_{<0} \right)$$

Für sehr tiefe Temperaturen bewirkt die Fermifunktion, dass praktisch nur über das erste Band $n = 1$ summiert wird. Dann ist nach dem Bandschema (s. Abb. 4.2) der erste Term negativ. Der letzte Summand ist durch die Selbstkonsistenzgleichung (4.113) für T_{xy} ebenfalls negativ. Da wir von schwacher Dotierung ausgehen, sind immer leere Sauerstofforbitale verfügbar und somit ist $p \neq 0$. Damit verschwindet das Integral niemals, was sich auch durch die numerische Berechnung ergibt (s. Abb. 4.12) und dieser Fall kann nicht auftreten.

Im Fall eines rein imaginären d-p-Matrixelements muss nach der Selbstkonsistenzgleichung (4.122) der Ordnungsparameter der Bosekondensation auf den Kupferplätzen verschwinden. Dadurch würde kein realer Strom fließen, da dafür auch beide Ordnungsparameter endlich und somit freie Orbitale beim Kupfer und Sauerstoff vorhanden sein müssten:

$$\langle J_{i\ell m}^\sigma \rangle = -2 \frac{e}{\hbar} t_{d\ell m} dp \operatorname{Im} n_{d\ell m} = 0 \quad (4.127)$$

Der Betrag des d-p-Matrixelements muss dann so gewählt sein, dass (4.123) erfüllt ist:

$$\mathcal{I}_T^- = \frac{1}{U_{dp}} \quad (4.128)$$

Dadurch kann der d-p-Hüpfervorgangswert direkt angegeben werden:

$$n_{dx(1,0)} = i \frac{T_{dp}}{U_{dp}} \quad (4.129)$$

Die vorletzte Gleichung ist allerdings nicht einfach erfüllbar, da auch \mathcal{I}_T^- negativ ist: Zerlegen wir dieses Integral analog zu \mathcal{I}_T^+

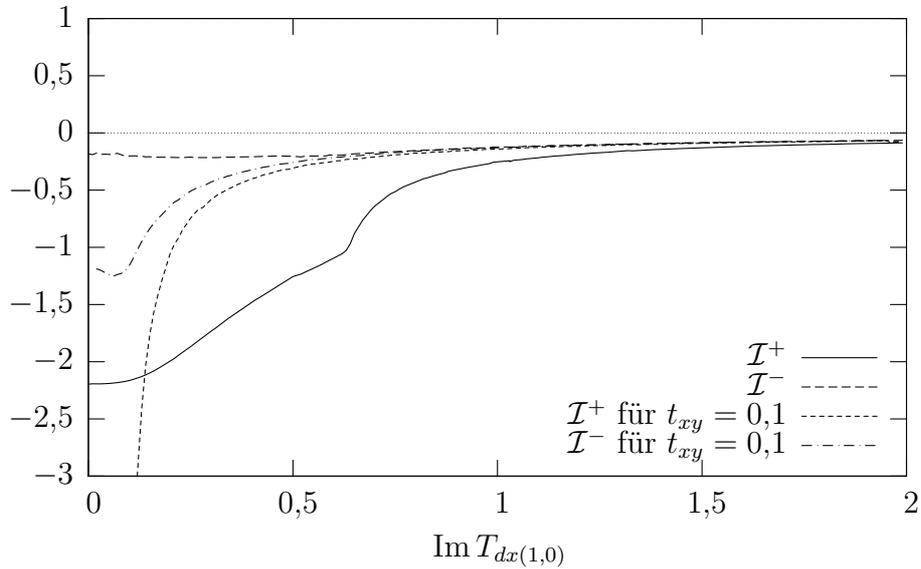


Abbildung 4.12: Löst man die Selbstkonsistenzgleichungen für ein festes, rein imaginäres $T_{dx(1,0)}$, so kann man die Abhängigkeit der Integrale aus (4.126) und (4.130) berechnen. Beide Integrale sind stets negativ.

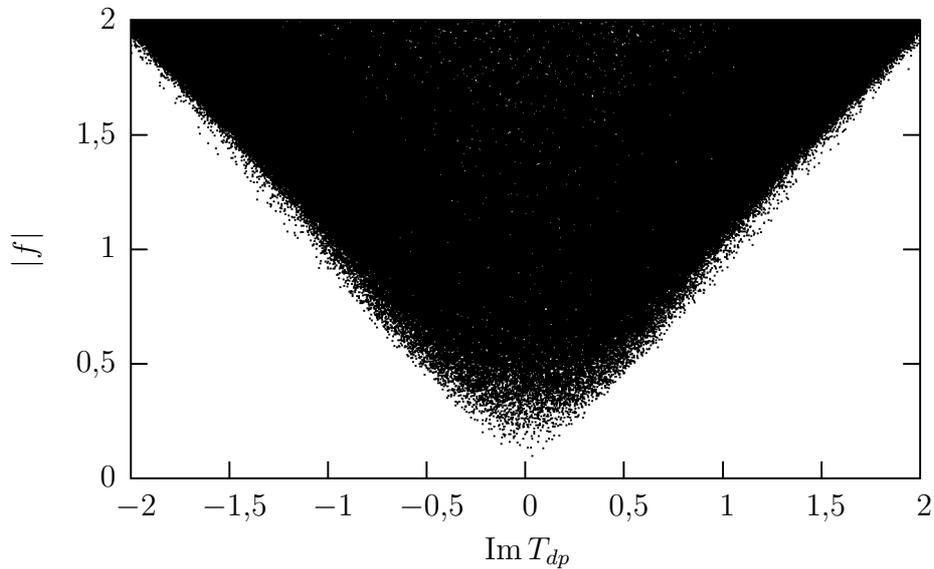


Abbildung 4.13: Die Erfüllung der Selbstkonsistenzgleichungen der Θ_I -Phase (bestimmt wie in Abb. 4.7 beschrieben) zeigt, wie analytisch vorhergesagt, keine Flussphasen.

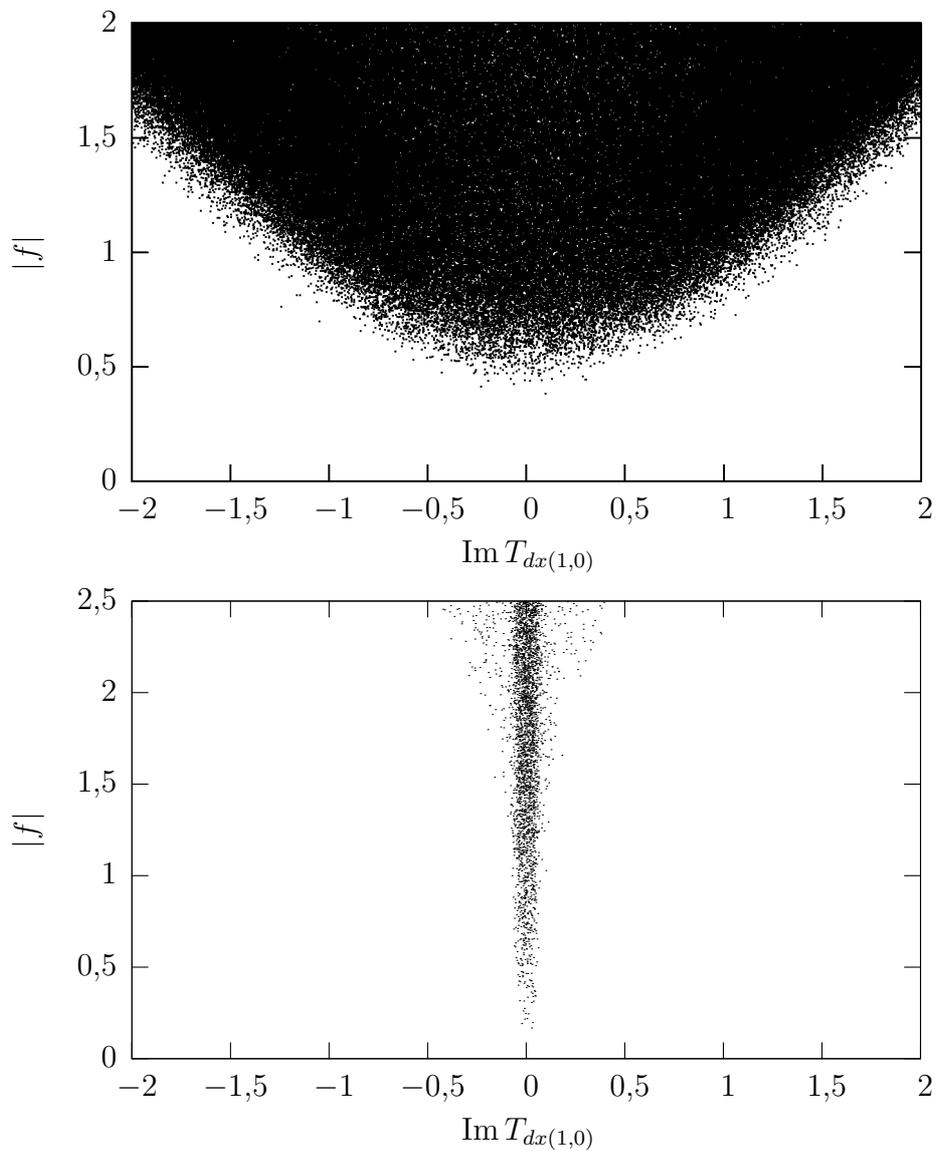


Abbildung 4.14: Auch die numerische Berechnung (s. Abb. 4.7) der Erfüllung der Selbstkonsistenzgleichungen im Θ_I -Fall für unterschiedliche Wechselwirkungen (oben: $U_{dp} = 3$, unten: $U_{dp} = -10$) ergibt keine Flussphasen. Nur die Ausprägung des stromlosen Minimums verändert sich.

$$\mathcal{I}_T^- = \frac{2}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \cos^2 k_x \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})}$$

$$\left(\underbrace{(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p)}_{<0} + \underbrace{4t_{xy}p^2 \cos^2 k_y}_{\gtrsim 0} \right), \quad (4.130)$$

so müsste für eine abstoßende Wechselwirkung der negative erste Summand durch den zweiten überkompensiert werden. Allerdings ist dieser letzte Summand wegen des kleinen t_{xy} -Wertes im Allgemeinen kleiner als der erste Summand, der etwa dem Bandabstand ε entspricht. Löst man für ein gegebenes d-p-Matrixelement die Selbstkonsistenzgleichungen, so ergibt sich für verschiedene Parameter, dass \mathcal{I}_T^- stets negativ ist (s. Abb. 4.12). Auch bei Erhöhung von t_{xy} bleibt dies so, da dieser Parameter auch in die Berechnung der Energie eingeht. Somit ist für den Parameterbereich aus (2.11) keine Lösung mit Strommuster Θ_I möglich. Da wir im Fall kleiner Wechselwirkungen auf die gleichen Selbstkonsistenzgleichungen mit $d = p = 1$ kamen, ist dort, mit zusätzlicher Postulierung der mikroskopischen Stromerhaltung, ebenfalls keine Lösung möglich. Dies zeigt auch die numerische Berechnung der Selbstkonsistenzgleichungen, mit deren Hilfe auch die Untersuchung unwahrscheinlicher Parameter möglich ist (s. Abb. 4.13). Der Einfluss der Wechselwirkung U_{dp} legt dabei nur fest, wie scharf das stromlose Minimum ausgeprägt ist (s. Abb. 4.14).

4.3.4 Betrachtung der Θ_{II} -Phase

Die Lösung von Θ_{II} kann aufgrund der komplizierten Abhängigkeit der Energie von der Phase ϕ^{II} hier nur näherungsweise erfolgen. Wir wollen von der Tight-Binding-Bandstruktur im Fall $\tau_{v\mathbf{k}} = 0$ ausgehen (s. Kapitel 4.1). Bei endlicher d-p-Hybridisierung werden sich, wie dort gezeigt wurde, die Bänder abstoßen und zusätzlich verformen. Wir wollen nun letzteres vernachlässigen und somit diese Hybridisierung in der Energieberechnung über die Brillouinzone mitteln:

$$|\tau_{v\mathbf{k}}|^2 \rightarrow \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} |\tau_{v\mathbf{k}}|^2 = \bar{\tau}_v^2 \quad (4.131)$$

Die erlaubten \mathbf{k} -Werte liegen anähernd dicht und man kann die Summe näherungsweise durch ein Integral ersetzen

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{4\pi^2} \int_{(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})}^{(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})} d^2\mathbf{k} \quad (4.132)$$

und damit diesen Mittelwert leicht berechnen:

$$\begin{aligned}
\bar{\tau}_v^2 &= \frac{T_{dp}^2}{2\pi^2} \int d^2\mathbf{k} \left(\gamma_{x\mathbf{k}}^2 + \gamma_{y\mathbf{k}}^2 + 2v\gamma_{x\mathbf{k}}\gamma_{y\mathbf{k}} \right) \\
&= \frac{2T_{dp}^2}{\pi^2} \int d^2\mathbf{k} \left(\cos^2(k_x + \phi^{II}) + \cos^2(k_y + \phi^{II}) \right. \\
&\quad \left. + v \cos(k_x + \phi^{II}) \cos(k_y + \phi^{II}) \right) \\
&= \frac{2T_{dp}^2}{\pi^2} \int d^2\mathbf{k} \left((\cos^2 k_x + \cos^2 k_y) \cos^2 \phi^{II} + (\sin^2 k_x + \sin^2 k_y) \sin^2 \phi^{II} \right. \\
&\quad \left. + v \cos k_x \cos k_y \cos^2 \phi^{II} \right) \\
&= 2T_{dp}^2 \left(1 + v \frac{8}{\pi^2} \cos^2 \phi^{II} \right) \tag{4.133}
\end{aligned}$$

