

# Topologische Dotierung im Hubbard-Modell



Diplomarbeit  
vorgelegt am  
Fachbereich Physik  
der Freien Universität Berlin

BETREUUNG: DR. CARSTEN TIMM  
UND PROF. DR. FELIX VON OPPEN

ARNE KESTING

Februar 2002



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Beschreibung der Kupferoxid-Ebenen</b>	<b>13</b>
2.1	Der Dreiband-Hamiltonian als mikroskopisches Modell der $\text{CuO}_2$ -Ebenen . . .	13
2.2	Einband-Hubbard-Modell . . . . .	18
2.3	Spin-Fermion-Modell . . . . .	19
<b>3</b>	<b>MC-Simulation eines Heisenberg-Modells mit ferromagnetischen Bindungen</b>	<b>21</b>
3.1	Mikroskopischer Ursprung der Anisotropie . . . . .	21
3.2	Modell und numerische Methode . . . . .	25
3.2.1	Spin-Hamiltonian des Modells . . . . .	25
3.2.2	Monte-Carlo-Methode, Parameter und Randbedingungen . . . . .	25
3.3	Ergebnisse . . . . .	26
3.3.1	Finite-size-Effekte . . . . .	26
3.3.2	Antiferromagnetismus und DM-Wechselwirkung . . . . .	27
3.3.3	Der Einfluß der DM-Anisotropie auf einen Vortex . . . . .	27
3.3.4	Vortex-Antivortex-Paare . . . . .	28
3.4	Zusammenfassung . . . . .	33
<b>4</b>	<b>Die Hartree-Fock-Näherung für das Einband-Hubbard-Modell</b>	<b>35</b>
4.1	Hartree-Fock-Näherung . . . . .	36
4.2	Numerische Lösungsmethode . . . . .	38
4.3	Resultate . . . . .	40
4.3.1	Antiferromagnet bei halber Füllung . . . . .	40
4.3.2	Polaron-Lösung . . . . .	42
4.3.3	Vortex-Lösung . . . . .	46
4.3.4	Untersuchung eines Vortex-Antivortex-Paares . . . . .	53
4.4	Zusammenfassung . . . . .	56
<b>5</b>	<b>Die Hartree-Fock-Näherung für das Dreiband-Hubbard-Modell</b>	<b>57</b>
5.1	Näherung des Dreiband-Hamiltonians . . . . .	58
5.2	Randbedingungen und Parameter . . . . .	59

---

5.3	Resultate . . . . .	60
5.3.1	Lösungen des undotierten Modells . . . . .	60
5.3.2	Polaron-Lösungen . . . . .	67
5.3.3	Vortex-Lösungen . . . . .	72
5.3.4	Lösungen mit zwei Löchern . . . . .	75
5.4	Zusammenfassung . . . . .	80
<b>6</b>	<b>Die slave-boson-Näherung für das Hubbard-Modell</b>	<b>83</b>
6.1	Definition der Hilfsbosonen für atomare Zustände . . . . .	83
6.2	Hamiltonian in der slave-boson-Darstellung . . . . .	86
6.3	Das Energiefunktional des Hilfsbosonen-Hamiltonians . . . . .	87
6.4	Numerische Minimierung des Energiefunktionals . . . . .	89
6.5	Zusammenfassung und Ausblick . . . . .	90
<b>A</b>	<b>Topologische Defekte im XY-Modell</b>	<b>93</b>
A.1	Das XY-Modell . . . . .	93
A.2	Vortizes als topologische Defekte im XY-Modell . . . . .	94
A.3	Vortex-Energie . . . . .	96
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>98</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>104</b>

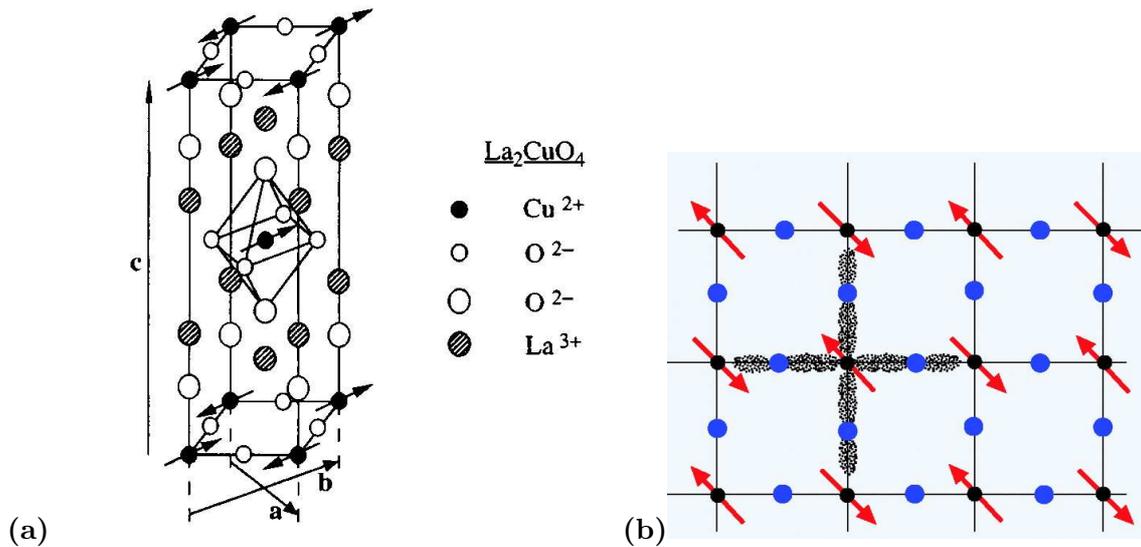
# Kapitel 1

## Einleitung

Bereits kurz nach der Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleitung 1986 durch Bednorz und Müller in *Perovskit*-Kristallen [1] wurde von Anderson auf die wesentlichen Merkmale dieser Materialien hingewiesen [2]. Das wichtigste Strukturmerkmal der *Kuprate* bilden die *Kupferoxid-Ebenen* mit einer lediglich schwachen Zwischenschicht-Kopplung, so dass es sich bei den Hochtemperatur-Supraleitern (HTSL) um *quasi-zweidimensionale Materialien* handelt. Als Beispiel ist die Kristallstruktur und das Quadratgitter der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen von  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  in Abb. 1.1 dargestellt. Die HTSL gehen durch Dotierung mit Löchern oder Elektronen aus *antiferromagnetischen Mott-Isolatoren* hervor. Ein Mott-Isolator ist ein Material mit einer für  $T \rightarrow 0$  verschwindenden Leitfähigkeit, unterscheidet sich aber grundlegend von dem Verhalten eines (gewöhnlichen) Bandisolators, bei dem die Fermi-Energie (die aufgrund des Pauli-Prinzips existiert) in einer Bandenergie-Lücke liegt. In einem Mott-Isolator ist dagegen die Leitfähigkeit aufgrund starker Coulomb-Wechselwirkung unterdrückt: Elektronenbewegung in einem exakt halbgefüllten Band erfordert die Erzeugung eines doppelt besetzten Orbitals, was aber durch die starke Coulomb-Abstoßung verhindert wird. Der *Antiferromagnetismus* des Mott-Isolators ist lediglich ein sekundärer Effekt und kommt durch den *Superaustausch* [66] zustande: Die Kopplung der Cu- und O-Ladungen in den Ebenen bewirkt im isolierenden Zustand virtuelle Hüpfprozesse zwischen Cu-Plätzen (s.u.). Die Austauschkopplung beträgt z.B. für  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (LSCO) ca. 1600K. Die Néel-Temperatur ist durch die Einschränkung auf zwei Dimensionen und die damit verbundenden starken Fluktuationseffekte reduziert, aber aufgrund der schwachen Zwischenschicht-Kopplung endlich. Sie liegt bei den Kupraten im Bereich  $T_N \sim 250 \dots 400\text{K}$ .

### Phasendiagramm

Durch Dotierung des Mott-Isolators mit Ladungsträgern wird der Antiferromagnetismus zerstört. Das Phasendiagramm “Temperatur  $T$  über der Dotierungskonzentration  $x$ ” zeigt eine starke Asymmetrie zwischen loch- und elektronendotierten Materialien, vgl. Abb. 1.2. Während die Néel-Temperatur  $T_N$  für lochdotierte Systeme bis zu einer kritischen Dotierung von  $x_c \simeq 0.02$  für LSCO, d.h. 2% Löcher pro Cu-Atom, sehr rasch abnimmt [3], weist das elektronendotierte Material  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  noch eine antiferromagnetische Pha-



**Abbildung 1.1:** (a) Kristallstruktur von  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , aus dem die supraleitende  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ -Familie durch Dotierung von Sr entsteht. Diese Materialien gehören zu der Familie der *Perovskit*-Kristalle. Das entscheidende Strukturmerkmal der HTSL bilden die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen, die in der  $a - b$ -Ebene liegen. Die elektronische Kopplung in die  $c$ -Richtung ist sehr schwach, so dass es sich bei den HTSL um *extrem anisotrope, quasi-zweidimensionale* Materialien handelt. (b) Schema der  $\text{CuO}_2$ -Ebene in den Kupraten. Die einfach besetzten  $d_{x^2-y^2}$ -Orbitale der Cu-Ionen (schwarze Kreise) bilden ein Quadratgitter. Sie verfügen im undotierten Material über ein magnetisches Moment, das sich unterhalb der Néel-Temperatur antiferromagnetisch ordnet. Die größeren Kreise zeigen die  $p$ -Orbitale des Sauerstoffs. Die Schattierung soll die Orientierung der  $p$ -Orbitale andeuten. Die Abbildungen sind entnommen aus [13] bzw. [23].

se bei viel höheren Dotierungen auf. Der Übergang unterhalb der kritischen Temperatur  $T_c$  in die *supraleitende Phase* schließt sich direkt an. Lochdotierte Materialien zeigen vor dem Übergang typischerweise noch metallisches Verhalten und bei tiefen Temperaturen die Eigenschaften eines Spin-Glasses. Die Dotierung von Ladungsträgern in der  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ -Familie wird durch Hinzufügen von Sr erreicht, das eine Verringerung der Elektronenkonzentration in den  $\text{CuO}_2$ -Ebenen bewirkt. Andere Kuprate können auf verschiedene Arten dotiert werden, z.B.  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  (YBCO) durch Veränderung der Sauerstoff-Konzentration. YBCO besitzt aufgrund von Doppelschichten und Ketten eine kompliziertere Kristallstruktur. Gemeinsam ist den Kupraten aber die quasi-zweidimensionale Schichtstruktur. Wir beschränken uns daher auf LSCO, das uns als einfaches *Modellsystem* dient. Die kritische Dotierung  $x_c \simeq 0.02$  wurde aber auch (mit der geeigneten Definition) für andere lochdotierte HTSL gemessen.