Bei der Anwendung der Additionstheoreme im dritten Schritt wurden nur achsensymmetrische Funktionen um $\phi^{II} = 0$ mitgenommen, da punktsymmetrische Funktionen zum Ursprung durch das Integral verschwinden. Die Mittelung der übrigen Terme konnte durch Standardintegrale berechnet werden. Dadurch sind die Energien der Hilfsteilchen nach (4.17) achsensymmetrisch und somit verschwinden auch bei der Berechnung des Real- und Imaginärteils des d-p-Hüpfervwartungswerts die punktsymmetrischen Funktionen:

$$\begin{aligned}
\text{Re } n_{dx(1,0)} &= \frac{2T_{dp}}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \cos k_x \\
&\quad \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p) \cos(k_x + \phi^{II}) + 4T_{xy} \cos k_x \cos k_y \cos(k_y + \phi^{II}) \right) \\
&= \frac{2T_{dp}}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \\
&\quad \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p) \cos^2 k_x \cos \phi^{II} + 4T_{xy} \cos^2 k_x \cos^2 k_y \cos \phi^{II} \right) \\
&= T_{dp} \mathcal{I}_T^+ \cos \phi, \tag{4.134}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Im } n_{dx(1,0)} &= \frac{2T_{dp}}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \sin k_x \\
&\quad \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p) \cos(k_x + \phi^{II}) + 4T_{xy} \cos k_x \cos k_y \cos(k_y + \phi^{II}) \right) \\
&= \frac{2T_{dp}}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p) \sin^2 k_x \sin \phi^{II} \\
&= T_{dp} \mathcal{I}_T^s \sin \phi. \tag{4.135}
\end{aligned}$$

Es können also analoge Integrale wie im Θ_I -Fall definiert werden. Im Fall des Realteils ist dieses sogar identisch. So erhält man für die Selbstkonsistenzgleichung des d-p-Matrixelements

$$T_{dp} \left(1 + U_{dp} \mathcal{I}_T^+ \right) \cos \phi^{II} = -t_{dp} dp, \tag{4.136}$$

$$T_{dp} \left(1 - U_{dp} \mathcal{I}_T^s \right) \sin \phi^{II} = 0. \tag{4.137}$$

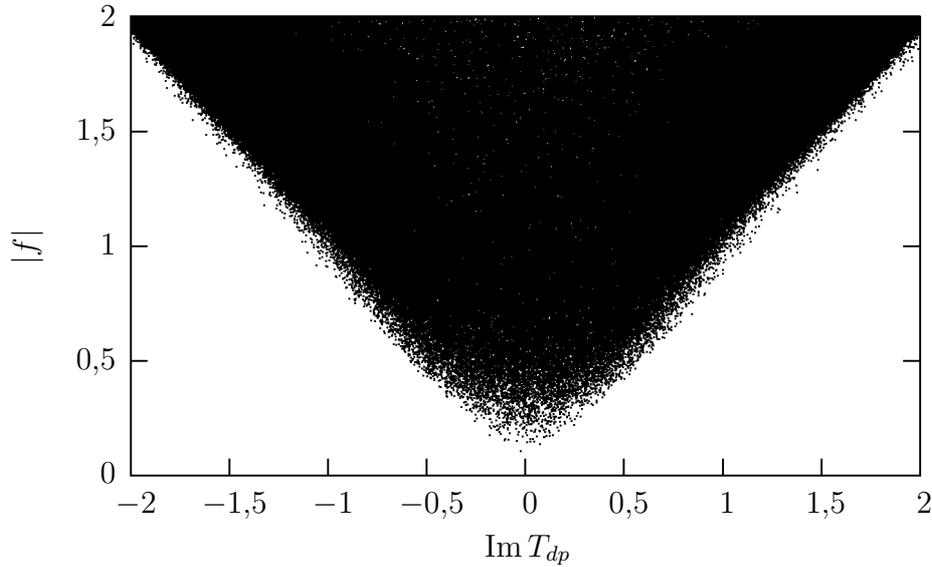


Abbildung 4.15: Die numerische Berechnung (vgl. Abb. 4.7) der Selbstkonsistenzgleichungen im Θ_{II} -Fall bestätigt die durch die Näherung gefundene Lösung: Auch hier existieren keine Flussphasen.

Wieder erkennt man leicht die stromlose Lösung für $\phi^{II} = 0, \pi$. Für eine Flussphase müsste nach der letzten Gleichung

$$\mathcal{I}_T^s = \frac{1}{U_{dp}} \quad (4.138)$$

sein, was analog zum Θ_I -Fall durch die Bandstruktur nicht möglich ist: Für tiefe Temperaturen wird nur über das erste Band summiert. Dieses liegt jedoch immer tiefer als E_p , was dazu führt, dass \mathcal{I}_T^s immer negativ ist. Auch hier unterstützt die Numerik die gefundene Näherungslösung (s. Abb. 4.15): Es existiert keine Lösung, bei der Ströme fließen.

4.4 Einfluss weiterer Wechselwirkungen

Wir wollen nun die Wechselwirkung zwischen Sauerstofforbitalen sowie die erste Ordnung in der Entwicklung nach t/U betrachten. Beide Effekte führen auf ähnliche Resultate. Der für die Sauerstoff-Sauerstoff-Wechselwirkung zusätzlich benötigte Anteil des Hamiltonoperators ist durch (3.47)

$$H_{O-O} = U_{xy} \sum_{\mathbf{im}\sigma\sigma'} \hat{n}_{x\mathbf{i}\sigma} \hat{n}_{y,\mathbf{i}-\mathbf{m},\sigma'} \quad (4.139)$$

gegeben, während die erste Ordnung nach (3.48) dem Hamiltonoperator die Terme

$$\begin{aligned} H_{1Ord} = & -J_d \sum_{\ell\mathbf{im}\sigma\sigma'} \sigma\sigma' d_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{i}\sigma'} p_{\ell,\mathbf{i}-\mathbf{m},-\sigma}^\dagger p_{\ell,\mathbf{i}-\mathbf{m},-\sigma'} \\ & - J_p \sum_{\mathbf{im}\sigma\sigma'} \sigma\sigma' p_{x\mathbf{i}\sigma}^\dagger p_{x\mathbf{i}\sigma'} p_{y,\mathbf{i}-\mathbf{m},-\sigma}^\dagger p_{y,\mathbf{i}-\mathbf{m},-\sigma'} \end{aligned} \quad (4.140)$$

hinzufügt, wobei die Austauschkonstanten

$$J_d = t_{dp}^2 \left(\frac{1}{U_d - \varepsilon + 2U_{dp}} + \frac{1}{U_p + \varepsilon + 2U_{dp}} \right), \quad (4.141)$$

$$J_p = 2 \frac{t_{pp}^2}{U_p} \quad (4.142)$$

durch die Modellparameter bestimmt sind. Für die Ableitung der Selbstkonsistenzgleichungen wurde in (4.82) der Erwartungswert des Hamiltonoperators benötigt. Der Erwartungswert der hier betrachteten Ergänzungen des Hamiltonoperators lautet mit Hilfe des Abzählens der Spinrichtungen und der Summen über die nächsten Nachbarn

$$\langle H_{O-O} \rangle = 2NU_{xy} \left(8n_p^2 - \sum_{\mathbf{m}} n_{yx, -\mathbf{m}} n_{xy\mathbf{m}} \right) \quad (4.143)$$

sowie

$$\begin{aligned} \langle H_{1Ord} \rangle = & -2NJ_d \left(4n_d n_p + \sum_{\ell\mathbf{m}} n_{\ell d, -\mathbf{m}} n_{d\ell\mathbf{m}} \right) \\ & - 2NJ_p \left(4n_p^2 + \sum_{\mathbf{m}} n_{yx, -\mathbf{m}} n_{xy\mathbf{m}} \right). \end{aligned} \quad (4.144)$$

Durch den spinabhängigen Faktor im Hamiltonoperator der ersten Ordnung werden dabei nun die verschiedenen Kontraktionen im Gegensatz zu Wechselwirkungen in nullter Ordnung addiert. Die Ableitungen der Korrekturen zu der Differenz der Hamiltonoperatoren liefert, ähnlich wie die d-p-Wechselwirkung in (4.83), nur Änderungen bei der Ableitung der Erwartungswerte. Die Gleichungen der Erhaltungsgrößen sind jedoch von keiner Änderung betroffen. Damit ergeben sich die folgenden Selbstkonsistenzgleichungen:

$$1 + \delta = 2n_d + 4n_p \quad (4.145)$$

$$E_d = 8t_{dp} \operatorname{Re} \frac{p_x^*}{d^*} n_{dx(1,0)} + \epsilon_d + 4(2U_{dp} - J_d)n_p \quad (4.146)$$

$$\begin{aligned} E_p = & 4t_{dp} \operatorname{Re} \frac{d^*}{p_x^*} n_{dx(1,0)} + 4t_{xy} \left(\operatorname{Re} \frac{p_y^*}{p_x^*} n_{xy(-1,1)} + \operatorname{Re} n_{xy(1,1)} \right) \\ & + \epsilon_p + 2(2U_{dp} - J_d)n_d + 4(2U_{xy} - J_p)n_p \end{aligned} \quad (4.147)$$

$$T_{d\ell\mathbf{m}} = -t_{dp} d p_{\ell}^* - (U_{dp} + J_d) n_{\ell d, -\mathbf{m}} \quad (4.148)$$

$$T_{xy\mathbf{m}} = -t_{xy} p_y^* p_x - (U_{xy} + J_p) n_{yx, -\mathbf{m}} \quad (4.149)$$

$$d^2 = 1 - 2n_d \quad (4.150)$$

$$p^2 = 1 - 2n_p \quad (4.151)$$

Für die Θ_I -Phase kommt zusätzlich die Erhaltung des Mikrostroms

$$0 = t_{dp} \operatorname{Im} d^* p_x n_{dx(1,0)} + 2t_{xy} \operatorname{Im} p_y^* p_x n_{xy(1,1)} \quad (4.152)$$

hinzu. J_d renormalisiert in (4.148) nur die d-p-Wechselwirkung. Die Betrachtungen des letzten Kapitels bleiben dafür also weiterhin gültig. J_d erhöht nach (4.141) dabei die effektive Wechselwirkung für diese Gleichung, da $U_d > \varepsilon$. Hingegen bewirken sowohl J_p als auch U_{xy} , dass $T_{xy\mathbf{m}}$ nicht mehr reell ist. Dadurch nehmen die Formfaktoren aus (4.4) und (4.5) eine komplexere Gestalt an:

$$\gamma_{\ell\mathbf{k}} = 2 \cos \left(k_\ell + \phi^{II} + (-1)^\ell \phi^{III} \right) e^{i(\phi^0 + (-1)^\ell \phi^I)}, \quad (4.153)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = 2 \left(\cos \left(k_x + k_y + \phi_{xy}^{II} \right) e^{-i\phi_{xy}^{IV}} + \cos \left(k_x - k_y + \phi_{xy}^{III} \right) e^{i\phi_{xy}^{IV}} \right) e^{i\phi_{xy}^I} \quad (4.154)$$

mit

$$T_{xy\mathbf{m}} = T_{xy} e^{i(\phi_{xy}^I + \mathbf{m}e_{x+y}\phi_{xy}^{II} + \mathbf{m}e_{x-y}\phi_{xy}^{III} + m_x m_y \phi_{xy}^{IV})}. \quad (4.155)$$

Da beim Hüpfen von Sauerstofforbitalen zu Sauerstofforbitalen \mathbf{m} nur die Werte $(+1, +1)$, $(+1, -1)$, $(-1, +1)$, $(-1, -1)$ annimmt, sind die Faktoren vor den verschiedenen Phasen entweder -1 , $+1$ oder 0 (vgl. Abb. 4.11). Die Zuordnung der Indizierung zur Θ_{II} - und Θ_{III} -Phase wurde dabei, wie weiter unten gezeigt wird, entsprechend einer gleich oder entgegen gerichteten Verschiebung der Brillouinzone bezüglich der beiden Koordinaten vorgenommen. Durch die Auswirkung auf die komplexe Phase der Formfaktoren kann die Verbindung zur Θ_I -Phase kenntlich gemacht werden: Sie folgt aus der Stromerhaltung, da diese die einzige Phase ist, für die (4.94) nicht verschwindet. Die Zuordnung entspricht bis auf die Θ_{IV} -Phase den in Abb. 2.11 zur Erhaltung des Mikrostroms eingezeichneten Strömen. Die Einteilung der Phasen für die Matricelemente überträgt sich wieder durch die Selbstkonsistenzgleichungen auf die Hüpfwartungswerte. Bezeichnet $\alpha_{xy\mathbf{m}}$ die Phase des x-y-Hüpfwartungswerts $n_{xy\mathbf{m}} = n_{xy} e^{i\alpha_{xy\mathbf{m}}}$, so gehen wir auch hier auf gleich und entgegen gerichtete Phasen

$$\begin{pmatrix} \alpha_{xy}^I \\ \alpha_{xy}^{II} \\ \alpha_{xy}^{III} \\ \alpha_{xy}^{IV} \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{xy(+1,+1)} \\ \alpha_{xy(-1,-1)} \\ \alpha_{xy(+1,-1)} \\ \alpha_{xy(-1,+1)} \end{pmatrix} \quad (4.156)$$

über. Aus dem gleichen Betrag von $T_{xy\mathbf{m}}$ für jedes Sauerstoff-Sauerstoff-Hüpfen folgt weiterhin, dass sich wie in (4.103) die Sauerstoff-Sauerstoff-Phasen nicht mischen:

$$|T_{xy\mathbf{m}}|^2 = t_{xy}^2 p^4 + (U_{xy} + J_p)^2 n_{xy}^2 + 2t_{xy} p^2 (U_{xy} + J_p) n_{xy} \cos \alpha_{xy\mathbf{m}} \quad (4.157)$$

Die Θ_0 -Phase, die aus der Invarianz des Betrags des d-p-Matricelements unter Drehungen von $\pi/2$ abgeleitet werden kann, verletzt immer noch die Stromerhaltung. Sie kann daher wie im Kapitel 4.3.2 ausgeschlossen werden.