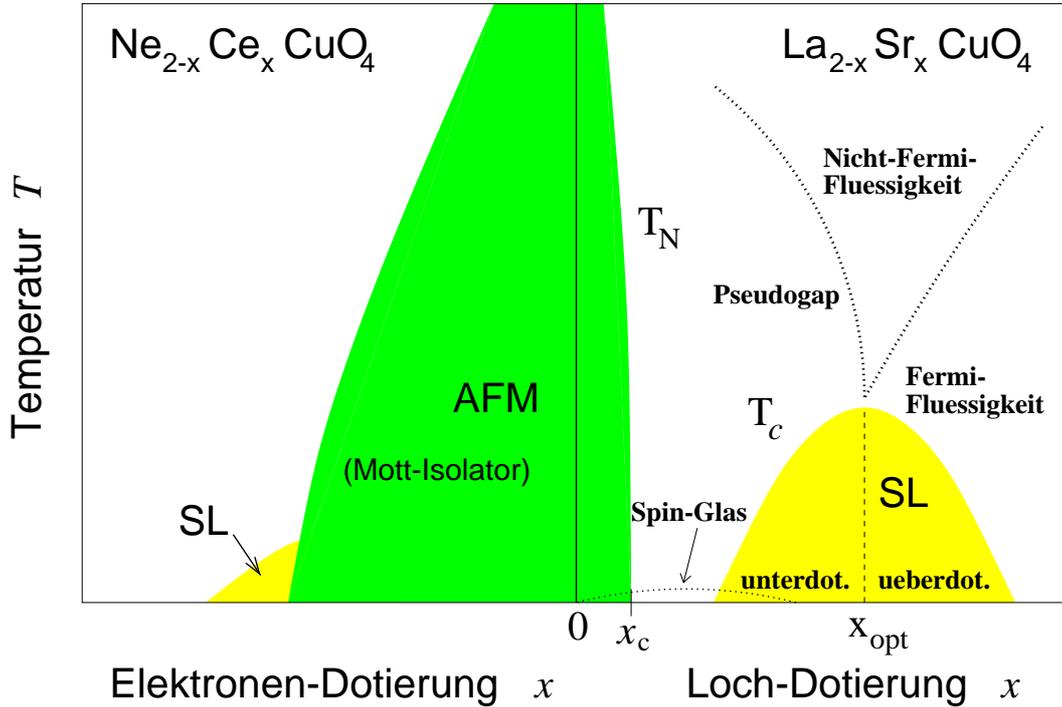
Den Effekt der *Elektronendotierung* kann man relativ leicht anhand der Zustandsdichte der HTSL verstehen. Dotierte Elektronen füllen vor allem Cu- $3d$ -Orbitale auf und zerstören dadurch die magnetischen Momente der Cu-Plätze. Das Spinsystem wird durch die zusätzlichen Elektronen lediglich verdünnt (Perkolationsproblem), was zu keinem derartig raschen Zusammenbruch wie bei der Dotierung von Löchern führt. Dotierte Löcher besetzen dagegen vor allem Sauerstoff-Plätze, so dass das auftretende magnetische Moment am Sauerstoff die benachbarten Cu-Spins ferromagnetisch koppelt und den Antiferromagnetismus frustriert [28].

Über den mikroskopischen Mechanismus dieses Effekts herrscht kein Konsens. Das Ziel dieser Arbeit ist, eine mögliche Erklärung im Rahmen einer mikroskopischen Theorie zu untersuchen (s.u.). Der Einwand, dass die Asymmetrie vor allem auf die unterschiedlichen Materialien zurückzuführen sei, ist durch die neuesten Experimente von Schön *et al.* [29] entkräftet worden. Durch einen Feld-Effekt-Transistor ist es nun möglich, die Ladungsträgerkonzentration in einer Schicht des HTSL durch die angelegte Spannung zu regeln. Dadurch ist es möglich, sowohl Elektronen- als auch Lochdotierungen an einer einzigen Probe zu regeln. Weiterhin wird der Effekt der Unordnung aufgrund chemischer Dotierung in diesen Proben weitgehend ausgeschlossen. Die ersten Ergebnisse für  $\text{CaCuO}_2$  zeigen keine wesentliche Änderung des typischen Phasendiagramms der HTSL in Abb. 1.2. Allerdings wurde bisher die antiferromagnetische Phase nicht direkt gemessen, sondern nur die supraleitende Phase.

## Eigenschaften der Kuprate

Wir wenden uns den lochdotierten HTSL zu, deren komplexes Phasendiagramm bis heute noch keine befriedigende und umfassende Erklärung gefunden hat. In den letzten Jahren sind aber durch zahlreiche neue und verbesserte Experimente viele Erkenntnisse gesammelt worden, die vielleicht einige Schlüssel für ein mikroskopisches Verständnis liefern können. In der *normalleitenden Phase* sind das zum Beispiel

- *Nicht-Fermi-Flüssigkeitsverhalten* im unterdotierten Bereich: Winkelaufgelöste Photoemissions-Spektroskopie (ARPES) zeigt *keine* Quasiteilchen-Peaks, die als wohldefinierte elektronische Anregungen gedeutet werden können, im Zustand oberhalb der supraleitenden Phase [4, 5, 6]. Weiterhin ist durch Widerstandsmessungen eine Leitfähigkeit  $\sigma \sim T$  in einem Bereich bis 700K beobachtet worden [7, 8]. In einer gewöhnlichen Fermi-Flüssigkeit ist die Elektron-Elektron-Streurate  $1/T^2$ -abhängig [9]. Diese Abhängigkeit ist lediglich im extrem überdotierten Bereich gemessen worden.
- *Eigenschaften der Ladungsträger*: Hall-Messungen im unterdotierten Bereich zeigen, dass die Ladungsträger positiv geladen sind und dass die Dichte dem Dotierungsgrad, d.h. der Lochkonzentration, entspricht [10]. Optische Messungen zeigen einen niederfrequenten “Drude tail”, was auf die Existenz von freien, sehr mobilen Ladungsträgern hindeutet [11]. Dies ist durch das Auftreten eines Bandes im mittleren IR-Bereich innerhalb der Mott-Hubbard-Lücke begleitet [12]. Das Band entwickelt sich mit der Dotierung und deutet auf die Existenz von lokalisierten Zuständen hin. Diese Messungen bestätigen sowohl die anomale  $1/T$ -Steurate als auch die Proportionalität von Dichte und Dotierung. Jedes in die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen dotierte Loch entwickelt sich nach diesem Bild in einen mobilen, positiven Ladungsträger, nicht aber in ein Quasiteilchen.
- *Magnetische Eigenschaften*: Durch Neutronenstreuung wird eine rasche Abnahme der Korrelationslänge  $\xi_{\text{AFM}}$  der antiferromagnetischen Ordnung mit steigender Dotierung gemessen. Für  $x \gtrsim 0.02$  ist die langreichweitige Ordnung (gegeben durch  $\xi_{\text{AFM}} \rightarrow \infty$ ) verschwunden. Es bestehen aber weiterhin starke kurzreichweitige Fluktuationen, wobei  $\xi_{\text{AFM}}$  durch den mittleren Lochabstand gegeben ist und insbesondere praktisch



**Abbildung 1.2:** Charakteristisches Phasendiagramm der HTSL sowohl für *elektronendotierte* als auch *lochdotierte* Systeme. Es ist eine *starke Asymmetrie* zwischen den Systemen zu erkennen. Den langsameren Abfall der Néel-Temperatur  $T_N(x)$  bei der Dotierung von Elektronen erklärt man durch die *Verdünnung des Cu-Spinsystems*, wohingegen die Dotierung von Löchern zur *Frustration* der Cu-Spins führt. Das undotierte  $\text{LaCuO}_4$  hat eine Néel-Temperatur von  $T_N \simeq 325 \text{ K}$  [13]. Mit zunehmender Dotierung von Löchern wird der antiferromagnetische Mott-Isolator bis zu einer *kritischen Dotierung* von  $x_c \simeq 0.02$  schnell zerstört. Es schließt sich eine metallische (oder für niedrige Temperaturen *supraleitende Phase*) mit ungewöhnlichem Nicht-Fermi-Flüssigkeitsverhalten an. Bei sehr tiefen Temperaturen ist Spin-Glas-Verhalten zu beobachten. Weitere Dotierung führt zu einem Übergang in ein gewöhnlicheres Fermi-Flüssigkeits-Regime im extrem überdotierten Bereich. Die Übergangstemperatur  $T_c$  in die supraleitende Phase ist ebenfalls stark dotierungsabhängig. Beim maximalen  $T_c$  spricht man von *optimaler Dotierung*  $x_{\text{opt}}$ . Entsprechend heißen die Materialien mit niedriger und höherer Dotierungskonzentration unter- bzw. überdotiert. Die maximalen Übergangstemperaturen liegen z.B. für  $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$  bei 39K und bei  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  bei 92K [42].

unabhängig von  $T$  ist [13]. Die Dotierungsabhängigkeit deutet auf die große Bedeutung des Magnetismus in diesen Materialien hin.

Die *supraleitende Phase* zeigt weitere eigenartige Merkmale, zum Beispiel:

- *Paarung und Symmetrie:* Die Fluß-Quantisierung beweist die Paarung von Ladungsträgern im supraleitenden Kondensat mit einer Ladung von  $2e$ . Durch ARPES und phasensensitive Tunnelstrom-Messungen wurde gezeigt, dass der Ordnungsparameter (OP)  $d_{x^2-y^2}$ -Wellensymmetrie der Form  $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0[\cos k_x a - \cos k_y a]$  (Wellenvektor  $\mathbf{k}$  und Gitterkonstante  $a$ ) besitzt. Der OP ist maximal für Impulse parallel zu den Cu–O–Cu-Bindungen [14, 15, 16]. Messungen der Eindringtiefe zeigen, dass die suprafluide Dichte  $\rho_s$  mit sinkender Dotierung  $x$  abnimmt. Man kann also davon ausgehen, dass die

“Cooper-Paare” aus den positiven Ladungsträgern gebildet werden. Die Frage bleibt, ob ein BCS-ähnlicher [24] Theorie-Ansatz den supraleitenden Zustand der HTSL zu beschreiben vermag.