In der Θ_I -Phase kann nun die neue Phase des x-y-Matrixelements durch die Transformation

$$\begin{aligned} p_{\ell i} &\rightarrow p_{\ell i} e^{(-1)^{\ell} \frac{1}{2} i \phi_{xy}^I} \\ p_{\ell i \sigma} &\rightarrow p_{\ell i \sigma} e^{(-1)^{\ell} \frac{1}{2} i \phi_{xy}^I} \end{aligned} \quad (4.158)$$

eliminiert werden:

$$\begin{aligned} T_{dp} e^{(-1)^{\ell} i \phi^I} &\rightarrow T_{dp} e^{(-1)^{\ell} i (\phi^I + \frac{1}{2} \phi_{xy}^I)} \\ T_{xy} e^{i \phi_{xy}^I} &\rightarrow T_{xy} \end{aligned} \quad (4.159)$$

Da diese Transformation nur eine Phasenverschiebung zwischen Fermionen und Bosonen ist, verändern sich nur die Gleichungen (4.148) und (4.149) (vgl. Kapitel 4.3.2):

$$\begin{aligned} T_{dx\mathbf{m}} &= -t_{dp} dp e^{i \phi_{xy}^I} - (U_{dp} + J_d) n_{\ell d, -\mathbf{m}} \\ T_{xy\mathbf{m}} &= -t_{xy} p^2 e^{-2i \phi_{xy}^I} - (U_{xy} + J_p) n_{yx, -\mathbf{m}} \end{aligned} \quad (4.160)$$

Dabei sind wir nach der Transformation wieder zu reellen Ordnungsparametern der Bosekondensation übergegangen. Die neuen Erwartungswerte können nun mit einem reellen Sauerstoffhüpfparameter berechnet und somit, wie im Kapitel 4.1 beschrieben, ausgewertet werden. Auch die Ausdrücke der Hüpfwartungswerte durch die Integrale aus Kapitel 4.3.3 sind damit weiterhin möglich. Setzt man die Stromerhaltung (4.152) in den Imaginärteil der Selbstkonsistenzgleichung für $T_{xy\mathbf{m}}$ (4.160) ein

$$0 = t_{xy} p^2 \sin 2\phi_{xy}^I - \frac{(U_{xy} + J_p) t_{dp} d}{2t_{xy} p} T_{dp} \mathcal{I}_T^- \sin \phi^I, \quad (4.161)$$

so kann man die Phase des d-p-Matrixelements in (4.160) eliminieren. Man erhält damit

$$\sin \phi_{xy}^I = \left(1 - (U_{dp} + J_d) \mathcal{I}_T^-\right) \frac{2t_{xy}^2 p^2}{(U_{xy} + J_p) t_{dp}^2 d^2 (-\mathcal{I}_T^-)} \sin 2\phi_{xy}^I. \quad (4.162)$$

Damit diese Gleichung eine nicht triviale Lösung für ϕ_{xy}^I besitzt, muss der Faktor auf der rechten Seite größer als $\frac{1}{2}$ sein (s. Abb. 4.16). Dafür muss die effektive Sauerstoff-Sauerstoff-Wechselwirkung schwach sein:

$$U_{xy} + J_p < \frac{4t_{xy}^2 p^2}{t_{dp}^2 d^2} \frac{1 - (U_{dp} + J_d) \mathcal{I}_T^-}{-\mathcal{I}_T^-} \quad (4.163)$$

Zwar kann diese Ungleichung auch erfüllt werden, wenn der Ordnungsparameter der Kupferplätze d annähernd verschwindet, aber wie wir im letzten Kapitel sahen, würde dann auch der Strom innerhalb der Einheitszelle vernachlässigbar werden. Für den Fall, dass die Selbstkonsistenzgleichungen nicht für p und d weiter eingeschränkt werden sollen, kann leicht mit (4.145), (4.150) und (4.151) eine obere Schranke von

$$U_{xy} + J_p \lesssim 2 \quad (4.164)$$

für die Modellwerte, wie in Abb. 4.7 angegeben werden. Da wir allerdings keine Flussphasen für verschwindende Wechselwirkung U_{xy} , J_p gefunden haben, ist wegen dieser Gleichung

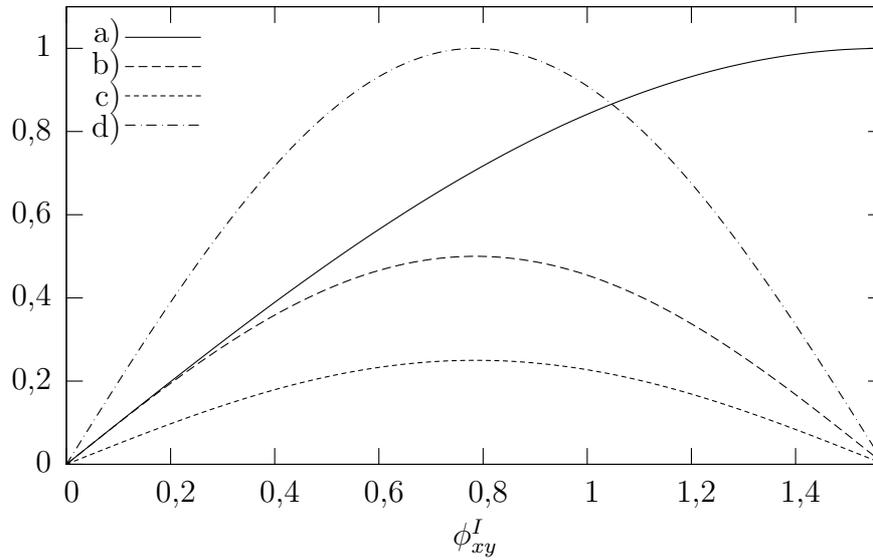


Abbildung 4.16: Zur Darstellung der Lösbarkeit von (4.162) betrachtet man die Funktionen $\sin \phi_{xy}^I$ (a) und $\sin 2\phi_{xy}^I$. Ist der Vorfaktor letzterer in (4.162) kleiner als $1/2$ (c), so existiert nur der triviale Schnittpunkt mit $\sin 2\phi_{xy}^I$. Ist dieser größer (d), so existiert eine weitere Lösung. Im Grenzfall (b) stimmen die Steigungen der beiden Kurven im Ursprung überein.

auch nicht mit einem Auftreten bei höheren Wechselwirkungen zu rechnen. Dies zeigt auch die numerische Auswertung der durch (4.158) transformierten Selbstkonsistenzgleichungen (s. Abb. 4.17).

Betrachtet man die Formfaktoren in der Θ_{II}/Θ_{III} -Phase, so kann, durch Verschieben der Brillouinzone

$$k_\ell \longrightarrow k_\ell - (-1)^{n\ell} \frac{\phi_{xy}^n}{2} \quad (4.165)$$

($n \in \{2, 3\}$ bezeichnet dabei die Θ_{II}/Θ_{III} -Phase), die Auswirkung der komplexen Phase des x-y-Matrixelementes kompensiert werden:

$$\begin{aligned} \gamma_{\ell\mathbf{k}} &\longrightarrow 2 \cos \left(k_\ell + \phi^{II} + \frac{\phi_{xy}^{II}}{2} + (-1)^\ell \left(\phi^{III} + \frac{\phi_{xy}^{III}}{2} \right) \right) \\ \gamma_{\mathbf{k}} &\longrightarrow 4 \cos k_x \cos k_y \end{aligned} \quad (4.166)$$

Aus diesem Ausdruck wird auch die Zuordnung der d-p- zu den x-y-Phasen der Hüpfparameter in der Θ_{II} - und Θ_{III} -Phase klar. Dadurch können die Erwartungswerte wie im Kapitel 4.1 berechnet werden. Die numerische Lösung der Selbstkonsistenzgleichungen liefert keinen Hinweis auf Ströme (s. Abb. 4.18).

Durch die komplexe Phase des x-y-Matrixelementes tritt nun eine zusätzliche Phase Θ_{IV} auf. Um zu dieser Phase zu gelangen, müssen die komplexen Phasen des x-y-Hüpfparameters die Relation

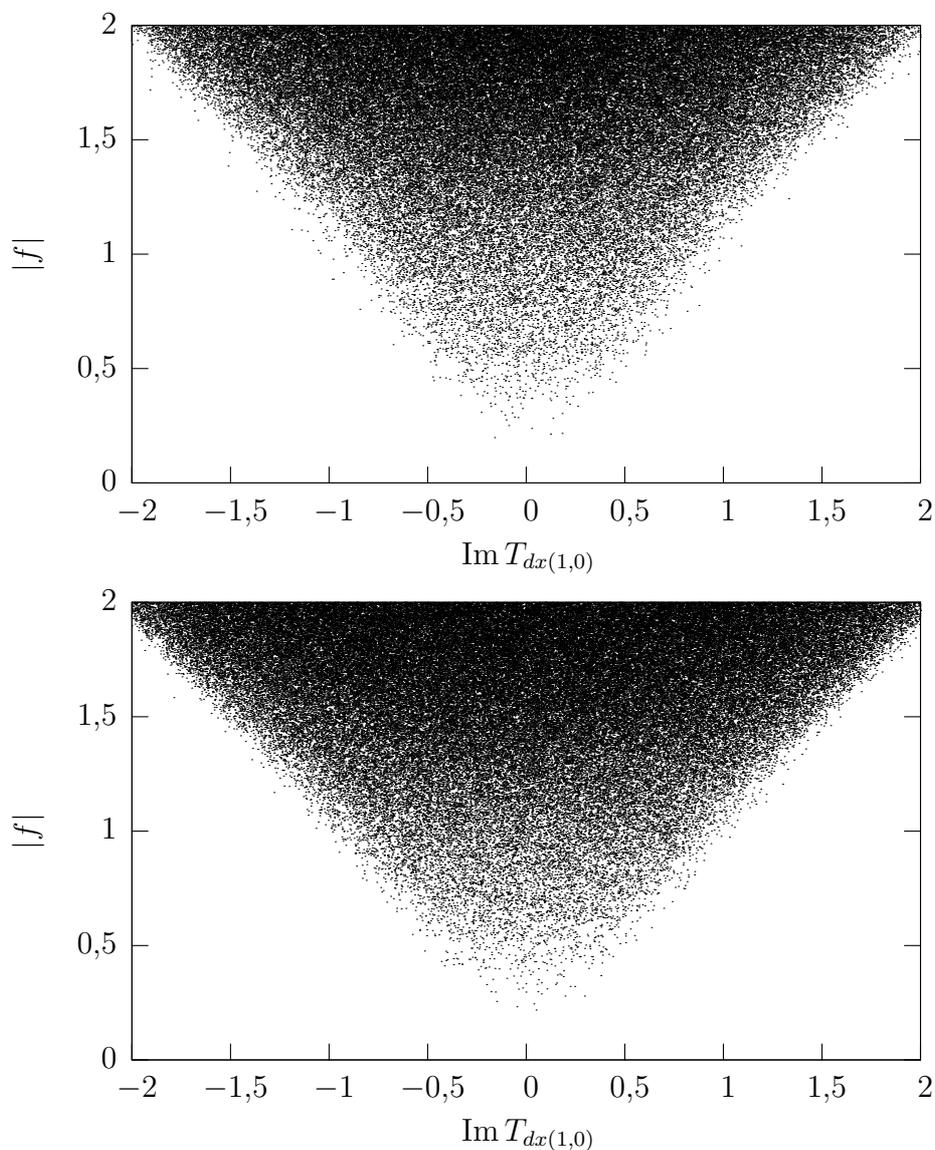


Abbildung 4.17: Sowohl die numerische Auswertung der Θ_I -Phase für endliche Sauerstoff-Sauerstoff-Wechselwirkung $U_{xy} = 1$ (oben) als auch in erster Ordnung Störungstheorie in großen lokalen Wechselwirkungen (unten) zeigt keine Flussphasen. Die Auftragung entspricht der in Abb. 4.7, wobei der Imaginärteil des x-y-Erwartungswerts zwischen -2 und $+2$ variiert wird.

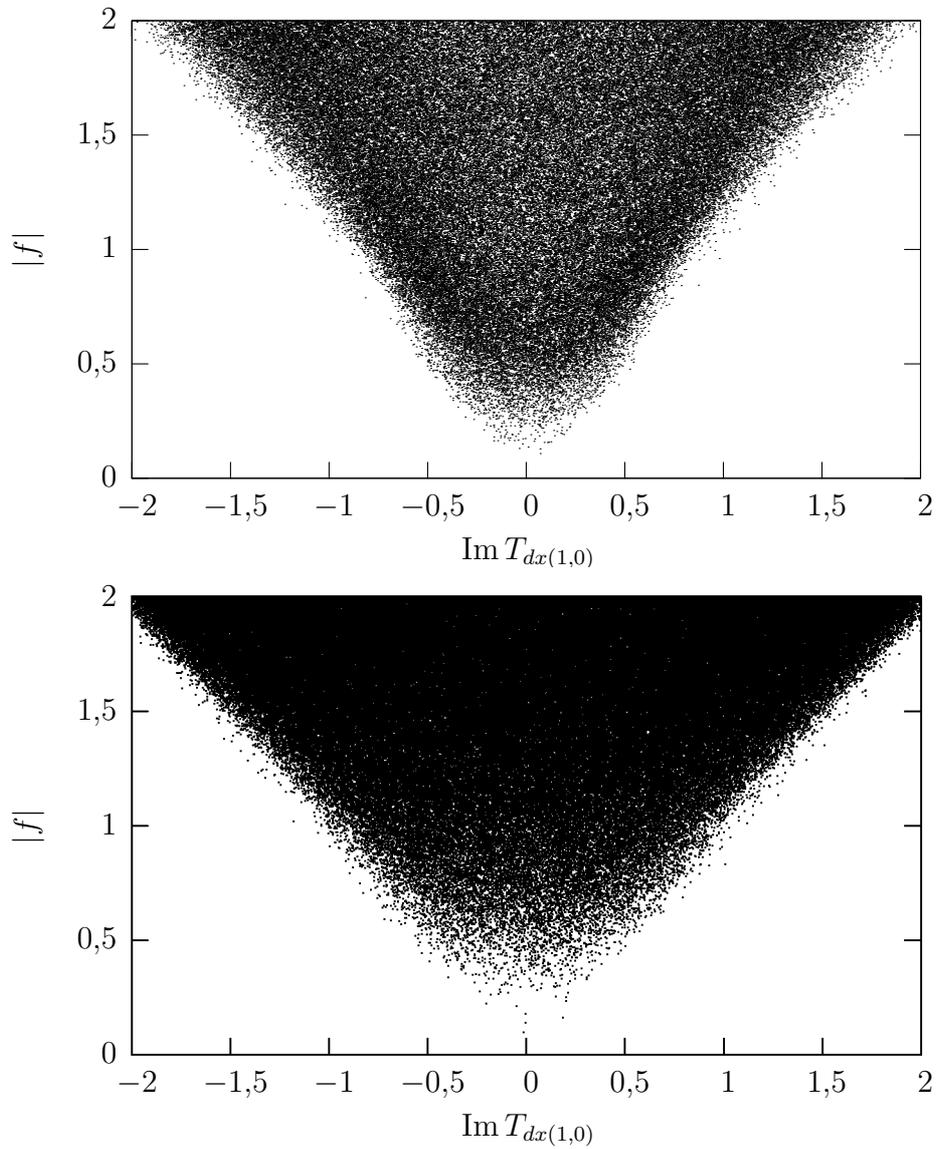


Abbildung 4.18: Wie im Θ_I -Fall zeigt auch die Θ_{II} -Phase keine Hinweise auf Strommuster bei endlicher Sauerstoff-Sauerstoff-Wechselwirkung (oben) oder bei Berechnung der Selbstkonsistenzgleichungen in erster Ordnung in großen lokalen Wechselwirkungen (unten).

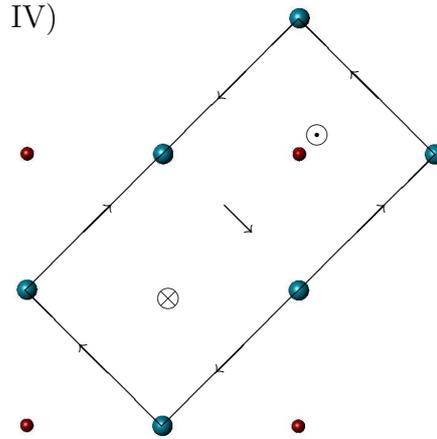


Abbildung 4.19: In der Θ_{IV} -Phase fließen Ströme nur zwischen den Sauerstoffatomen. Die Linien zeigen eine Einheitszelle, bei der die beide magnetischen Momente innerhalb der Zelle liegen und somit die meisten Ströme an ihrem Rand entlang fließen.

$$\alpha_{xy(+1,+1)} = \alpha_{xy(-1,-1)} = -\alpha_{xy(-1,+1)} = -\alpha_{xy(+1,-1)} \quad (4.167)$$

erfüllen. Dies führt auf das in Abb. 4.19 gezeigte Strommuster, dass ein mit der Θ_{II}/Θ_{III} -Phase identisches Muster des magnetischen Flusses aufweist. Da die Ströme nur zwischen Sauerstofforbitalen fließen, kann dieses Strommuster nicht auf ein bisher diskutiertes zurückgeführt werden. Da zudem die Phase nicht so einfach in den Formfaktor eingeht, kann die Phase bei der Berechnung der Hüpfwartungswerte nicht abgespalten werden. Die Argumentation des Θ_I -Falls kann somit nicht angewendet werden. I. Affleck [3] schlug bereits 1988 ein ähnliches Strommuster auf den Kupferplätzen vor. Da dies allerdings die Translationsinvarianz brach, wurde es wieder verworfen. Durch Anwendung des Strommusters auf die Sauerstoffplätze wird diese Symmetrie allerdings nicht gebrochen. Dadurch ist dieses Strommuster vielversprechend, da im Affleckschen Modell Flussphasen gefunden wurden. I. Affleck ging jedoch von einem Ein-Band-Hubbard-Modell aus, so dass ähnliche Resultate für $t_{dp} = 0$ und $U_{dp} = 0$ zu erwarten sind. Allerdings wird nun die Dotierung von den Kupferatomen gemessen. Dadurch erhält man die Lösung aus der Affleckschen Flussphase, indem man in diese hohe Dotierungen bezüglich des Sauerstoffsniveaus einsetzt. Affleck konnte jedoch zeigen, dass für solche die Flussphase verschwindet (s. Abb. 4.20). Wir erwarten daher auch für diese Flussphase, dass für die Werte der Hochtemperatursupraleitung keine Lösung mit Strömen existiert. Dies bestätigt auch die numerische Auswertung der Selbstkonsistenzgleichungen mit den geänderten Formfaktoren (s. Abb. 4.21).

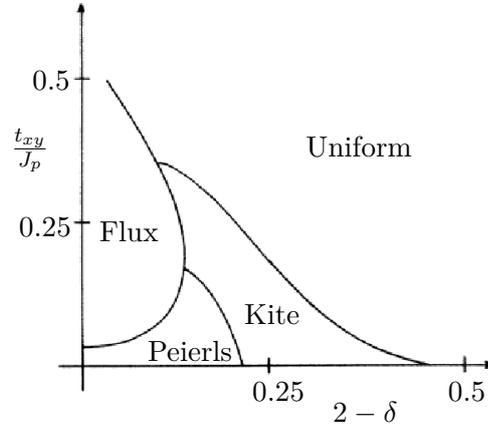


Abbildung 4.20: Wendet man die Ergebnisse von Affleck auf das Sauerstoffgitter an, so erkennt man, dass die von ihm gefundene Flussphase nur bei hohen Dotierungen existiert. Neben der hier gefundenen Flussphase fand Affleck auch die Kite- und Peierls-Phase, die Phasen der Hüpfmodilierungsoperatoren entsprechen. Er ließ diese Phasen mit der Flussphase konkurrieren.

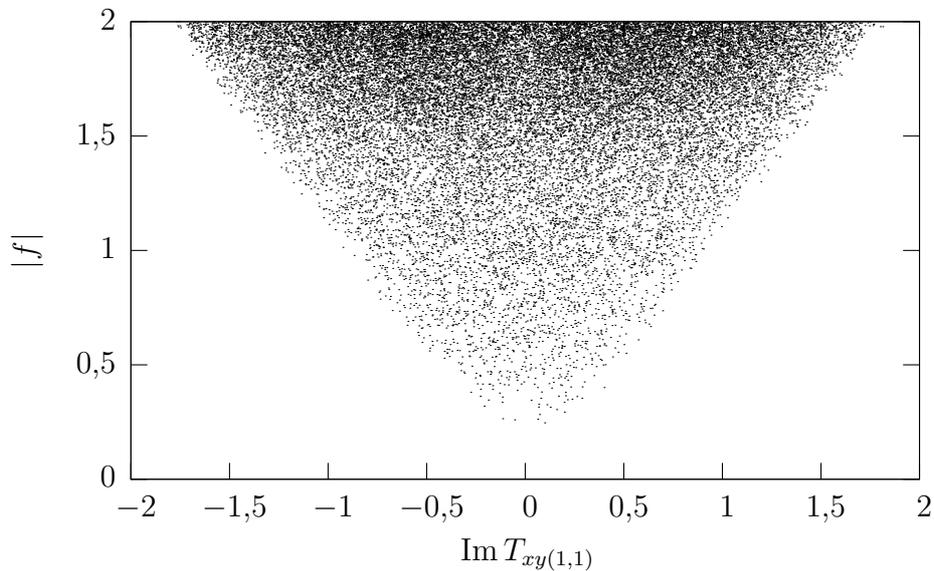


Abbildung 4.21: Die numerische Auswertung der Θ_{IV} -Phase für endliche Sauerstoff-Sauerstoff-Wechselwirkung $U_{xy} = 1$ zeigt, wie schon von den Ergebnissen von Affleck erwartet, keine Flussphasen.

Kapitel 5

Zusammenfassung

Wie wir sahen, konnte die Wechselwirkung zwischen Kupfer- und Sauerstofforbitalen des Drei-Band-Hubbard-Modells durch Stromoperatoren ausgedrückt werden. Bei der Lösung der Selbstkonsistenzgleichungen war dies allerdings nicht immer von Vorteil. Als wir sie nur durch solche Operatoren ausdrückten, konnten wir durch eine geschickte Wahl innerhalb der Berechnung der Selbstkonsistenzgleichungen einfach zeigen, dass keine Lösung mit endlichen Strömen existiert. Durch eine andere konnten wir zeigen, dass eine ungenaue numerische Analyse Flussphasen ergeben kann, da im mehrdimensionalen eine Unterscheidung zwischen sehr kleinen Minima und Nullstellen schwierig ist. Weder die genauere Auswertung noch die Zerlegung in Strom- und Hüpfmodulierungsoperatoren zeigte Flussphasen.

Auch für starke Wechselwirkungen konnten wir keine Flussphasen nachweisen. Die unitäre Transformation stellte sich dabei als nützliche Technik zur Eliminierung der doppelt besetzten Zustände dar. Sie ermöglichte so eine Störungsreihe in großen Wechselwirkungen. Um die präzise Methode des Freien-Energie-Funktionalen anwenden zu können, wurde der Slave-Boson-Formalismus als ein hilfreiches Werkzeug eingeführt. Durch die Kondensation der Bosonen wurden die Hüpfparameter in den Selbstkonsistenzgleichungen der schwachen Wechselwirkungen renormalisiert. In die neuen Parameter gingen die Ordnungsparameter der Bosekondensation durch das Produkt mit den ursprünglichen ein. Dadurch erhielten wir aus den Selbstkonsistenzgleichungen sowohl die mikroskopische Stromerhaltung als auch zwei weitere Bestimmungsgleichungen für die Ordnungsparameter. Die Betrachtung der Selbstkonsistenzgleichungen lieferte wegen der Invarianz des Systems unter Drehungen um $\pi/2$ vier getrennte Strommuster. Beim ersten fließen alle Ströme von den Kupfer- zu den Sauerstofforbitalen. Dadurch verletzte dieses die Stromerhaltung. Ein anderes lieferte vier getrennte magnetische Momente in der Einheitszelle. Für dieses konnten wir sowohl analytisch als auch numerisch zeigen, dass eine Lösung nicht vereinbar mit der abstoßenden Coulomb-Wechselwirkung ist. Die beiden übrigen äquivalenten Strommuster mit gleich gerichteten Strömen entlang der Achsen der Einheitszelle lieferten ebenfalls weder in der numerischen Betrachtung noch unter Vernachlässigung der Deformation der Bandstruktur durch die d-p-Hybridisierung endliche Ströme.

Die Einbeziehung einer endlichen Wechselwirkung zwischen den Sauerstofforbitalen sowie die erste Ordnung in der Störungreihe in den großen lokalen Wechselwirkungen lieferte in der numerischen Analyse keinen Hinweis auf Änderung dieser Tatsachen. Es trat zudem ein fünftes Strommuster auf, bei dem die Ströme nur zwischen den Sauerstofforbitalen fließen und dadurch, wie die beiden äquivalenten Strommuster in der nullten Ordnung, zwei magnetische Momente in der Einheitszelle erzeugen. Es ist damit konsistent mit den Messungen von Fauqué und ähnelte dem von Affleck vorgeschlagenen, verletzt allerdings nicht die Translationsinvarianz.

Wir konnten somit in unserer Hilfsteilchen-Molekularfeldtheorie des Drei-Band-Hubbard-Modells für den Parameterbereich der Kupratsupraleiter keine Flussphasen nachweisen.