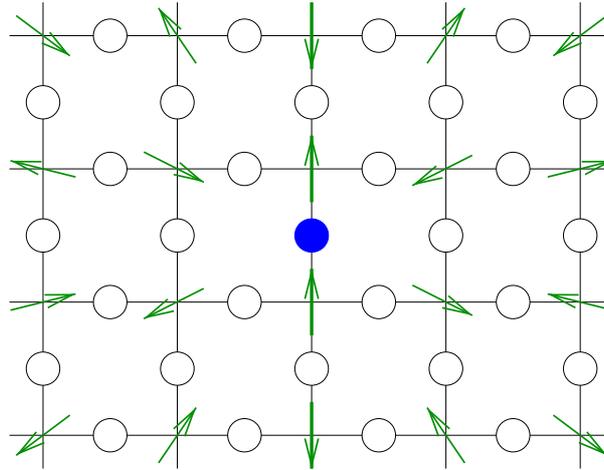
- *Suprafluide Dichte und Pseudogap*: Im unterdotierten Bereich beobachtet man, dass die kritische Temperatur durch die suprafluide Dichte bzw. die Phasensteifheit  $\rho_s$  bestimmt ist [17]. Emery und Kivelson [18] haben darauf hingewiesen, dass der Supraleiter durch zwei Energieskalen bestimmt wird. Die Größe der BCS-Anregungslücke  $\Delta$  beschreibt die Stärke der Bindung der Paare und  $\rho_s$  bestimmt die Größe der kritischen Stromdichte. Im konventionellen Supraleiter gilt  $\Delta \ll \rho_s$ , so dass der Zusammenbruch der Supraleitung durch die Zerstörung der Paare bestimmt ist. Im unterdotierten Bereich der Kuprate ist jedoch  $\rho_s \ll \Delta$  die entscheidende Größe:  $T_c \sim \rho_s$ , vgl. Uemura *et al.* [17]. Daher nimmt man an, dass Phasenfluktuationen den supraleitenden Zustand zerstören. Oberhalb von  $T_c$  mißt man ein “Pseudogap” [19], das man als inkohärente Paarung ohne langreichweitige Ordnung interpretieren kann.
- *Streifen*: Neutronenstreuung an dem undotierten, Néel-geordneten Antiferromagneten führt aufgrund der zwei Untergitter zu einem Bragg-Peak beim Wellenvektor  $\mathbf{Q} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  in Einheiten von  $\frac{2\pi}{a}$  mit der Gitterkonstanten  $a$ . Die Spin-Korrelationen im dotierten Material zeigen dagegen eine mit dem Gitter inkommensurable Struktur mit einer Aufspaltung des Bragg-Peaks [20, 21]. Tranquada *et al.* [22] konnten in dem Material  $\text{La}_{2-x-y}\text{Nd}_y\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  eine “Kristallisation” der ansonsten dynamischen Spin-Fluktuationen beobachten. Die dotierte Ladung konzentriert sich in bestimmten Gebieten in Form von “Streifen”, die antiferromagnetische Domänen trennen. Die Bedeutung der dynamischen Streifenfluktuationen für die Supraleitung ist eine wichtige und bisher unbeantwortete Frage. Die Streifen deuten darauf hin, dass *Heterogenität* in der Beschreibung der HTSL eine große Rolle spielt [23].

## Fragestellung

Allgemein nimmt man an, dass die verschiedenen Bereiche des Phasendiagramms der HTSL in enger Beziehung zueinander stehen. Daher ist ein Verständnis der antiferromagnetischen Phase mit ihrem raschen Zusammenbruch bei Lochdotierung insbesondere im Hinblick auf die vielen offenen Fragen bei den Kupraten von großer Relevanz.

Um den schnellen Zusammenbruch des Antiferromagneten aufgrund der Dotierung von Löchern zu verstehen, gehen wir von dem folgenden *physikalischen Bild* aus: In das System dotierte Löcher besetzen hauptsächlich die planaren Sauerstoff-Orbitale. Das durch die Ladung induzierte magnetische Moment auf einem Sauerstoff-Platz bewirkt eine effektiv ferromagnetische Kopplung der benachbarten Cu-Spins, wodurch die übrigen drei antiferromagnetischen Bindungen frustriert werden [28]. Um die *Frustration* gleichmäßig auf das System zu verteilen, gehen wir von der Idee aus, dass ein dotiertes Loch sich mit einer *Vortex-Spinstruktur*<sup>1</sup> umgibt, siehe Abb. 1.3. Da die Energie eines Vortex logarithmisch mit der Systemgröße divergiert,

<sup>1</sup>Im Anhang A werden die Begriffe zur Beschreibung eines Vortex als *topologischer Punktdefekt* des XY-Modells eingeführt.



**Abbildung 1.3:** In unserem Modell erzeugt die Dotierung eines Loches einen topologischen Defekt: Ein einzelnes Loch (schwarzer Kreis) auf einem Sauerstoff-Platz (Kreise) umgibt sich mit einer *Vortex-Spinstruktur*, um die Frustration aufgrund der ferromagnetischen Kopplung der zwei benachbarten Cu-Spins gleichmäßig auf das System zu verteilen. Der Vortex ist an die Ladung des Loches gekoppelt. In dieser Abbildung liegt das Vortex-Zentrum auf der Cu–O–Cu-Bindung.

werden aus dem homogenen Zustand zwei Löcher ein *Vortex-Antivortex-Paar* bilden, bei dem sich die Divergenz kompensiert und Vortex und Antivortex sich aufgrund einer attraktiven logarithmischen Wechselwirkung anziehen (siehe Anhang A). Die minimale Energie wird für den kleinsten Vortexkern-Abstand, der auf dem Gitter durch eine Gitterkonstante gegeben ist, angenommen. Die repulsive Coulomb-Wechselwirkung der Löcher fällt viel schneller ab als  $V(r) \sim \ln r$  und spielt daher eine untergeordnete Rolle.

Die Dzyaloshinskii-Moriya-Anisotropie<sup>2</sup> [64, 65] in den Kupraten induziert eine *leichte Ebene*, so dass die “verschobene Magnetisierung” (*staggered magnetization*) für kleine Energien auf einen *zweikomponentigen* Ordnungsparameter reduziert werden kann. Dadurch wird ein Vortex in der CuO<sub>2</sub>-Ebene in einem großen System stabilisiert.

Dieses Bild wird durch eine Arbeit von Timm und Bennemann [25] motiviert. In einer makroskopischen Theorie für geladene, durch Lochdotierung erzeugte Vortexpaare und ungeladene, thermisch erzeugte Paare wird der Übergang von Paaren in freie Vortizes untersucht. Die dotierungsabhängige Übergangstemperatur  $T_N(x)$  von einer langreichweitigen (antiferromagnetischen) Ordnung zu lediglich kurzreichweitigen Korrelation ist in sehr guter Übereinstimmung mit Experimenten. Als weiteres Resultat kann die kritische Dotierung von  $x_c \simeq 0.02$  Löchern pro Cu-Ion ohne freie Parameter universell bestimmt werden. Weiterhin kann dieses Bild auch das Verhalten der Kohärenzlänge  $\xi_{\text{AFM}}(x, T)$  erklären.

Da die makroskopische Theorie sehr gut die Experimente beschreibt, bleibt die Frage nach dem Realismus des vorgestellten physikalischen Bildes beim Prozess der Lochdotierung. Das **Ziel dieser Arbeit** ist, eine Rechtfertigung im Rahmen einer mikroskopischen Theorie für die Annahme von Loch-Vortex-Objekten zu geben, d.h festzustellen inwieweit *topologische Anre-*

<sup>2</sup>Diese Anisotropie ist ein Effekt der Spin-Bahn-Kopplung und wird im Kapitel 3 näher erläutert.

gungen wie Vortizes eine Rolle bei der Dotierung mit Löchern in den Kupraten spielen. Als zentrale Fragestellung werde ich daher die *Stabilität eines Vortex-Antivortex-Grundzustandes* ( $T = 0$ ) in den elektronischen Modellen zur Beschreibung der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen untersuchen.

In der Literatur sind bereits einige Ergebnisse zu dieser Fragestellung veröffentlicht. So haben Vergés *et al.* [75] das Hubbard-Modell<sup>3</sup> in der Hartree-Fock-Näherung untersucht und u. a. metastabile Vortex-Anregungen im leicht dotierten System gefunden. Berciu und John [80, 79] gehen von einer ähnlichen Fragestellung aus, betrachten aber ein modifiziertes Hubbard-Modell mit nicht ausschließlich lokaler Coulomb-Wechselwirkung. In diesem “spin-flux”-Modell bewirkt eine Art Spin-Bahn-Kopplung, dass die Wellenfunktion eines Elektrons bei einem Umlauf auf einer Plaquette eine Drehung von  $2\pi$  im Spinraum erfährt. Die Autoren finden zwar stabile Vortex-Antivortex-Paare, aber die physikalische Idee des *spin-flux*-Modells erscheint willkürlich zu sein. Diese Veröffentlichungen bilden einen wichtigen Ausgangspunktspunkt für die Untersuchungen in meiner Arbeit. Seibold [26] geht mit der “slave boson”-Näherung für das Einband-Hubbard-Modell über das Hartree-Fock-Niveau hinaus und findet ein Vortex-Antivortex-Paar als stabilen Grundzustand des mit zwei Löchern dotierten Systems. Im kontinuierlichen nichtlinearen  $\sigma$ -Modell findet Marino [27] mit Löchern verbundene Vortizes, nennt diese aber Skymionen. Eine physikalische Erklärung wird aber nicht gegeben.