Anhang A

Kommutatoren zur Berechnung der unitären Transformation

Für die unitäre Transformation in Kapitel 3.1

$$S = \sum_{a \neq b} s_{ab} (T_{ab}^{mix} - T_{ab}^{mix\dagger}) \quad (\text{A.1})$$

wurden der Kommutator dieser Transformation mit dem Hamiltonoperator benötigt. Dieser soll nun berechnet werden. Der Kommutator des zweiten Teils der unitären Transformation mit einem beliebigen Operator C folgt mit Hilfe von

$$\left[- \sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix\dagger}, C \right]_- = \left(\left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, C^\dagger \right]_- \right)^\dagger \quad (\text{A.2})$$

aus dem hermitesch konjugierten des ersten Teils. Die Kommutatoren werden dabei wie folgt getrennt berechnet:

$$\begin{aligned} [S, \mathcal{H}^h + \mathcal{H}^d]_- &= \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, E_c^h \right]_- + \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, E_c^d \right]_- \\ &+ \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} T_{cd}^h \right]_- + \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} T_{cd}^d \right]_- \\ &+ \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} U_{cd}^h \right]_- + \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} U_{cd}^d \right]_- \\ &+ h.c. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned}
[S, \mathcal{H}^{mix}]_- &= \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} T_{cd}^{mix} \right]_- \\
&+ \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} T_{cd}^{mix\dagger} \right]_- + h.c.
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Dabei wird die Kommutatorrelation der Hubbard-X-Operatoren

$$[X_{ai}^{\alpha\beta}, X_{bj}^{\beta'\alpha'}]_{\pm} = \delta_{ab} \delta_{ij} (\delta_{\beta\beta'} X_{ai}^{\alpha\alpha'} \pm \delta_{\alpha\alpha'} X_{ai}^{\beta'\beta}) \tag{A.5}$$

(oberes Vorzeichen gilt für je einen spinartigen Index) sowie die Linearität der Kommutatoren

$$[AB, C]_- = A[B, C]_{\pm} \mp [A, C]_{\pm} B \tag{A.6}$$

$$[AB, CD]_- = A[B, C]_{\pm} D \mp [A, C]_{\pm} BD + CA[B, D]_{\pm} \mp C[A, D]_{\pm} B \tag{A.7}$$

zu Grunde gelegt. Für den Kommutator mit den Diagonaltermen (im folgenden soll $a \neq b$ und $c \neq d$ gelten) ergibt sich

$$\begin{aligned}
[T_{ab}^{mix}, E_c^h]_- &= t_{ab} \epsilon_c \sum_{\mathbf{ijm}\sigma\nu} \sigma [X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}, X_{c\mathbf{j}}^{\nu\nu}]_- \\
&= t_{ab} \epsilon_c \sum_{\mathbf{im}\sigma\nu} \sigma (\delta_{cb} \delta_{\sigma\nu} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} + \delta_{ca} \delta_{-\sigma\nu} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}) \\
&= (\delta_{ca} + \delta_{cb}) \epsilon_c T_{ab}^{mix} \\
\Rightarrow \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_c E_c^h \right]_- &= \sum_{a \neq b} s_{ab} (\epsilon_a + \epsilon_b) T_{ab}^{mix},
\end{aligned} \tag{A.8}$$

$$\begin{aligned}
[T_{ab}^{mix}, E_c^d]_- &= t_{ab} (U_c + 2\epsilon_c) \sum_{\mathbf{ijm}\sigma} \sigma [X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}, X_{c\mathbf{j}}^{22}]_- \\
&= -t_{ab} (U_c + 2\epsilon_c) \sum_{\mathbf{im}\sigma} \sigma \delta_{ca} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \\
&= -\delta_{ca} (U_c + 2\epsilon_c) T_{ab}^{mix}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_c E_c^d \right]_- = - \sum_{a \neq b} s_{ab} (U_c + 2\epsilon_c) T_{ab}^{mix}. \tag{A.9}$$

Die Wechselwirkung im Raum ohne Doppelbesetzungen liefert die folgenden Beiträge:

$$\begin{aligned}
 [T_{ab}^{mix}, U_{cd}^h]_- &= t_{ab} \frac{U_{cd}}{2} \sum_{\mathbf{ijmns\nu\nu'}} \sigma \left[X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}, X_{c\mathbf{j}}^{\nu\nu} X_{d\mathbf{j}-\mathbf{n}}^{\nu'\nu'} \right]_- \\
 &= t_{ab} \frac{U_{cd}}{2} \sum_{\mathbf{imns\nu\nu'}} \sigma \left(\delta_{cb} \delta_{\nu\sigma} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{d,i-\mathbf{m}-\mathbf{n}}^{\nu'\nu'} \right. \\
 &\quad + \delta_{ca} \delta_{\nu,-\sigma} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{d,i-\mathbf{n}}^{\nu'\nu'} \\
 &\quad + \delta_{db} \delta_{\nu'\sigma} X_{c,i-\mathbf{m}+\mathbf{n}}^{\nu\nu} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \\
 &\quad \left. + \delta_{da} \delta_{\nu',-\sigma} X_{c,i+\mathbf{n}}^{\nu\nu} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \right) \\
 &\Rightarrow \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} U_{cd}^h \right]_- = \sum_{a \neq b, c \neq b} \sum_{\mathbf{imns\nu}} \sigma t_{ba} U_{bc} \\
 &\quad \left(s_{ba} \left(X_{a,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{bi}^{2-\sigma} X_{c,i-\mathbf{n}}^{\nu\nu} + X_{c,i-\mathbf{n}}^{\nu\nu} X_{bi}^{2-\sigma} X_{a,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \right) \right. \\
 &\quad \left. + s_{ab} \left(X_{a,i-\mathbf{m}}^{2-\sigma} X_{bi}^{0\sigma} X_{c,i-\mathbf{n}}^{\nu\nu} + X_{c,i-\mathbf{n}}^{\nu\nu} X_{bi}^{0\sigma} X_{a,i-\mathbf{m}}^{2-\sigma} \right) \right) \quad (\text{A.10})
 \end{aligned}$$

Man erkennt, dass diese die beiden Teilräume mischen und somit nur zu $\bar{\mathcal{H}}^{12}$ beitragen. Der erste und der dritte Term können aber für $a = c$, $\mathbf{m} = \mathbf{n}$ und $\sigma = \nu$ bzw. $\sigma = -\nu$ zu $\mp X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}$ kontrahiert werden, so dass dieser Term nur noch zwischen zwei benachbarten Orbitalen wirken. Die Wechselwirkung im Raum mit mindestens einer Doppelbesetzung fügt die folgenden Terme hinzu:

$$\begin{aligned}
 [T_{ab}^{mix}, U_{cd}^d]_- &= t_{ab} U_{cd} \sum_{\mathbf{ijmns\nu}} \sigma \left[X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}, X_{c\mathbf{j}}^{22} X_{d\mathbf{j}-\mathbf{n}}^{22} + X_{c\mathbf{j}}^{\nu\nu} X_{d\mathbf{j}-\mathbf{n}}^{22} + X_{c\mathbf{j}}^{22} X_{d\mathbf{j}-\mathbf{n}}^{\nu\nu} \right]_- \\
 &= t_{ab} U_{cd} \sum_{\mathbf{imns\nu}} \sigma \left(-\delta_{ca} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{d,i-\mathbf{n}}^{22} - \delta_{da} X_{c,i+\mathbf{n}}^{22} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \right. \\
 &\quad + \delta_{cb} \delta_{\nu\sigma} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{d,i-\mathbf{m}-\mathbf{n}}^{22} + \delta_{ca} \delta_{\nu,-\sigma} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{d,i-\mathbf{n}}^{22} \\
 &\quad - \delta_{da} X_{c,i+\mathbf{n}}^{\nu\nu} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} - \delta_{ca} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{d,i-\mathbf{n}}^{\nu\nu} \\
 &\quad \left. + \delta_{db} \delta_{\nu\sigma} X_{c,i-\mathbf{m}+\mathbf{n}}^{22} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} + \delta_{ca} \delta_{\nu,-\sigma} X_{c,i-\mathbf{n}}^{22} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \right) \\
 &\Rightarrow \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} U_{cd}^d \right]_- = \sum_{a \neq b, c \neq b} \sum_{\mathbf{imns}} \sigma t_{ab} U_{bc} \\
 &\quad \left(s_{ab} \left(X_{a,i-\mathbf{m}}^{2-\sigma} X_{bi}^{0\sigma} X_{c,i-\mathbf{n}}^{22} - X_{c,i-\mathbf{n}}^{22} X_{bi}^{0\sigma} X_{a,i-\mathbf{m}}^{2-\sigma} \right) \right. \\
 &\quad - s_{ba} \left(X_{a,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{bi}^{2-\sigma} X_{c,i-\mathbf{n}}^{22} - X_{c,i-\mathbf{n}}^{22} X_{bi}^{2-\sigma} X_{a,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \right) \\
 &\quad \left. - \sum_{\nu} s_{ba} \left(X_{a,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{bi}^{2-\sigma} X_{c,i-\mathbf{n}}^{\nu\nu} + X_{c,i-\mathbf{n}}^{\nu\nu} X_{bi}^{2-\sigma} X_{a,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \right) \right) \quad (\text{A.11})
 \end{aligned}$$

Die ersten vier Terme liefern Beiträge zum transformierten Raum mit mindestens einer Doppelbesetzung, während die letzten beiden Terme auch zu Übergangsprozessen beitragen. Allerdings kann für den Fall $a = c$ und $\mathbf{m} = \mathbf{n}$ der zweite und fünfte Term wie oben zu $\pm X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}$ kontrahiert werden, so dass er Hüpfprozesse zwischen nächsten Nachbarn beschreibt. Der Kommutator mit den Hüpfprozessen im Raum ohne Doppelbesetzungen liefert nur Übergangsprozesse zwischen übernächsten Nachbarn:

$$\begin{aligned}
\left[T_{ab}^{mix}, T_{cd}^h \right]_- &= -t_{ab} t_{cd} \sum_{\mathbf{ijm}\sigma\nu} \sigma \left[X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}, X_{cj}^{\nu 0} X_{dj-\mathbf{n}}^{0\nu} \right]_- \\
&= -t_{ab} t_{cd} \sum_{\mathbf{imn}\sigma\nu} \sigma \left(\delta_{cb} X_{ai}^{2-\sigma} \left(\delta_{\nu\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{00} + X_{b,i-\mathbf{m}}^{\nu\sigma} \right) X_{d,i-\mathbf{m}-\mathbf{n}}^{0\nu} \right. \\
&\quad \left. - \delta_{ca} \delta_{\nu,-\sigma} X_{ai}^{20} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{d,i-\mathbf{n}}^{0-\sigma} \right) \\
\Rightarrow \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} T_{cd}^h \right]_- &= - \sum_{a \neq b, c \neq b} \sum_{\mathbf{imn}\sigma} \sigma t_{ab} t_{bc} \\
&\quad \left(-s_{ba} X_{a,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} X_{bi}^{20} X_{c,i-\mathbf{n}}^{0-\sigma} + s_{ab} X_{a,i-\mathbf{m}}^{2-\sigma} \left(X_{bi}^{00} X_{c,i-\mathbf{n}}^{0\sigma} + \sum_{\nu} X_{bi}^{\nu\sigma} X_{c,i-\mathbf{n}}^{0\nu} \right) \right) \quad (\text{A.12})
\end{aligned}$$

Die Hüpfprozesse im Raum mit mindestens einer Doppelbesetzung fügen ebenfalls nur gemischte Beiträge hinzu:

$$\begin{aligned}
\left[T_{ab}^{mix}, T_{cd}^d \right]_- &= -t_{ab} t_{cd} \sum_{\mathbf{ijm}\sigma\nu} \sigma \left[X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}, X_{cj}^{2\nu} X_{dj-\mathbf{n}}^{\nu 2} \right]_- \\
&= -t_{ab} t_{cd} \sum_{\mathbf{imn}\sigma\nu} \sigma \left(\delta_{ab} \delta_{\nu\sigma} X_{c,i-\mathbf{m}+\mathbf{n}}^{2\sigma} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{02} \right. \\
&\quad \left. - \delta_{da} X_{c,i+\mathbf{n}}^{2\nu} \left(\delta_{\nu,-\sigma} X_{ai}^{22} + X_{ai}^{\nu-\sigma} \right) X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \right) \\
\Rightarrow \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} T_{cd}^d \right]_- &= - \sum_{a \neq b, c \neq b} \sum_{\mathbf{imn}\sigma} \sigma t_{ab} t_{bc} \\
&\quad \left(s_{ab} X_{c,i-\mathbf{n}}^{2\sigma} X_{bi}^{0\sigma} X_{a,i-\mathbf{m}}^{2-\sigma} - s_{ba} \left(X_{c,i-\mathbf{n}}^{2-\sigma} X_{bi}^{22} + \sum_{\nu} X_{c,i-\mathbf{n}}^{2\nu} X_{bi}^{\nu-\sigma} \right) X_{a,i-\mathbf{m}}^{0\sigma} \right) \quad (\text{A.13})
\end{aligned}$$

Bei den Elementen der unitären Transformation verschwinden gleichartige Kommutatoren

$$\begin{aligned}
\left[T_{ab}^{mix}, T_{cd}^{mix} \right]_- &= -t_{ab} t_{cd} \sum_{\mathbf{ijm}\sigma\nu} \sigma \nu \left[X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-\mathbf{m}}^{0\sigma}, X_{cj}^{2-\nu} X_{dj-\mathbf{n}}^{0\nu} \right]_- = 0 \\
\Rightarrow \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} T_{cd}^{mix} \right]_- &= 0, \quad (\text{A.14})
\end{aligned}$$

während der Kommutator mit dem hermitesch konjugierten nicht verschwindet:

$$\begin{aligned}
 [T_{ab}^{mix}, T_{cd}^{mix\dagger}]_- &= t_{ab}t_{cd} \sum_{\mathbf{ijm}\sigma\nu} \sigma\nu [X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-m}^{0\sigma}, X_{dj-n}^{\nu 0} X_{cj}^{-\nu 2}]_- \\
 &= t_{ab}t_{cd} \sum_{\mathbf{imn}\sigma\nu} \sigma\nu \left(\delta_{db} X_{ai}^{2-\sigma} \left(\delta_{\nu\sigma} X_{b,i-m}^{00} + X_{b,i-m}^{\nu\sigma} \right) X_{c,i-m+n}^{-\nu 2} \right. \\
 &\quad - \delta_{da} \delta_{\nu,-\sigma} X_{ai}^{20} X_{b,i-m}^{0\sigma} X_{c,i+n}^{\sigma 2} + \delta_{cb} \delta_{\nu,-\sigma} X_{d,i-m-n}^{-\sigma 0} X_{ai}^{2-\sigma} X_{b,i-m}^{02} \\
 &\quad \left. - \delta_{ca} X_{c,i-n}^{\nu 0} \left(\delta_{\nu\sigma} X_{ai}^{22} + X_{ai}^{-\sigma-\nu} \right) X_{b,i-m}^{0\sigma} \right) \\
 \Rightarrow \left[\sum_{a \neq b} s_{ab} T_{ab}^{mix}, \sum_{c \neq d} T_{cd}^{mix\dagger} \right]_- &= \sum_{a \neq b, c \neq d} \sum_{\mathbf{imn}\sigma} t_{ab}t_{bc} \\
 &\left(s_{ab} (X_{a,i-m}^{2-\sigma} X_{bi}^{00} X_{c,i-n}^{-\sigma 2} + X_{c,i-n}^{-\sigma 0} X_{bi}^{02} X_{a,i-m}^{2-\sigma} + \sum_{\nu} \sigma\nu X_{a,i-m}^{2-\sigma} X_{bi}^{\nu\sigma} X_{c,i-n}^{-\nu 2}) \right. \\
 &\quad \left. + s_{ba} \left(X_{c,i-n}^{\sigma 0} X_{bi}^{22} X_{a,i-m}^{\sigma 0} + X_{a,i-m}^{0\sigma} X_{bi}^{20} X_{c,i-n}^{\sigma 2} + \sum_{\nu} \sigma\nu X_{c,i-m}^{-\nu 0} X_{bi}^{\sigma\nu} X_{a,i-n}^{0-\sigma} \right) \right) \quad (\text{A.15})
 \end{aligned}$$

Nur der letzte Term operiert im Raum ohne Doppelbesetzungen. Allerdings entstehen für $a \neq c$ oder $\mathbf{m} \neq \mathbf{n}$ Terme, die zu Hüpfprozessen zwischen übernächsten Nachbarn führen. Da in der molekularfeld-theoretischen Betrachtung diese nicht verwendet werden, fassen wir sie in \tilde{h}^h zusammen. Mit Hilfe der Kontraktionen können nun die Kommutatoren einfach geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
 [S, \mathcal{H}^h + \mathcal{H}^d]_- &= - \sum_{a \neq b} (U_a + \epsilon_a - \epsilon_b + 2U_{ab}) s_{ab} (T_{ab}^{mix} + T_{ab}^{mix\dagger}) \\
 &\quad + \tilde{h}^h + h^d + h^{mix} \quad (\text{A.16})
 \end{aligned}$$

$$[S, \mathcal{H}^{mix}]_- = 2 \sum_{a \neq b} \sum_{\mathbf{im}\sigma\nu} \sigma\nu t_{ab}^2 s_{ba} X_{a,i-m}^{-\nu-\sigma} X_{bi}^{\sigma\nu} + \tilde{h}^h + h^d + h^{mix} \quad (\text{A.17})$$

Der Term h^d enthält Operatoren, die im Raum mit mindestens einer Doppelbesetzung operieren, und Übergangsoperatoren, die Doppelbesetzungen neu erzeugen oder vernichten, sind in h^{mix} zusammen gefasst.

Anhang B

Berechnung der Besetzungszahlen

Zur Berechnung der Erwartungswerte in Kapitel 4.1 musste die Bewegungsgleichung,

$$z \langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma}; b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle(z) = \langle\langle [a_{\mathbf{k}\sigma}, \tilde{H}]; b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle(z) + \langle [a_{\mathbf{k}\sigma}, b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ \rangle$$

mit dem Hamiltonoperator

$$\tilde{H} = \sum_{a\mathbf{k}\sigma} \xi_{a\mathbf{k}} \hat{n}_{a\mathbf{k}\sigma} + \sum_{v\mathbf{k}\sigma} (\tau_{v\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{v\mathbf{k}\sigma} + h.c.) \quad (\text{B.1})$$

gelöst werden. Der dabei auftretende Kommutator ist gegeben durch

$$[d_{\mathbf{k}\sigma}, \tilde{H}]_- = \xi_d d_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_v \tau_{v\mathbf{k}} p_{v\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{B.2})$$

$$[p_{v\mathbf{k}\sigma}, \tilde{H}]_- = \xi_{v\mathbf{k}} p_{v\mathbf{k}\sigma} + \tau_{v\mathbf{k}}^* d_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (\text{B.3})$$

Dies eingesetzt in die Bewegungsgleichung ergibt die Greenschen Funktionen

$$\begin{aligned} (z - \xi_d) \langle\langle d_{\mathbf{k}\sigma}; d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \sum_v \tau_{v\mathbf{k}} \langle\langle p_{v\mathbf{k}\sigma}; d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle + 1, \\ (z - \xi_{v\mathbf{k}}) \langle\langle p_{v\mathbf{k}\sigma}; d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \tau_{v\mathbf{k}}^* \langle\langle d_{\mathbf{k}\sigma}; d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ (z - \xi_{v\mathbf{k}}) \langle\langle p_{v\mathbf{k}\sigma}; p_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \tau_{v\mathbf{k}}^* \langle\langle d_{\mathbf{k}\sigma}; p_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle + 1, \\ (z - \xi_d) \langle\langle d_{\mathbf{k}\sigma}; p_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \sum_{v'} \tau_{v'\mathbf{k}} \langle\langle p_{v'\mathbf{k}\sigma}; p_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \\ (z - \xi_{-v}) \langle\langle p_{-v,\mathbf{k}\sigma}; p_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \tau_{-v,\mathbf{k}}^* \langle\langle d_{\mathbf{k}\sigma}; p_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

die jedoch noch voneinander abhängen. Durch Einsetzen gelingt es diese zu entkoppeln und man erhält

$$\begin{aligned}
\langle\langle d_{\mathbf{k}\sigma}; d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{1}{z - \xi_d - \Sigma_{d\mathbf{k}}(z)} = \frac{\prod_v (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \xi_{v\mathbf{k}})}{\prod_n (z - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}, \\
\langle\langle p_{v\mathbf{k}\sigma}; p_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{1}{z - \xi_{v\mathbf{k}} - \Sigma_{v\mathbf{k}}(z)} = \frac{(z - \xi_d)(z - \xi_{-v,\mathbf{k}}) - |\tau_{-v,\mathbf{k}}|^2}{\prod_n (z - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}, \\
\langle\langle p_{v\mathbf{k}\sigma}; d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{\tau_{v\mathbf{k}}^* (z - \xi_{-v,\mathbf{k}})}{\prod_n (z - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}, \\
\langle\langle p_{-v,\mathbf{k}\sigma}; p_{v\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \frac{\tau_{-v,\mathbf{k}}^* \tau_{v\mathbf{k}}}{\prod_n (z - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}.
\end{aligned} \tag{B.5}$$

Die dabei auftretenden Selbstenergien sind gegeben durch

$$\Sigma_{d\mathbf{k}}(z) = \sum_v \frac{|\tau_{v\mathbf{k}}|^2}{z - \xi_{v\mathbf{k}}}, \tag{B.6}$$

$$\Sigma_{v\mathbf{k}}(z) = \frac{|\tau_{v\mathbf{k}}|^2}{z - \xi_d - \frac{|\tau_{-v,\mathbf{k}}|^2}{z - \xi_{-v,\mathbf{k}}}} \tag{B.7}$$

und die Anregungen der Hilfsteilchen, die sich als Pole der Brüche durch Erweiterung ergeben, sind durch die kubische Gleichung

$$\begin{aligned}
0 &= \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}^3 - (\xi_d + \xi_{+\mathbf{k}} + \xi_{-\mathbf{k}}) \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}^2 + \left(\xi_d \xi_{+\mathbf{k}} + \xi_d \xi_{-\mathbf{k}} + \xi_{+\mathbf{k}} \xi_{-\mathbf{k}} - \sum_v |\tau_{v\mathbf{k}}|^2 \right) \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} \\
&\quad + \sum_v |\tau_{v\mathbf{k}}|^2 \xi_{-v,\mathbf{k}} - \xi_d \xi_{+\mathbf{k}} \xi_{-\mathbf{k}}
\end{aligned} \tag{B.8}$$

bestimmt. Bei der Berechnung der Erwartungswerte nehmen wir an, dass diese nur an isolierten Punkten identisch sind, die Bänder sich also nur an einzelnen Punkten in der Brillouinzone schneiden. Für die restlichen Punkte können wir die kubische Gleichung dann mit Hilfe der Cardanoschen Formeln oder der Einführung von Hilfsgrößen lösen [40]: Zunächst kann man in der kubischen Gleichung durch die Koordinatentransformation

$$\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} \rightarrow \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} + \frac{b}{3} \tag{B.9}$$

den quadratischen Term eliminieren. Dabei bezeichnen $a = 1$, b , c , d im Folgenden die Koeffizienten aus (B.8). Die so entstandene Gleichung $\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}^3 + p\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} + q = 0$ hat die Koeffizienten

$$p = c - \frac{b^2}{3}, \tag{B.10}$$

$$q = \frac{2b^3}{27} - \frac{bc}{3} + d. \tag{B.11}$$

Da wir nach drei unterschiedlichen reellen Lösungen suchen, muss p negativ sein und wir finden durch eine weitere Substitution

$$\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} = r \cos \varphi_n, \quad (\text{B.12})$$

$$r = \sqrt{-\frac{4p}{3}} \quad (\text{B.13})$$

und der Anwendung der Additionstheoreme des Kosinus die Lösung

$$\varphi_n = \frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{4q}{r^3}\right) + \frac{2}{3}\pi n. \quad (\text{B.14})$$

Durch Resubstitution und Rücktransformation ist die Anregungsenergie gegeben zu

$$\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} = r \cos \varphi_n - \frac{b}{3}. \quad (\text{B.15})$$

Mit der Bestimmung der Energien können nun die Erwartungswerte berechnet werden: Aus der Definition der Spektralfunktion $A^{ab}(z)$

$$\langle b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dz f(z) A^{ab}(z) \quad (\text{B.16})$$

($f(z)$ ist die Fermifunktion) kann durch Einfügen eines Konvergenz erzeugenden Faktors $\lim_{\delta \rightarrow 0^+} e^{z\delta}$, der Beziehung zwischen Spektralfunktion und retardierten Greenschen Funktion und zweimaliger Anwendung der Summenregel (s. z.B. [39]) der Erwartungswert durch das Residuum der Greenschen Funktion ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \langle b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dz A^{ab}(z) \frac{1}{\beta} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_{i\omega} \frac{i\omega\delta}{i\omega - z} \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega} \langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma}; b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle(i\omega) \\ &= \sum_n f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) \text{Res}_{z=\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}} \langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma}; b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle(z) \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

wobei $i\omega$ eine Matsubarafrequenz bezeichnet. Da die Pole der Greenschen Funktion die Anregungsenergien der Hilfstelchen sind, können nun die Erwartungswerte durch (B.5)

und (B.17) ermittelt werden:

$$\begin{aligned}
n_d &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle d_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \xi_{+k}) (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \xi_{-\mathbf{k}}) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{n\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p)^2 - T_{xy}^2 \gamma_{\mathbf{k}}^2 \right) \tag{B.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n_p &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}v} \langle p_{v\mathbf{k}\uparrow}^\dagger p_{v\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\
&= \frac{1}{2N} \sum_{n\mathbf{k}v} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \xi_d) (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \xi_{v\mathbf{k}}) - |\tau_{v\mathbf{k}}|^2 \right) \\
&= \frac{1}{2N} \sum_{n\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \\
&\quad \cdot \left(2(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_d) (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p) - T_{dp}^2 (|\gamma_{\mathbf{k}x}|^2 + |\gamma_{\mathbf{k}y}|^2) \right) \tag{B.19}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n_{d\ell\mathbf{m}} &= \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{k}v} v^\ell \langle d_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger p_{v\mathbf{k}\uparrow} \rangle e^{i\mathbf{m}\mathbf{k}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{n\mathbf{k}v} v^\ell e^{i\mathbf{m}\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \tau_{v\mathbf{k}}^* (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \xi_{-v,\mathbf{k}}) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{m}\mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \\
&\quad \cdot \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_p) T_{dp} \gamma_{\mathbf{k}\ell}^* + T_{xy} T_{dp} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},1-\ell}^* \right) \tag{B.20}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n_{xy\mathbf{m}} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}v} v \left(\langle p_{v\mathbf{k}\uparrow}^\dagger p_{v\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle p_{v\mathbf{k}\uparrow}^\dagger p_{-v,\mathbf{k}\uparrow} \rangle \right) e^{-i\mathbf{m}\sigma_z \mathbf{k}} \\
&= \frac{1}{2N} \sum_{n\mathbf{k}v} v e^{-i\mathbf{m}\sigma_z \mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \\
&\quad \cdot \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \xi_d) (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \xi_{-v,\mathbf{k}}) - |\tau_{-v,\mathbf{k}}|^2 - \tau_{-v,\mathbf{k}}^* \tau_{v\mathbf{k}} \right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{n\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{m}\sigma_z \mathbf{k}} \frac{f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})}{\prod_{n' \neq n} (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n'\mathbf{k}})} \\
&\quad \cdot \left((\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - E_d) T_{xy} \gamma_{\mathbf{k}} + T_{dp}^2 \gamma_{\mathbf{k}x} \gamma_{\mathbf{k}y}^* \right) \tag{B.21}
\end{aligned}$$

Die Erwartungswerte wurden dabei bereits wieder durch die Matrixelemente des ursprünglichen Ersatzhamiltonoperators (3.51) ausgedrückt, die durch

$$\xi_{d\mathbf{k}} = E_d, \quad (\text{B.22})$$

$$\xi_{v\mathbf{k}} = E_p + v\gamma_{\mathbf{k}}T_{xy}, \quad (\text{B.23})$$

$$\tau_{v\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}}T_{dp}(\gamma_{\mathbf{k}x} + v\gamma_{\mathbf{k}y}) \quad (\text{B.24})$$

mit den Parametern nach Anwendung der x-y-Hybridisierung (4.6) zusammenhängen.