Andere Autoren gehen ebenfalls davon aus, dass topologische magnetische Anregungen mit dem Prozeß der Lochdotierung verbunden sind. Wiegmann [31] betrachtet die Abbildung von Hubbard-Operatoren auf das nichtlineare  $\sigma$ -Modell. Bei Lochdotierung findet er Skymionen, worunter er zylindrische antiferromagnetische Domänen versteht. Shraiman und Siggia [34] gehen vom *t-J-Modell* aus und finden, dass bei  $T = 0$  ein mobiles Loch eine dipolare Spinkonfiguration im zweikomponentigen Ordnungsparameterfeld ( $\rightarrow$  Vortex-Antivortex-Paar) induziert. Gooding [30] geht vom *t-t'-J-Modell* aus und beschränkt die Hüpfprozesse von Löchern auf eine Plaquette. Es ergibt sich ein Skymionen-Grundzustand. Haas *et al.* [33] vergleichen die Skymionen-Lösungen des *t-J-Modells* mit Experimenten, in denen die magnetische Ordnung um Löcher unterdrückt ist. Morinari [32] ergänzt das Spin-Fermion-Modell um einen Spin-Bahn-Kopplungsterm. Durch das Ausintegrieren der Löcher erhält er einen Chern-Simons-Term, der bewirkt, dass sich Löcher wie Skymionen verhalten.

## Gliederung

An diese Einleitung schließt sich ein Theorie-Kapitel an, in dem die benötigten Modelle eingeführt werden. In dem Kapitel 3 gehe ich für die Bearbeitung der Fragestellung von einem klassischen Spin-Modell mit Berücksichtigung der Dzyaloshinskii-Moriya-Anisotropie aus, das mit einer Monte-Carlo-Methode gelöst wird. Es stellt sich heraus, dass dieser Zugang für das Vielteilchen-Problem nicht ausreicht. In den Kapiteln 4 und 5 betrachte ich daher die Lösungen des Einband- und Dreiband-Hubbard-Modells in der Hartree-Fock-Näherung und vergleiche die Ergebnisse mit den o.g. Arbeiten. Insbesondere für das Dreiband-Modell ist die Frage nach der Stabilität eines Vortex-Antivortex-Paares noch nicht explizit untersucht worden. Als Hauptergebnis wird sich aber herausstellen, dass die *Korrelationseffekte des fermionischen Systems* durch die Hartree-Fock-Näherung nicht ausreichend berücksichtigt werden,

<sup>3</sup>Das Hubbard-Modell wird im nächsten Kapitel eingeführt.

so dass eine verbesserte Näherungsmethode für eine eindeutige Beantwortung der Frage nach der Stabilität von Vortex-Antivortex-Paaren herangezogen werden muß. Im Kapitel 6 werde ich die *slave-boson*-Näherung des Einband-Hubbard-Modells von Seibold [26] vorstellen und auf das Dreiband-Modell erweitern. Der letzte Abschnitt des 6. Kapitels faßt die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen und schließt mit einem Ausblick.

## Kapitel 2

# Theoretische Beschreibung der Kupferoxid-Ebenen

Die Hochtemperatur-Supraleiter (HTSL) sind Materialien mit einer komplizierten *Perovskit-Kristall-Struktur*. Für eine mikroskopische Beschreibung benötigt man daher ein *Minimalmodell*, das einerseits die Komplexität des Systems reduziert, andererseits aber die wesentlichen physikalischen Erscheinungen einschließt. Das *Dreiband-Hubbard-Modell* hat sich als Ausgangspunkt einer realistischen Beschreibung der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen etabliert und wird im ersten Abschnitt eingeführt. Je nach Ansatz können daraus einfachere, *effektive Modelle* wie das *Einband-Hubbard-Modell*, das *Spin-Fermion-Modell* oder das *Heisenberg-Modell* abgeleitet werden, die z.T. in dieser Arbeit näher untersucht werden.

### 2.1 Der Dreiband-Hamiltonian als mikroskopisches Modell der $\text{CuO}_2$ -Ebenen

Die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen stellen das wichtigste Strukturmerkmal der Hochtemperatur-Supraleiter dar. Die Cu–O-Bindungen in den Ebenen sind sehr stark und auch die wesentlichen Ladungstransferprozesse finden in diesen Ebenen statt. Daher beschränken wir uns in einer ersten vereinfachenden Annahme bei der Beschreibung der elektronischen Struktur der HTSL auf diese  $\text{CuO}_2$ -Ebenen.<sup>1</sup> Die  $\text{Cu}^{2+}$ -Ionen haben neun Elektronen in den fünf  $d$ -Orbitalen und die  $\text{O}^{2-}$ -Ionen besitzen sechs Elektronen in den drei  $p$ -Orbitalen. Dieses Problem kann aber noch reduziert werden. Durch die näherungsweise tetragonale Symmetrie der Kuprate wird die Entartung der  $3d$ - und  $2p$ -Niveaus aufgehoben. Im Kristallfeld liegen die  $3d_{x^2-y^2}$  und die  $2p_x$  bzw.  $2p_y$  Zustände energetisch am höchsten. XAS-Untersuchungen mit polarisiertem Licht [35] an den Modellsystemen  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  und  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  zeigen ebenfalls, dass in den relevanten Dotierungsbereichen mindestens 95% der  $d$ -Zustände und 85% der  $p$ -Zustände in der Nähe der Fermi-Energie die erwähnte  $3d_{x^2-y^2}$  bzw.  $2p_{x,y}$ -Symmetrie besitzen. Die ande-

---

<sup>1</sup>Es können natürlich einige Eigenschaften des Phasendiagramms wie z.B. eine *endliche* Néel-Temperatur erst durch eine *Kopplung* der Ebenen erklärt werden. Wir hoffen aber, dass diese Effekte relativ leicht berücksichtigt werden können, nachdem die wesentlichen physikalischen Eigenschaften der Ebenen verstanden sind.

ren Zustände sind bei kleinen Energien um das Fermi-Niveau vollständig besetzt und können für eine Beschreibung vernachlässigt werden. Das einfachste mikroskopische Modell berücksichtigt daher die in der Ebene liegenden, mit je zwei Elektronen besetzten  $p_{x,y}$ -Orbitale des Sauerstoffs und das halbgefüllte  $d_{x^2-y^2}$ -Cu-Orbital, sowie mögliche Hüpfprozesse zwischen ihnen aufgrund von *Hybridisierungen*.

Ein einfaches Bandbild zeigt durch das halbgefüllte antibindende<sup>2</sup> Band ein metallisches Verhalten, wie es auch LDA-Rechnungen bestätigen [36]. Die undotierten Kuprate sind stattdessen *antiferromagnetische Isolatoren*. Wir müssen daher zusätzlich die *starken Wechselwirkungen* berücksichtigen, die insbesondere durch die lokalisierten  $d$ -Zustände auftreten [37]. Wir wählen daher als Ausgangspunkt für eine Beschreibung der CuO<sub>2</sub>-Ebenen den von Emery vorgeschlagenen *Dreiband-Hubbard-Hamiltonian*, der zusätzlich die starken elektronischen Korrelationen durch onsite Coulomb-Terme zu berücksichtigen versucht [38, 39]:

$$\mathcal{H}_{3B} = \epsilon_d \sum_{i,\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \epsilon_p \sum_{j\alpha\sigma} p_{j\alpha\sigma}^\dagger p_{j\alpha\sigma} - t_{pd} \sum_{\langle ij \rangle, \alpha, \sigma} g_{ij}^\alpha (p_{j\alpha\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + h.c.) \quad (2.1)$$

$$- t_{pp} \sum_{\langle jj' \rangle} \tilde{g}_{jj'} (p_{j\sigma}^{x\dagger} p_{j'\sigma}^y + h.c.) + U_d \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d + U_p \sum_{j,\alpha} n_{j\alpha\uparrow}^p n_{j\alpha\downarrow}^p. \quad (2.2)$$

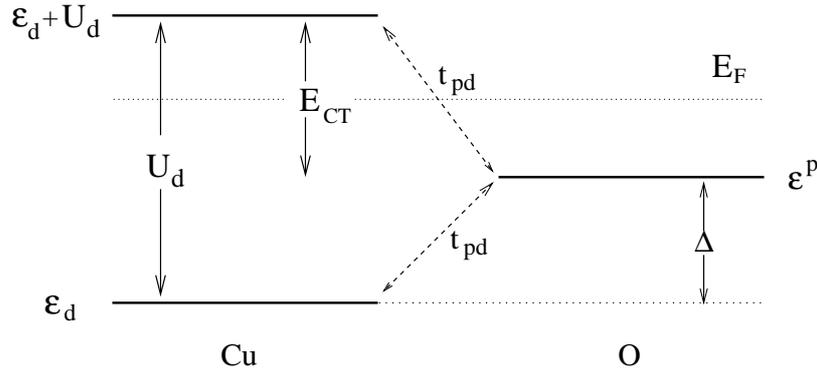
$p_{j\alpha}$  und  $d_i$  sind fermionische Vernichtungsoperatoren für ein Elektron in einem  $O-2p_\alpha$ ,  $\alpha = (x, y)$  bzw. Cu- $d_{x^2-y^2}$  Orbital an einem Gitterplatz  $j$  bzw.  $i$  eines zweidimensionalen Quadratgitters mit Spin  $\sigma$ .  $n_{i\sigma}^d = d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}$  ist der Dichteoperator der Cu-Elektronen.  $\langle ij \rangle$  beschränkt die Summe auf Hüpfprozesse zwischen nächsten Nachbarn. Die Platzenergie  $\epsilon_d$  ist die Energiedifferenz der Zustände  $3d^8$  und  $3d^9$  an einem Kupferplatz. Entsprechend bezeichnet  $\epsilon_d + U_d$  die Differenz der  $3d^9$  und  $3d^{10}$  Konfiguration. Dadurch ist die bei Doppelbesetzung vorhandene lokale Coulombabstoßung  $U_d$  der Kupferelektronen definiert.  $\epsilon_p$  bezeichnet die Energiedifferenz der Zustände  $2p^6$  und  $2p^5$ . Die Energieskalen sind in der Abb. 2.1 dargestellt.