Anhang C

Numerische Verfahren

Zur Auswertung der Selbstkonsistenzgleichungen wurde ein Programm erstellt, um diese näherungsweise zu lösen. Die dabei verwendeten Techniken sollen nun kurz dargestellt werden.

Die Erwartungswerte enthalten Summen über viele \mathbf{k} -Werte, die wir zunächst durch ein Integral ersetzen:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{4\pi^2} \int_{(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})}^{(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})} d^2\mathbf{k} \quad (\text{C.1})$$

Der Vergleich verschiedener Verfahren zeigte, dass das Simpsonverfahren für eine Genauigkeit von 10^{-3} etwas schneller als die Berechnung mit festen Stützstellen war. Dieses adaptive Verfahren geht von der Simpson-Formel (s. z.B. [40]) aus, bei der der Integrand durch ein Polynom zweiten Grades ersetzt wird (s. Abb. C.1):

$$\int_a^b dx f(x) \approx \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) \quad (\text{C.2})$$

Durch die Aufteilung des Integrationsintervalls in zwei kleinere Teilintervalle kann man die Genauigkeit erhöhen und man gelangt zur zusammengesetzten Simpsonformel

$$\int_a^b dx f(x) \approx \frac{b-a}{12} \left(f(a) + 4f\left(\frac{3a+b}{4}\right) + 2f\left(\frac{2a+b}{4}\right) + 4f\left(\frac{a+b}{4}\right) + f(b) \right).$$

Diese ist für Polynome bis zum Grad drei exakt; ansonsten ist ihr Fehler

$$|R| \leq \frac{(b-a)^5}{46080} \max_{x \in (a,b)} \frac{d^4 f}{dx^4} \quad (\text{C.3})$$

Die Idee des Simpsonverfahrens ist nun, das Ergebnis der Simpsonformel (C.2) mit dem der zusammengesetzten (C.3) zu vergleichen. Ist die Differenz größer als die Toleranz, so ist es nötig, das Intervall zu teilen. Die schon für die zusammengesetzte Simpsonformel berechneten Funktionswerte der mittleren Stützstellen der neuen Diskretisierung können

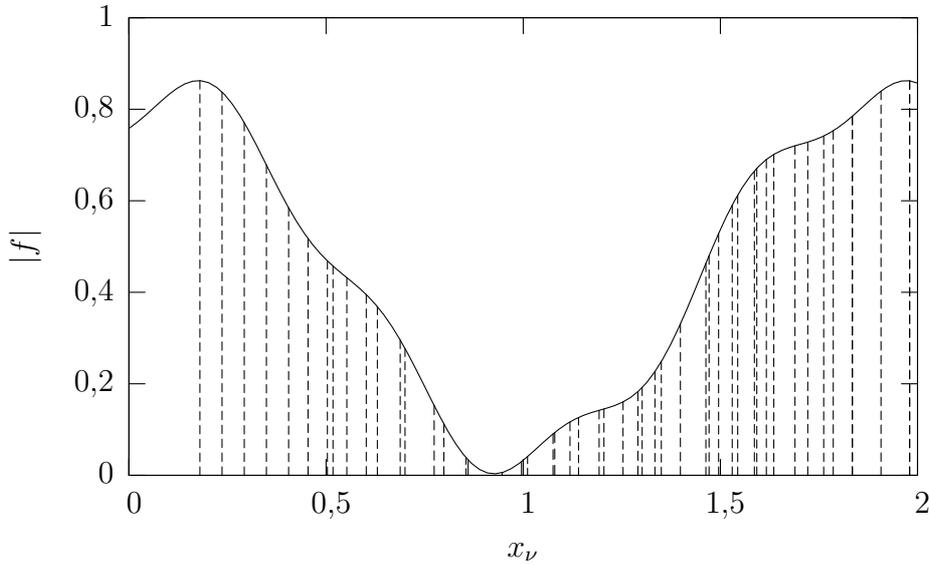


Abbildung C.1: Beim Simpsonverfahren erfolgt die Diskretisierung der Funktion aufgrund der Abweichung von dieser zu einer Parabel im betrachteten Intervall. Sie wird daher fein an Wendepunkten diskretisiert.

dabei übernommen werden. Die erneute Prüfung der Abweichung geschieht auf dem rechten und linken Intervall getrennt, so dass sich die Diskretisierung an die Kurve anpassen kann. Als Toleranz verwenden wir 10^{-2} pro Iteration.

Der analytische Ausdruck des Integranden dieser Integrale beinhaltet die Differenz der Energien im Nenner. Schon im Fall ohne Flussphasen ergibt sich dabei eine Entartung am M-Punkt der Brillouinzone (s. Abb. 4.3). Im Θ_{II} -Fall verschiebt sich diese Entartung in die Brillouinzone hinein. Dadurch kann der Integrand sehr groß werden. Nun kann zum einen das Simpsonverfahren bei zu kleinen Diskretisierungsschritten abgebrochen werden, zum anderen kann man eine Entartung der Energieniveaus verhindern. Im Fall der Entartung wäre auch der analytische Ausdruck des Integranden nicht gültig, da es dann keine Polstelle gibt und somit das Residuum verschwindet. Da auch durch numerische Rundungsfehler die Lösung der kubischen Gleichung zur Energieberechnung (B.8) eine positive Diskriminante und somit komplexe Lösungen ergeben kann, fangen wir solche Diskriminanten ab. Ist diese klein, so benutzen wir statt der Lösung (B.15) für drei reelle verschiedene Energien, diejenige bei der zwei Lösungen identisch sind:

$$\mathcal{E}_{\frac{1}{2}\mathbf{k}} = \sqrt[3]{\frac{q}{2}} - \frac{b}{3}, \quad \mathcal{E}_{3\mathbf{k}} = \sqrt[3]{-4q} - \frac{b}{3} \quad (\text{C.4})$$

Diese wäre die korrekte Formel der Energieberechnung am M-Punkt im stromlosen Fall. Um den Ausdruck des Integranden weiterhin beibehalten zu können, heben wir künstlich die Entartung auf, indem wir für das obere Band den Wert der doppelten Lösung \mathcal{E}_{1k} um 10^{-2} nach oben, entsprechend für das mittlere Band \mathcal{E}_{2k} nach unten verschieben.

Mit der Berechnung der Erwartungswerte kann nun die Funktion f , die den Parametern

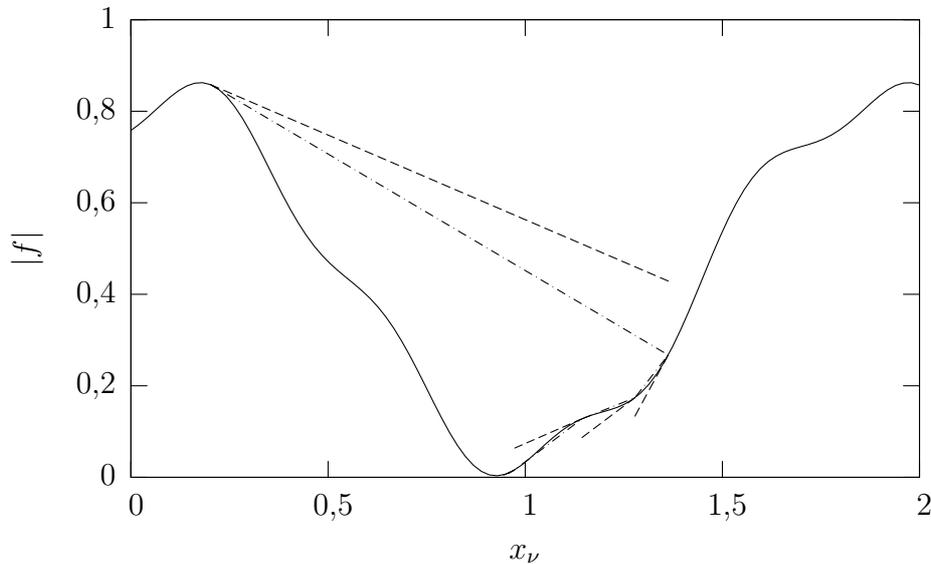


Abbildung C.2: Beim Newtonverfahren wird die Schrittweite der Iteration durch die Ableitung des Funktionswerts an dessen Stelle bestimmt. Dabei folgt es der Tangente (gestrichelte Linie) an die Funktion bis diese ihren Wert um den Dämpfungsfaktor σ verringert hat (hier: $\frac{1}{2}$).

x_ν die Abweichung von den Selbstkonsistenzgleichungen (s. (4.57)) zuordnet, ausgewertet werden. Um dessen Nullstellen zu bestimmen wenden wir nun das Newtonverfahren an (s. z.B. [41]). Dieses iterative Verfahren benutzt die Ableitungsmatrix J der Funktion, um zu einem Wert zu gelangen, der näher an einer Nullstelle liegt (s. Abb. C.2). Betrachtet man den Differenzenquotienten der Ableitung als Ausdruck zwischen altem und neuem Wert des Verfahrens, so kann man den neuen Wert nach

$$x^{neu} = x^{alt} - J^{-1}(x^{alt}) f(x^{alt}) \tag{C.5}$$

berechnen. Um einen größeren Konvergenzbereich zu erhalten, führt man noch einen Dämpfungsfaktor $0 < \sigma_\nu < 1$ ein:

$$x_\nu^{neu} = x_\nu^{alt} - \sigma_\nu \sum_\mu (J^{-1})_{\nu\mu}(x^{alt}) f_\mu(x^{alt}) \tag{C.6}$$

Wir wählten in unserem Programm $\sigma = 10^{-1}$. Die Ableitungsmatrix erhielten wir aus dem Differenzenquotienten der Funktion und ermittelten danach mit Hilfe des Gaußalgorithmus die Inverse der Matrix. Bei diesem wird für jede Zeile ν durch den Wert des Diagonalelements $J_{\nu\nu}$ geteilt. Anschließend wird die Zeile mit dem Wert $J_{\nu\mu}$ einer Spalte μ multipliziert und von der entsprechenden Zeile μ subtrahiert. Dies wiederholt man für jede Spalte. Numerische Probleme kann es nun geben, wenn dieses Diagonalelement sehr klein ist. Deshalb wänden wir im Gaußalgorithmus das Pivotisierungsverfahren an. Dieses vertauscht die Zeilen so, dass immer durch das maximale Element der Spalte geteilt

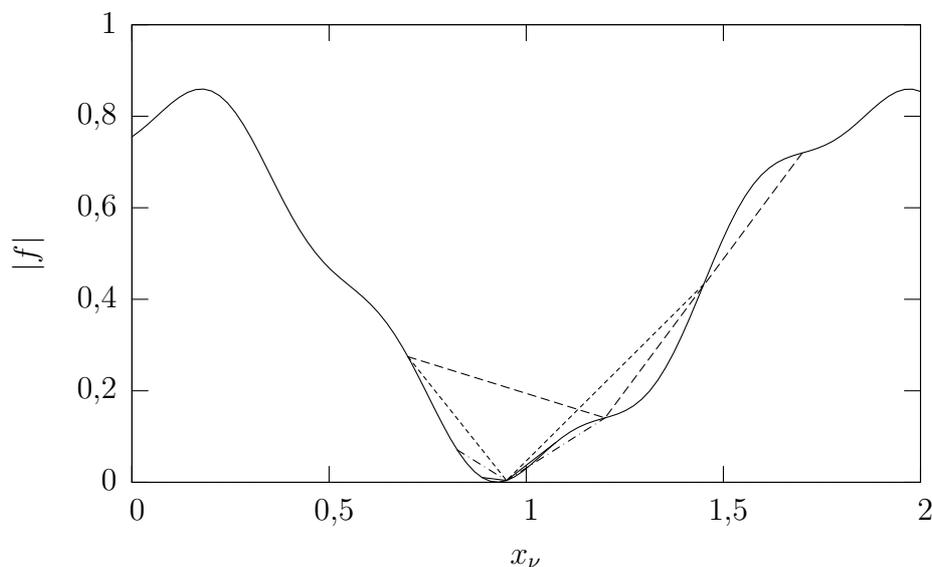


Abbildung C.3: Beim Drei-Punkte-Verfahren werden drei Punkten in einer Reihe so durch die beiden äußeren Mittelpunkte ersetzt, dass danach entweder der mittlere von ihnen dichter am Minimum der Funktion liegt oder der Fehler, der durch die beiden äußeren Punkte gegeben ist, kleiner wird.

wird. Problematisch ist es nun, wenn das Verfahren in ein Minimum gelangt (dann muss ein neuer Startwert gewählt werden) oder wenn die Nullstelle gleichzeitig ein sehr flaches Minimum ist. In diesem Fall erhöhten wir den Abstand der Stützstellen zur Berechnung der numerischen Ableitung, bis die Ableitung berechnet werden konnte, maximal jedoch 500 mal um den Faktor 5. Wir beendeten das Verfahren, wenn der Funktionswert unter 10^{-3} fiel.