Die Coulomb-Wechselwirkung am Sauerstoff  $U_p$  wird in dieser Arbeit i. allg. vernachlässigt, da lediglich der undotierte bzw. der mit einem Loch oder zwei Löchern extrem gering dotierte Bereich untersucht wird. Die Wechselwirkung  $U_p$  ist aber für einen doppelt besetzten O-Gitterplatz irrelevant. Eine Coulombabstoßung zwischen Kupfer- und Sauerstoff-Zuständen wurde in diesem Modell nicht berücksichtigt. Die Hybridisierung der Cu- und O-Orbitale benachbarter Plätze wird durch das Transferintegral  $t_{pd}$  und die der  $p$ -Orbitale untereinander durch  $t_{pp}$  Rechnung getragen. Dabei ist  $t_{pd}$  der dominierende Term in den CuO<sub>2</sub>-Ebenen [36].

Die Vorzeichenfaktoren  $g_{ij}^\alpha$  und  $\tilde{g}_{jj'}$  berücksichtigen die verschiedenen Paritäten  $\pm 1$  der  $p$ - und  $d$ -Wellenfunktionen bei Hüpfprozessen. Sie ergeben sich aus der Abb. 2.2.

Die Parameter des Dreiband-Hubbard-Modells sind die *Coulomb-Wechselwirkung*  $U_d$ , die *Differenz der Platzenergien*  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d$  sowie die *Transferintegrale*  $t_{pd}$  und  $t_{pp}$ . Als *Ladungstransferlücke* bezeichnet man den Energieniveau-Abstand zwischen den Zuständen um die Fermi-Energie, d.h. zwischen dem höchsten besetzten und dem untersten unbesetzten Zustand. Im Elektronenbild ist die Ladungstransferlücke durch  $E_{CT} = U_d - \Delta$  gegeben (im Lochbild ist  $E_{CT} = \Delta$ ). In der Literatur ist eine Vielzahl von Parametersätzen diskutiert worden. Ge-

<sup>2</sup>Eine Erläuterung erfolgt im Laufe dieses Kapitels.



**Abbildung 2.1:** Die Energieskalen des Dreiband-Modells im *Elektronenbild*.  $\epsilon_d$  und  $\epsilon_p > \epsilon_d$  sind die Platzenergien der Cu- bzw. O-Plätze.  $U_d$  bezeichnet die Coulomb-Abstoßung bei Doppelbesetzung eines Cu-Orbitals.  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d > 0$  ist die Energiedifferenz der Platz-Energien von Sauerstoff und Kupfer. Die *Ladungstransferlücke*  $E_{CT}$  ist die Energiedifferenz zwischen dem obersten besetzten  $p$ -Zustand und dem untersten unbesetzten Zustand im oberen Hubbard-Band. Im Elektronenbild gilt  $E_{CT} = U_d - \Delta$ . Das Fermi-Niveau  $E_F$  ohne Dotierung bei  $T = 0$  ist ebenfalls angegeben.

**Abbildung 2.2:** Anordnung der atomaren Cu- $d_{x^2-y^2}$  und O- $p_{x,y}$ -Wellenfunktionen mit Phasen in den CuO<sub>2</sub>-Ebenen. Die Einheitszelle besteht – durch die gestrichelte Linie angedeutet – aus einem zentralen Cu und zwei Sauerstoff-Plätzen.  $\epsilon_p$  und  $\epsilon_d$  bezeichnen die Platzenergien im Dreiband-Modell,  $t_{pp}$  und  $t_{pd}$  sind die hopping-Matrixelemente und  $U_d$  stellt die Coulomb-Wechselwirkung dar.

rade die Bestimmung von  $U_d$  aus ersten Prinzipien ist problematisch, so dass häufig  $U_d/t_{pd}$  und  $\Delta/t_{pd}$  als freie Parameter an experimentelle Resultate angepaßt werden. Wir werden im weiteren von den folgenden effektiven Parametern ohne explizite Berücksichtigung von  $t_{pp}$  für das Modellsystem La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub> ausgehen [46, 96]:

$$U_d = 8 \text{ eV}, \quad t_{pd} = 1 \text{ eV}, \quad \Delta = \epsilon_p - \epsilon_d = 5 \text{ eV} \quad \text{und} \quad E_{CT} = 3 \text{ eV}. \quad (2.3)$$

Im wechselwirkungsfreien Fall  $U_d \equiv 0$  kann man durch Diagonalisierung im Fourierraum die Dispersionen der Elektronen in den CuO<sub>2</sub>-Ebenen bestimmen. Man erhält drei Bänder mit unterschiedlichem Bindungscharakter, vgl. Abb. 2.3(a). Als *bindendes Band* bezeichnet man ein von Cu-Zuständen dominiertes Band, dem aber aufgrund der Hybridisierung Sauerstoff-Zustände beigemischt sind, was zu einer *Energieabsenkung* führt. Beim *antibindenden Band* ist die Situation genau umgekehrt. Es ist von O-Zuständen dominiert, aber die Hybridisierung mit den Kupfer-Zuständen führt zu einer *Energieanhebung*. Als *nichtbindendes Band* bezeichnet man eine Linearkombination von  $p$ -Zuständen, die keinen Überlapp mit den  $d_{x^2-y^2}$ -Orbitalen hat und somit auch nicht die Korrelationen der Cu-Elektronen spürt. Es entkoppelt vom Restsystem und bildet im Fall  $t_{pp} = 0$  in der Zustandsdichte eine  $\delta$ -Funktion bei  $\epsilon_p$ .

Der Antiferromagnetismus der undotierten Kuprate ist eine direkte Konsequenz des *Superaustausches* [66] der Cu-Spins. Für ein Cu-Loch pro Einheitszelle, d.h. bei halber Füllung,

kann das Dreiband-Hubbard-Modell durch Störungsrechnung für große  $U/t$  auf das zweidimensionale *Heisenberg-Modell* als ein *effektives Spin-Modell* abgebildet werden [55, 39],

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = J_{\text{sx}} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (2.4)$$

Die antiferromagnetische Austausch-Kopplung  $J_{\text{sx}}$  ist in zweiter Ordnung durch virtuelle Hüpfprozesse und durch die Größe der Ladungstransferlücke  $E_{\text{CT}} = U_d - \Delta$  gegeben [39, 73],

$$J_{\text{sx}} = \frac{t^4}{(U - \Delta)^3} + \frac{t^4}{U(U - \Delta)^2}. \quad (2.5)$$

Durch die Einbeziehung der Sauerstoff-Plätze ist der Austausch von vierter Ordnung im Hopping. Das Heisenberg-Modell wiederum beschreibt sehr gut die Spin-Dynamik der undotierten Kuprate, vgl. [13].

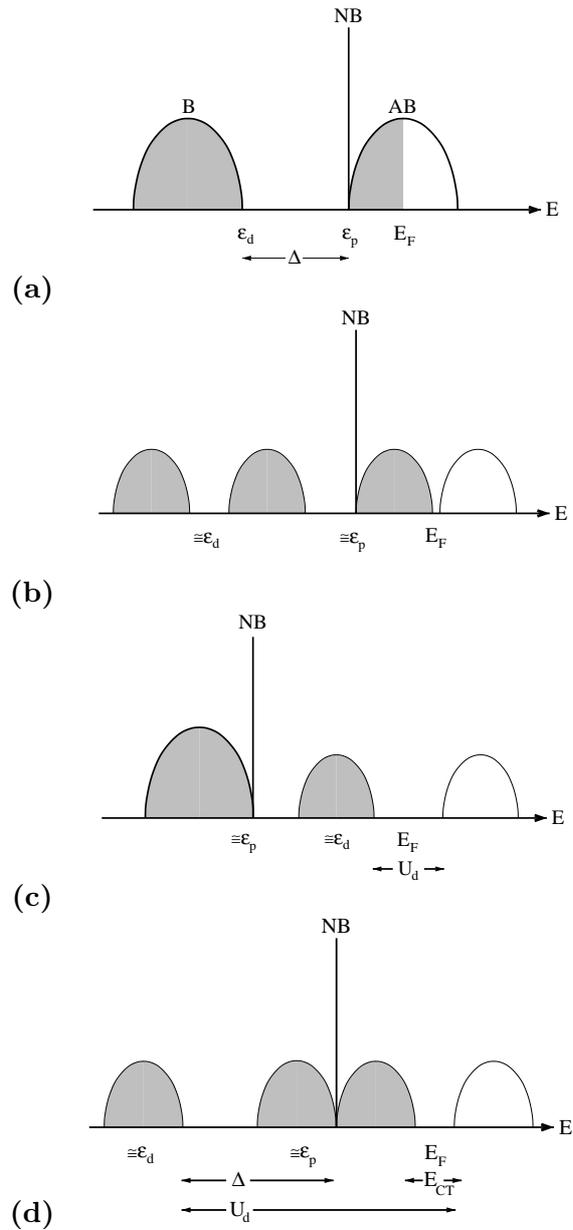
Mögliche Grundzustände des Dreiband-Hubbard-Modells können nach dem *Zaanen-Sawatzky-Allen*-Schema anhand der Parameter  $U_d$  und  $E_{\text{CT}}$  klassifiziert werden [48, 52]. Dabei kann man die folgenden drei Situationen unterscheiden:

- Ein typisches *Übergangsmetall* ohne Korrelationen der  $d$ -Elektronen für den Fall  $U_d = 0$ . Die Fermi-Energie liegt im antibindenden Band, siehe Abb. 2.3(a).
- Ein *Mott-Hubbard-Isolator* für den Fall  $t_{pp}, t_{pd} \ll U_d < \Delta$ . Für das Regime der HTSL mit  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d > 0$  wird das bindende Band von den energetisch niedrigeren Cu-Zuständen dominiert. An der Fermi-Energie im antibindenden Band, dem lediglich ein geringer Anteil von Cu-Zuständen beigemischt ist, verursacht die starke Coulomb-Abstoßung daher eine *kleine* Band-Aufspaltung. Aufgrund der Korrelationen ist eine (stärkere) Aufspaltung auch im bindenden Band zu erwarten, siehe Abb. 2.3(b).  
Eine Bandaufspaltung von der Größenordnung  $U_d$  erhält man für das Regime mit  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d < 0$ , in dem die Sauerstoff-Zustände energetisch niedriger liegen als die Cu-Zustände.<sup>3</sup> Die Fermi-Energie liegt in der Mott-Hubbard-Lücke zwischen dem unteren und dem oberen (Cu-dominierten) Hubbard-Band, siehe Abb. 2.3(c).
- Ein *Ladungstransfer-Isolator* für  $t_{pp}, t_{pd} \ll U_d$  und  $U_d > \Delta$ . In diesem Regime liegen die Sauerstoff-Zustände ( $\simeq \epsilon_p$ ) zwischen den durch die starke Wechselwirkung aufgespalteten Hubbard-Bändern ( $\simeq \epsilon_d$  bzw.  $\simeq \epsilon_d + U_d$ ). Ohne Dotierung ist das obere Hubbard-Band unbesetzt. Ein in das System dotiertes Loch geht vorzugsweise in das vollbesetzte nichtbindende Sauerstoff-Band, siehe Abb. 2.3(d).

Durch spektroskopische Methoden wurde gezeigt, dass dotierte Löcher vor allem auf Sauerstoffplätzen lokalisieren [49, 50, 51]. Auch die orbitale Zusammensetzung der Bänder oberhalb und unterhalb der Bandlücke weist darauf hin, dass es sich bei den Kupraten um *Ladungstransferisolatoren* handelt [35]. Das Dreiband-Hubbard-Modell mit Parametern im Ladungstransfer-Regime  $U_d > \Delta$  bildet daher unseren Ausgangspunkt für eine theoretische Beschreibung der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen.

<sup>3</sup>Durch die Verwechslung von Elektron- und Lochbild ist diese Situation im Review von Brenig [52] fälschlicherweise mit dem Kuprat-Regime identifiziert worden.

## 2.1 Der Dreiband-Hamiltonian als mikroskopisches Modell der CuO<sub>2</sub>-Ebenen 17



**Abbildung 2.3:** Das *Zaanen-Sawatzky-Allen-Schema* für das Einteilchen-Spektrum von Übergangsmetall-Verbindungen mit Elektronenbesetzung: **(a)** Metall. Das bindende (B) und das nichtbindende (NB) Band sind vollbesetzt. Das antibindende (AB) Band ist nur halbgefüllt. **(b)** *Mott-Hubbard-Isolator* mit  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d > 0$ . Die starke Wechselwirkung der Cu-Elektronen verursacht lediglich eine kleine Aufspaltung des antibindenden Bandes. Der größere Anteil der Cu-Zustände im bindenden Band ist durch die stärkere Band-Aufspaltung erkennbar. **(c)** *Mott-Hubbard-Isolator* mit  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d < 0$ . In diesem Regime liegen die Sauerstoff-Zustände energetisch unterhalb des Cu. Das vom Cu dominierte energetisch höher liegende Band spaltet in ein unteres (LHB) und ein oberes (UHB) Hubbard-Band auf. Die Mott-Hubbard-Energielücke ist von der Größenordnung  $U_d$ . **(d)** *Ladungstransferisolator*. Die Cu-Zustände liegen unter- und oberhalb der Sauerstoff-Zustände. Die Ladungstransferlücke  $E_{CT}$  trennt den obersten besetzten  $p$ -artigen Zustand und den untersten unbesetzten  $d$ -artigen Zustand.

Zhang und Rice [72] haben den Fall  $\epsilon_p > \epsilon_d$  betrachtet, in dem dotierte Löcher Sauerstoff-Plätze besetzen. Sie haben angenommen, dass sich ein Loch auf die vier, einen Cu-Platz umgebenden Sauerstoff-Plätze verteilt und dass die vier  $p$ -Orbitale einen symmetrischen oder antisymmetrischen Zustand bilden. In ihrer Arbeit haben sie in 2. Ordnung Störungsrechnung gezeigt, dass für den symmetrischen Zustand der *Singulett*-Zustand mit dem zentralen  $\text{Cu}^{2+}$ -Ion energetisch günstiger als der *Triplet*-Zustand ist. Der antisymmetrische, nichtbindende Zustand liegt energetisch zwischen Singulett und Triplet. Beschränkt man sich auf den Singulett-Unterraum, so ist das Hinzufügen eines Loches im  $p$ -Band gleichwertig mit dem Entfernen eines Cu-Spins aus dem Gitter. Dadurch kann man die Abbildung auf ein *effektives Einband-Modell* ohne explizite Berücksichtigung der Sauerstoff-Zustände vornehmen.<sup>4</sup> Ob die Beschränkung auf ein Einband-Modell im Fall der Kuprate gerechtfertigt ist, ist in der Literatur umstritten [28, 53, 54, 55]. Die deutliche Asymmetrie des Phasendiagramms von Loch- und Elektronendotierung legt nahe, dass man mit diesem Bild vorsichtig sein sollte. Allerdings waren bis vor kurzem nur Experimente an unterschiedlichen Materialien möglich. Durch neueste Experimente von Schön *et al.* konnte diese Asymmetrie der Dotierung aber auch anhand *derselben* Probe gezeigt werden [29].

## 2.2 Einband-Hubbard-Modell

Folgt man der Argumentation von Zhang und Rice [72], so ist die Beschränkung auf ein *effektives Einband-Modell* möglich. Obwohl dieses Vorgehen – wie erwähnt – umstritten ist, besitzt ein einfacheres Modell wie z.B. das *Einband-Hubbard-Modell* eine hohe Attraktivität<sup>5</sup> und wurde auch intensiv in der Literatur untersucht. Wir betrachten deshalb in dieser Arbeit ebenfalls das *Einband-Hubbard-Modell* [40], das durch den folgenden Gitterhamiltonian definiert ist,

$$\mathcal{H}_{1B} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (2.6)$$

Der Gitterplatz  $i = (i_x, i_y)$  auf einem zweidimensionalen Quadratgitter beschreibt ein einzelnes Atom-Orbital mit der Platzenergie  $\epsilon_i = 0$ . Das Orbital kann maximal durch zwei Fermionen mit verschiedenen Spins besetzt sein. Der Operator  $c_{i\sigma}$  vernichtet ein Elektron am Gitterplatz  $i$  mit Spin  $\sigma$ . Die Summen laufen über alle Gitterplätze  $i$  und über die  $z$ -Komponente des Spins,  $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ . Der erste Term beschreibt das *Hüpfen* der Teilchen von einem Platz zu einem anderen mit der Amplitude  $t_{ij} = \langle i|T|j \rangle$ . Es ist beschränkt auf Hüpfprozesse zwischen nächsten Nachbarn, notiert durch  $\langle ij \rangle$ .  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  ist der lokale Dichteoperator mit der Spinkomponente  $\sigma$ . Der zweite Term beschreibt die *effektive Coulomb-Wechselwirkung*, die auf den führenden onsite-Anteil  $U_{ii} \equiv U$  beschränkt ist. Die Parameter des Hubbard-Modells sind das Verhältnis  $U/t$  und die Anzahl  $N_e$  der Teilchen im System.

<sup>4</sup>Dabei konzentrieren wir uns im nächsten Abschnitt auf das *Einband-Hubbard-Modell*. Für den Fall starker Kopplung kann man daraus noch das *t-J-Modell* erhalten, das sich wiederum ohne Dotierung auf das Heisenberg-Modell reduziert.

<sup>5</sup>Das Hubbard-Modell als das "klassische" Modell stark wechselwirkender Elektronen ist natürlich *a priori* ein faszinierendes Studienobjekt.

Durch die Coulomb-Wechselwirkung wird das Band in ein unteres und oberes Hubbard-Band aufgespalten. Die Bänder sind durch die *Mott-Hubbard-Gap* getrennt. Das  $p$ -Band des Dreiband-Modells kann dadurch auf das untere Hubbard-Band des Einband-Modells abgebildet werden und entsprechend wird das UHB durch das obere Hubbard-Band im Einband-Fall dargestellt. Die Ladungstransferlücke von  $E_{CT} = U_d - \Delta$  des Dreiband-Modells wird durch die Hubbard-Wechselwirkung  $U$  simuliert. Wir betrachten daher vor allem den Parameterbereich *mittlerer Kopplung*, d.h.  $U/t \simeq 5 \dots 10$ .

## 2.3 Spin-Fermion-Modell

Nimmt man nicht das Bild von Zhang und Rice, sondern das *physikalischere* Dreiband-Modell als Ausgangspunkt für ein einfaches, effektives Modell, so kann man im Grenzfall starker Kopplung  $U_d \gg t_{pd}$  das *Spin-Fermion-Modell* herleiten, indem man das Hüpfen als Störung bis zur vierten Ordnung behandelt [57, 56, 55]. In diesem Grenzfall ist eine Lochbesetzung von Cu-Plätzen sehr ungünstig, so dass die Cu-Ladungsfreiheitsgrade nicht mehr explizit eingehen. Man erhält dadurch einen Hamiltonian, der nur noch das O–O-Hopping und die magnetischen Wechselwirkungen der Sauerstoff- mit den Cu-Spins enthält:

$$\mathcal{H}_{\text{SF}} = \epsilon_p \sum_{j,\sigma} p_{j\sigma}^\dagger p_{j\sigma} + \sum_{jj' \in \{i\}} \bar{t}_{jj'} p_{j\sigma}^\dagger p_{j'\sigma} \quad (2.7)$$

$$+ \sum_i \sum_{jj' \in \{i\}} J_{ijj'}^K \mathbf{S}_i \cdot p_{j\alpha}^\dagger \underline{\sigma}_{\alpha\beta} p_{j'\beta} + J_{\text{sx}} \sum_{\langle i,i' \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i'} \quad (2.8)$$

Der erste Term definiert das Energieniveau  $\epsilon_p$  der Sauerstoff-Orbitale. Der kinetische Term enthält sowohl O–O-Hopping als auch effektive, über Cu-Plätze vermittelte Hüpfprozesse. Der dritte Term beschreibt die Kopplung der Cu-Spins mit den umliegenden Sauerstoff-Spins aufgrund von Lochdotierung. Dabei ist  $\underline{\sigma}$  der Vektor der Pauli-Matrizen. Die Cu-Spins werden weiterhin durch den antiferromagnetischen Heisenberg-Hamiltonian erfaßt. Die Phasenfaktoren der  $d$ - und  $p$ -Orbitale sind in  $\bar{t}_{jj'}$  und  $J_{ijj'}^K$  enthalten, vgl. Abb. 2.2. Die Summen laufen sowohl über  $p_x$ - als auch über  $p_y$ -Zustände.