Um nun zu entscheiden, ob ein gefundener Wert tatsächlich eine Nullstelle war, entwickelten wir das Drei-Punkte-Verfahren (s. Abb. C.4): Bei diesem erhöhten wir unsere bisherigen Toleranzen um ein Faktor 100. Wir nahmen den gefundenen Punkt des Newtonverfahrens und je einen Punkt pro Dimension rechts und links (im folgenden immer bezüglich dieser Dimension) der gefundenen Minimalstelle. Der Punkt in der Mitte zwischen dem linken Punkt und der Minimalstelle überprüften wir auf den Betrag seines Funktionswerts: War er kleiner als die Minimalstelle, so nahmen wir ihn als neue Minimalstelle und die frühere wurde zum rechten Punkt. War er dagegen größer, so nahmen wir ihn als linken Punkt im nächsten Iterationsschritt. Analog behandelten wir den rechten Punkt (vgl. Abb. C.3). Da wir hier nicht die Inverse bilden mussten, war dieses Verfahren, insbesondere im flachen Bereich, schneller als das Newtonverfahren. Allerdings ist für dieses Verfahren die Kenntnis eines Gebiets erforderlich, indem sich ein Minimum befindet.

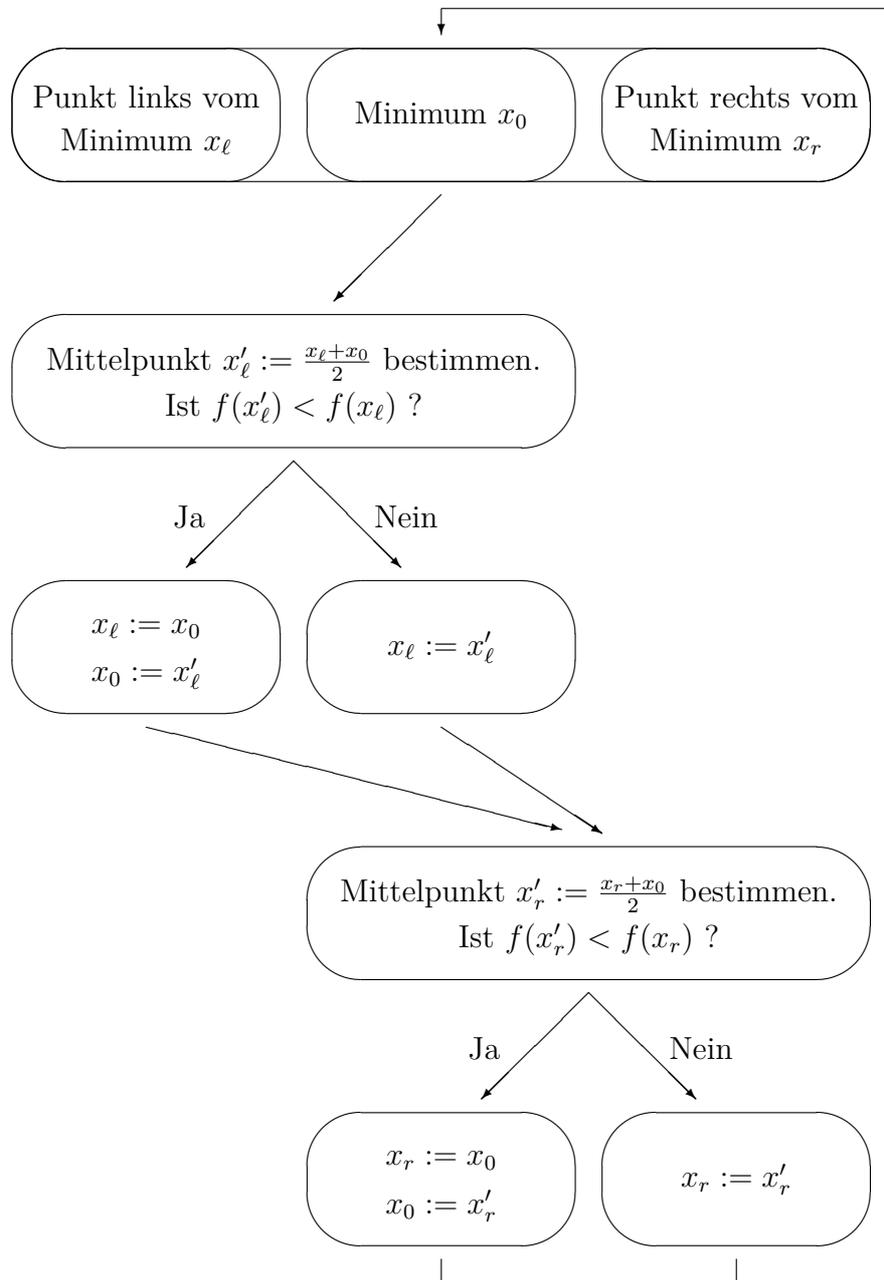


Abbildung C.4: Im Flussdiagramm des Drei-Punkte-Verfahrens werden zwei neue Punkte x'_ℓ , x'_r erzeugt. Um das Minimum zu bestimmen, ersetzen nun diese die Punkte aus der früheren Iteration.

Danksagungen

Am Ende dieser Arbeit möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Peter Wölflé für die Vergabe dieser interessanten Diplomarbeit bedanken. Ebenfalls bin ich Herrn Priv.-Doz. Dr. Ferdinand Evers für die freundliche Übernahme des Koreferats dankbar. Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Chandra Varma, der mich in angenehmen Diskussionen auf die Stromoperatoren aufmerksam machte. Bei Herrn Dr. Jan Brinckmann möchte mich bedanken für die fürsorgliche Betreuung und Hilfe, die er mir während des Jahres zu Teil werden ließ. Meiner Familie gebührt mein persönlicher Dank ohne deren Unterstützung diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre. Für ihren gesellschaftlichen Beistand bedanke ich mich zutiefst bei meinen Kommilitonen Annika Bork und Sebastian Haupt. Zum Abschluss spreche ich meinen Dank den Kollegen des Instituts der Theorie der Kondensierte Materie aus, insbesondere Dr. Peter Schmitteckert, Johannes Reuther und Ronny Thomale für die anregende Diskussionen über meine Arbeit; Dr. Verena Körting und Christine Bruch, mit denen ich das vergangene Jahr den selben Raum geteilt und viele angenehme Kaffeepausen verbracht habe.

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich diese Arbeit selbständig und unter Benutzung der angegebenen Hilfsmittel verfasst habe.

Literaturverzeichnis

- [1] J. G. Bednorz, K. A. Müller *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [2] J. D. van der Waals, *Over de continuïteit van den gas- en vloeistoestand* Universität Leiden (1873).
- [3] I. Affleck und J. Marston *Phys. Rev. B* **37**, 3774 (1988).
- [4] C. M. Varma *Phys. Rev. B* **73**, 155113 (2006).
- [5] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987);
C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams, *Sol. State Comm.* **62**, 681 (1987).
- [6] J. A. Hertz *Phys. Rev. B* **14**, 1165 (1976).
- [7] R. B. Laughlin, G. G. Lonzarich, P. Monthoux und D. Pines *Adv. Phys.* **50**, 361 (2001);
L. Fritz *Quantum Phase Transitions in Models of Magnetic Impurities* Universität Karlsruhe;
E. Dagotto *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994);
S. Sachdev *Science* **288**, 475 (2000);
P. Coleman, A. J. Schofield *Nature* **433**, 226 (2005).
- [8] M. Kugler, Ø. Fischer, Ch. Renner, S. Ono und Yoichi Ando *Phys. Rev. Lett.* **86**, 21 (2001).
- [9] H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano, T. Takahashi, M. Randeria, M. R. Norman, T. Mochiku, K. Kadowaki und J. Giapintzakis *Nature* **382**, 51 (1996).
- [10] A. V. Chubukov, D. Pines, J. Schmalian in K. H. Bennemann, J. B. Ketterson *The Physics of Superconductors Vol. I Conventional and High- T_c Superconductors*, 498, 574f, Springer-Verlag (2003);
V. Barzykin und D. Pines *Phys. Rev. B* **52**, 13585 (1995).
- [11] X. J. Zhou, T. Cuk, T. Devereaux, N. Nagaosa und Z.-X. Shen in J. R. Schrieffer, J. S. Brooks *Handbook of High-Temperature Superconductivity*, 96, 134, Springer-Verlag (2007).

- [12] J. W. Loram, K. A. Mirza, J. R. Cooper und J. L. Tallon *J. Phys. Chem. Solids* **59**, 2091 (1998).
- [13] H. R. Ott in K. H. Bennemann, J. B. Ketterson *The Physics of Superconductors Vol. I Conventional and High- T_c Superconductors* 412ff, Springer-Verlag (2003).
- [14] M. Imada, A. Fujimori und Y. Tokura *Rev. Mod. Phys* **70**, 1039 (1998).
- [15] S. Ono, Yoichi Ando, T. Murayama, F. F. Balakirev, J. B. Betts und G. S. Boebinger *Phys. Rev. Lett.* **85**, 638 (2000);
G. S. Boebinger, Yoichi Ando, A. Passner, T. Kimura, M. Okuya, J. Shimoyama, K. Kishio, K. Tamasaku, N. Ichikawa und S. Uchida *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5417 (1996).
- [16] V. Aji und C. M. Varma *Phys. Rev. Lett.* **99**, 067003 (2007).
- [17] C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams und A. E. Ruckenstein *Phys. Rev. Lett.* **63** 1996 (1989).
- [18] B. Fauqué, Y. Sidis, V. Hinkov, S. Pailhès, C. T. Lin, X. Chaud und P. Bourges *Phys. Rev. Lett.* **96**, 197001 (2006);
A. Kaminiski, S. Rosenkranz, H. M. Fretwell, J. C. Campuzano, Z. Li, H. Raffy, W. G. Cullen, H. You, C. G. Olson, C. M. Varma und H. Höchst *Nature* **416**, 610 (2002).
- [19] Y. Tanaka und S. Kashiwaya *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3451 (1995).
- [20] J. D. Jorgensen, H.-B. Schüttler, D. G. Hinks, D. W. Capone, II, K. Zhang, M. B. Brodsky, D. J. Scalapino *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1024 (1987).
- [21] K. C. Haas *Sol. State Phys.* **42**, 213 (1989);
N. Nücker, H. Romberg, X. X. Xi, J. Fink, B. Gegenheimer und Z. X. Zhao *Phys. Rev. B* **39**, 6619 (1989).
- [22] L. F. Mattheiss *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1028 (1987);
J. Yu, A. J. Freeman, J.-H. Xu *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1035 (1987).
- [23] J. Hubbard *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963).
- [24] Z.-X. Shen, J. W. Allen, J. J. Yeh, J.-S. Kang, W. Ellis, W. Spicer, I. Lindau, M. B. Maple, Y. D. Dalichaouch, M. S. Torikachvili, J. Z. Sun und T. H. Geballe *Phys. Rev. B* **36**, 8414 (1987);
A. Fujimori, S. Takekawa, E. Takayama-Muromachi, Y. Uchida, A. Ono, T. Takahashi, Y. Okabe und H. Katayama-Yoshida *Phys. Rev. B* **39**, 2255 (1989).
- [25] M. S. Hybertsen, M. Schlüter, N. E. Christensen *Phys. Rev. B* **39**, 9028 (1989);
A. K. McMahan, R. M. Martin und S. Satpathy *Phys. Rev. B* **38**, 6650 (1989);
E. B. Stechel und D. R. Jennison *Phys. Rev. B* **38**, 4632 (1989).

-
- [26] B. Srinivasan und M.-B. Lepletit *Phys. Rev. B* **66**, 024421 (2002);
P. Chudyinski, M. Gabay und T. Giamarchi *Phys. Rev. B* **76**, 161101 (2007).
- [27] M. Greiter und R. Thomale *Phys. Rev. Lett.* **99**, 027005 (2007).
- [28] M. C. Gutzwiller *Phys. Rev. Lett.* **10** 159 (1963).
- [29] W. Kohn *Phys. Rev.* **133** A171 (1964).
- [30] M. Takahashi *J. Phys. C* **10**, 1289 (1977).
- [31] N. Grewe, H. Keiter *Phys. Rev. B* **24**, 4420 (1981).
- [32] C. Gros, R. Joynt und T. M. Rice *Phys. Rev. B* **36**, 381 (1987).
- [33] S. E. Barnes *J. Phys. F* **6**, 1375 (1976).
- [34] G. B. Kotliar und A. Ruckenstein *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1362 (1986).
- [35] P. Coleman *Phys. Rev. B* **29**, 3035 (1984).
- [36] V. N. Popov und S. A. Fedotov *Sov. Phys. JETP* **67**, 535 (1988).
- [37] R. P. Feynman *Statistical Mechanics A Set of Lectures*, 231ff, The Benjamin/Cummings Publishing Company, INC (1972).
- [38] J. Brinckmann und N. Grewe *Z. Phys. B* **84**, 179 (1991);
J. Brinckmann *Über Einteilchen-Eigenschaften des d-p-Modells für Hochtemperatur-Supraleiter* Universität Darmstadt (1990).
- [39] G. Rickayzen *Green's Functions and Condensed Matter*, 349ff, Academic Press (1980).
- [40] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühling *Taschenbuch der Mathematik*, 41f, 891, 894, Verlag Harri Deutsch (2001).
- [41] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, 379ff (1992);
J. Stoer *Numerische Mathematik 1*, 305ff, Springer-Verlag (2005).