Eine alternative Herleitung des Spin-Fermion-Modells aus dem Dreiband-Modell wurde kürzlich von Timm [73] im *Funktionalintegral-Formalismus* vorgenommen. Um die Ladungsfreiheitsgrade auszuintegrieren, führt man zur *Hubbard-Stratonovich-Entkopplung* [58, 59] des Wechselwirkungsterms ein *Vektorhilfsfeld* als lokale Spin-Quantisierungsachse ein [60]. Die Cu-Ladungsfreiheitsgrade kann man in einer *Sattelpunktsnäherung* ausintegrieren, wobei die Kopplung an die anderen Felder ( $p$ -Fermionen, Hubbard-Stratonovich-Felder) durch eine *Kumulantenentwicklung* behandelt wird. Für eine große Coulomb-Wechselwirkung  $U$  liegen die Cu-Bänder energetisch weit auseinander, so dass die Cu-Zustände näherungsweise instantan relaxieren. Dadurch kann man die Zeitdifferenz in den externen Feldern vernachlässigen. Das *effektive, Cu-vermittelte Hüpfen* bis zur zweiten Ordnung besteht aus zwei Kanälen: indirektes O–O-Hüpfen kann ohne oder mit Spin-Flip verbunden sein. Integriert man in der resultierenden *effektiven Wirkung* weiterhin die bindenden Sauerstoff-Freiheitsgrade aus und betrachtet die Kopplung an die Cu-Spins bis zur vierten Ordnung, reduziert sich die Spin-Spin-Wechselwirkung im dotierungsfreien Fall im statischen Limes auf den *antiferromagnetischen*

*Superaustausch* der Form (2.5). Neben der Äquivalenz zum Spin-Fermion-Modell in Gl. (2.7) wird dadurch ein *Doppelzählungsproblem* in dem oberen Ausdruck deutlich: Der Heisenberg-Term ist bereits in der Spin-Spin-Wechselwirkung enthalten, so dass er *nicht* zusätzlich explizit mitgenommen werden muß.

Die Dotierung von Löchern hat einen paramagnetischen Sauerstoff-Spin zur Folge, der für einen *starken ferromagnetischen Cu-Austausch* sorgt. Dieses Verhalten werden wir im Kapitel 3 für eine einfache Erweiterung des antiferromagnetischen Heisenberg-Hamiltonians auf den Fall von Lochdotierungen benutzen, in dem die dotierten Löcher am Sauerstoff durch eine *ferromagnetische* Kopplung der Cu-Spins simuliert werden.

## Kapitel 3

# Monte-Carlo-Simulation eines Heisenberg-Modells mit einzelnen ferromagnetischen Bindungen

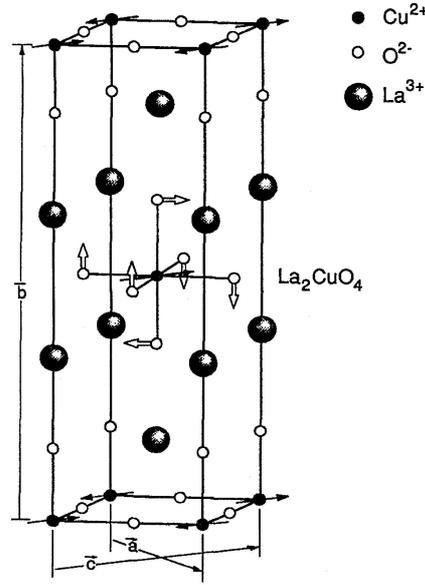
Wir gehen von dem Bild aus, dass in die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen dotierte Löcher vor allem Sauerstoff-Plätze besetzen und dort den antiferromagnetischen Superaustausch der Cu-Spins frustrieren. Die Wechselwirkung der dotierten Löcher mit den Cu-Spins führt zu einer *starken ferromagnetischen* Kopplung der Cu-Spins auf einzelnen Bindungen [25, 28]. Wir betrachten in diesem Kapitel ein um diesen Effekt erweitertes zweidimensionales *Heisenberg-Modell*. Dieses Vorgehen ist durch das Spin-Fermion-Modell (siehe Abschnitt 2.3) motiviert, das eine Reduzierung des Dreiband-Hubbard-Modells auf eine effektive Spin-Kopplung erlaubt. Vor kurzem haben Krüger und Scheidl [61] ebenfalls ein Heisenberg-Modell mit zufälligen ferromagnetischen Bindungen, allerdings ohne Berücksichtigung der Anisotropie (s.u.) untersucht.

Mit Hilfe einer *Monte-Carlo-Simulation* untersuchen wir, ob ein Vortex-Antivortex-Paar ein stabiler Grundzustand des mit zwei Löchern dotierten Modells ist. Weiterhin erweitern wir das Modell, um den Einfluß der *Dzyaloshinskii-Moriya- (DM-) Anisotropie* auf eine Vortex-Spinstruktur zu untersuchen. Diese Anisotropie induziert eine *leichte Ebene*, die den Ordnungsparameter effektiv auf zwei Komponenten einschränkt und Vortizes in dem System stabilisiert.

Nach einer kurzen Zusammenfassung über die mikroskopische Form der DM-Kopplung, bei der wir uns auf die *orthorhombische Phase* von  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  beschränken, stellen wir im zweiten Abschnitt unser Modell und die benutzte Monte-Carlo-Methode vor. Abschließend werden die Ergebnisse präsentiert und diskutiert.

### 3.1 Mikroskopischer Ursprung der Anisotropie

Experimente mit undotiertem  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  haben gezeigt, dass die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen neben der starken antiferromagnetischen Kopplung zusätzlich über ein *kleines ferromagnetisches Moment* verfügen [69]. Dzyaloshinskii [62] hat vor ca. 40 Jahren darauf hingewiesen, dass das Auftre-



**Abbildung 3.1:** Kristallstruktur von undotiertem  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Die Pfeile zeigen die kleine Kippung der  $\text{CuO}$ -Oktäeder an. Die Abb. ist aus Endoh *et al.* [71] entnommen.

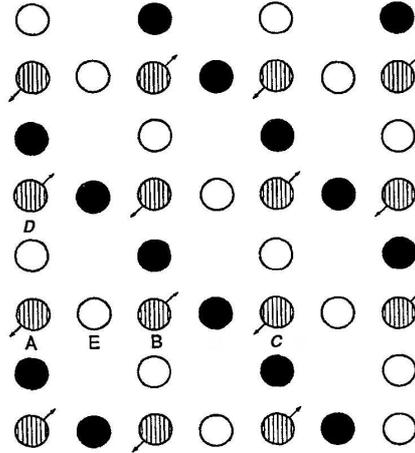
ten von schwachem Ferromagnetismus in einem antiferromagnetischen Material durch eine *antisymmetrische Spin-Spin-Wechselwirkung* der Form  $\mathbf{D} \cdot \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j$  beschrieben werden kann. Moriya hat in seiner Arbeit [63] diese Wechselwirkung mikroskopisch hergeleitet, indem er in Störungsrechnung zusätzlich zum isotropen Anderson-Superaustausch [66] eine weitere Ordnung aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung berücksichtigt. Diese Korrektur ist anisotrop und linear in der Spin-Bahn-Kopplungsstärke.

Für undotiertes  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  haben Coffey *et al.* [64, 65] unter Berücksichtigung von Kristalleffekten und der Spin-Bahn-Kopplung einen Spin-Hamiltonian der Form bestimmt:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} \left( J_{\text{sx}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) \right). \quad (3.1)$$

Der erste Term beschreibt den gewöhnlichen antiferromagnetischen Superaustausch mit  $J_{\text{sx}}$  zwischen Kupfer-Spins. Die DM-Anisotropie ist durch den zweiten Term gegeben. Eine konstante Kopplung  $\mathbf{D}$  kann den schwachen Ferromagnetismus nicht erklären [65]. Stattdessen ist der anisotrope Austausch *bindungsabhängig*.

Die Form der Anisotropie hängt sehr empfindlich von der Kristallstruktur ab. In undotiertem  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  findet ein Phasenübergang von einer *tetragonalen* zu einer *orthorhombischen* Phase bei einer Temperatur  $\sim 500\text{K}$  statt. Beim Übergang kippen die  $\text{CuO}$ -Oktäeder alternierend um ca.  $0.027\text{rad}$  in die  $\langle 110 \rangle$  Richtung, vgl. die Abb. 3.1. Dadurch wird eine kleine “Faltung” der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen verursacht [70]. Für die mikroskopische Form der  $\mathbf{D}_{ij}$  beschränken wir uns auf die orthorhombische Phase von  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , die den für die Supraleitung interessanten Teil des Phasendiagramms abdeckt. Die Kippung der Oktäeder als Projektion auf die  $\text{CuO}_2$ -Ebene ist in der Abb. 3.2 dargestellt. Die Stärke der DM-Wechselwirkung hängt



**Abbildung 3.2:** Die Projektion der Oktaeder auf die  $\text{CuO}_2$ -Ebene für die orthorhombische Phase von  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Die offenen Kreise symbolisieren Sauerstoff-Atome, die gegen die Cu-Ebene nach oben gekippt sind. Die schwarzen Kreise stellen entsprechend nach unten gekippte Sauerstoff-Atome dar. Die gestreift gezeichneten Kreise stellen Cu-Atome dar. Die Pfeile geben die Projektion der aniferromagnetischen Ordnung der Cu-Spins an. Die Abbildung ist entnommen aus [65].

linear von der Kippung der Oktaeder ab. Die Form der Kopplungskonstanten lassen sich auch aus der Kristallsymmetrie durch die Bedingung bestimmen, dass unter Kristallsymmetrie-Transformationen die Konfigurationsenergie der Spins invariant sein muß [65]. Das Ergebnis für die LTO-Phase von  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  lautet [67]:

$$\mathbf{D}_{AB} = \mathbf{D} = (0, D, 0), \quad (3.2)$$

$$\mathbf{D}_{AD} = \mathbf{D}' = (-D, 0, 0). \quad (3.3)$$

Die Bezeichnungen der Bindungen entnehme man den Abbildungen 3.2 und 3.3. Ebenfalls aus Symmetriegründen wechselt die Vektorkopplung auf den Bindungen alternierend das Vorzeichen [65]. Die Konstante  $D$  kann aus mikroskopischen Parametern und in Übereinstimmung mit Experimenten [68] bestimmt werden zu

$$\frac{|\mathbf{D}_{ij}|}{J_{\text{eff}}} = \text{const} \sim 3.5 \times 10^{-3}. \quad (3.4)$$

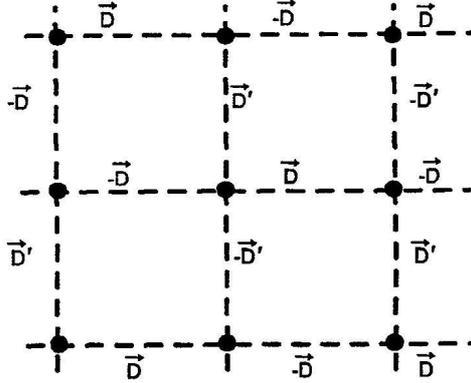
Diese Beziehung gilt für eine *effektive* Kopplung der Cu-Spins  $J_{\text{eff}}$ , d.h. sowohl für den Superaustausch  $J_{\text{sx}}$  als auch einen *ferromagnetischen* Austausch [73].

Um die Anisotropie in Gl. (3.1) zu verstehen, betrachte ich den folgenden Hamiltonian für zwei Bindungen (vgl. Abb. 3.2)

$$H_{ABD} = \mathbf{D}_{AB} \cdot \mathbf{S}_A \times \mathbf{S}_B + \mathbf{D}_{AD} \cdot \mathbf{S}_A \times \mathbf{S}_D. \quad (3.5)$$

Da  $\mathbf{S}_B$  und  $\mathbf{S}_D$  zum gleichen Untergitter des Antiferromagneten gehören, kann man den Ausdruck vereinfachen zu

$$H_{ABD} = (\mathbf{D}_{AB} + \mathbf{D}_{AD}) \cdot (\mathbf{S}_A \times \mathbf{S}_B). \quad (3.6)$$



**Abbildung 3.3:** Darstellung der Bindungsabhängigkeit der Vektorkopplungskonstanten  $\mathbf{D}_{ij}$  auf dem Quadratgitter in der  $\text{CuO}_2$ -Ebene für die orthorhombische Phase von  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Die Kopplungen wechseln für aufeinanderfolgende Bindungen in  $x$ - bzw.  $y$ -Richtung das Vorzeichen. Abbildung entnommen aus [64].

Um vom Superaustausch energetisch maximal zu profitieren, müssen die Vektoren antiparallel zueinander orientiert sein. Durch das Kreuzprodukt ist die Ebene senkrecht zu  $\mathbf{D}_{AB} + \mathbf{D}_{AD}$  ausgezeichnet, in der die Spins liegen müssen. Diese *leichte Ebene* nennt man auch *Dzyaloshinskii-Moriya-Ebene*. Die alternierenden  $\mathbf{D}$  bewirken, dass für den Ausdruck  $\mathbf{D}_{AB} + \mathbf{D}_{AD}$  ebenfalls das Vorzeichen alterniert.

In der Néel-Ordnung stehen  $\mathbf{S}_A$  und  $\mathbf{S}_B$  antiparallel zueinander, so dass das Kreuzprodukt der Spins 0 ergibt. Eine *kleine* Kippung der Untergitter zueinander um den Winkel  $\phi$  (bzw.  $-\phi$ ) *in der DM-Ebene* läßt sie von der DM-Anisotropie profitieren. Die starke antiferromagnetische Kopplung ist nämlich proportional zu  $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \simeq 1 - \alpha^2/2$ , so dass für *kleine* Winkel der *lineare* Zuwachs an DM-Energie die Abnahme an antiferromagnetischer Kopplung überwiegt. Die alternierende Form der  $\mathbf{D}_{ij}$  ist dafür verantwortlich, dass sich in einer  $\text{CuO}_2$  ein *kleines ferromagnetisches Moment* bildet.

Coffey *et al.* [64] geben den Zusammenhang von der Kopplungsstärke  $|\mathbf{D}| = D$  und dem Kippungswinkel  $\phi$  zwischen den Spins an:

$$\phi = \frac{1}{2} \tan^{-1} \left( \frac{D}{\sqrt{2}J_{sx}} \right). \quad (3.7)$$

Diese Beziehung werden wir in der Simulation für eine Néel-Ordnung und eine Vortex-Konfiguration überprüfen.

Die Richtung des Moments *in* der DM-Ebene ist nicht ausgezeichnet. In realen Systemen ist die Rotationsinvarianz aber aufgrund einer schwachen *Zwischenschicht-Kopplung* aufgehoben. Diese Kopplung ist antiferromagnetisch, so dass die kleinen ferromagnetischen Momente der Schichten antiparallel zueinander orientiert sind.

## 3.2 Modell und numerische Methode

Für ein einfaches Modell gehen wir von einem zweidimensionalen Quadratgitter von klassischen<sup>1</sup> Heisenberg-Spins aus. Die Spins können sich also in eine beliebige Raumrichtung orientieren und sind dabei antiferromagnetisch gekoppelt. Die Spins stellen die Cu-Spins in der CuO<sub>2</sub>-Ebene dar. Bei der Dotierung von Löchern werden vor allem Sauerstoff-Plätze besetzt, die den antiferromagnetischen Cu-Austausch frustrieren. Diesen Effekt simulieren wir durch *ferromagnetische* Kopplungen der Cu-Spins auf diesen Bindungen, auf denen die Löcher lokalisiert sind. Motiviert ist diese Annahme durch das von Timm und Bennemann [25] bzw. Aharony *et al.* [28] vorgeschlagene physikalische Bild, sowie durch das in dem Theorie-Kapitel 2 eingeführten Spin-Fermion-Modell.

### 3.2.1 Spin-Hamiltonian des Modells

Wir gehen von einem Spin-System aus, das durch den folgenden Hamiltonian definiert ist,

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{\text{sx}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) + \sum_i (J_{\text{fm}} - J_{\text{sx}}) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\hat{x}}. \quad (3.8)$$

Der erste Term ist von der Form eines Heisenberg-Hamiltonians und beschreibt den antiferromagnetischen Superaustausch ( $J_{\text{sx}} > 0$ ) zwischen benachbarten Spins  $\langle i, j \rangle$ . Der zweite Term berücksichtigt die im letzten Abschnitt diskutierte Dzyaloshinskii-Moriya-Anisotropie. Der dritte Term beschreibt *ferromagnetische* Bindungen ( $J_{\text{fm}} < 0$ ) in  $\mathbf{x}$ -Richtung zwischen  $\mathbf{r}_i$  und  $\mathbf{r}_{i+\hat{x}}$ , die durch die Dotierung von Löchern in das System eingebracht werden. Die Spins  $\mathbf{S}$  werden als klassische (Heisenberg-)Spins der Länge  $S = 1/2$  angenommen.

### 3.2.2 Monte-Carlo-Methode, Parameter und Randbedingungen

Um das Energie-Minimum einer Konfiguration zu bestimmen, benutzen wir den *Metropolis-Algorithmus*. Per Zufallsgenerator wird ein Gitterplatz gewählt, für den die Variation der Spin-Richtung ebenfalls durch Zufall bestimmt wird. Die Winkelfluktuationen sind gaußverteilt und werden durch die Breite  $\sigma$  der Verteilung festgelegt. Wir betrachten vor allem *kleine* Winkelfluktuationen. Eine neue Spinkonfiguration wird angenommen, falls sie energetisch günstiger als die vorherige ist. Ansonsten erfolgt die Annahme mit einer Boltzmann-verteilter Wahrscheinlichkeit

$$p = e^{-(E_{\text{neu}} - E_{\text{alt}})/k_{\text{B}}T}, \quad (3.9)$$

die durch die Temperatur  $T$  gesteuert wird. Man kann zeigen, dass dieses Verfahren gegen den Gleichgewichtszustand bei  $T$  konvergiert [74].

Die DM-Wechselwirkung ist eine Wechselwirkung im Spinraum und damit unabhängig vom Ortsraum. Wir betrachten im folgenden Spinkonfigurationen in der *leichten Ebene*, der sog. DM-Ebene.<sup>2</sup> Die DM-Vektoren werden für die Simulation und die einfache Auswertung

<sup>1</sup>Die Spins werden als Vektoren mit einer festen Länge behandelt, die bzgl. einer festen Achse eine kontinuierliche Einstellung annehmen dürfen. Man nimmt also den Grenzübergang  $S \rightarrow \infty$  bei konstanter Kopplung  $J\mathbf{S}^2$  vor.

<sup>2</sup>Das 2D-Heisenberg-Modell kann mit einer beliebigen leichten Ebene ausgestattet werden.

so gewählt, dass die DM-Ebene durch die  $xy$ -Ebene gegeben ist. Die Vektorkopplungen haben für diesen Fall die Form

$$\mathbf{D} = D \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right), \quad \mathbf{D}' = D \left( -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right). \quad (3.10)$$

Neben der Gittergröße  $N$ , der Temperatur  $T$  und der Winkelverteilung der Fluktuationen  $\sigma$ , dienen die Kopplungsstärken  $J_{\text{sx}}$ ,  $J_{\text{fm}}$  und  $D$  als Parameter. Zu beachten ist, dass der ferromagnetische Austausch  $J_{\text{fm}}$  das entgegengesetzte Vorzeichen von  $J_{\text{sx}}$  hat und der DM-Vektor auf diesem Bond in die entgegengesetzte Richtung weist. Das Verhältnis bleibt aber konstant [73]. Für eine Austauschkopplung von  $J_{\text{sx}} \sim 1400$  K ist  $D \sim 4.9$  K.

Die Randbedingungen sind bei topologischen Defekten wie z.B. Vortizes von Bedeutung. Ein einzelner Vortex hat eine höhere Energie als ein windungsfreier Zustand mit Windungszahl 0. In einem System mit freien Randbedingungen ist er folglich nicht stabil. Periodische Randbedingungen kommen aus topologischen Gründen ebenfalls nicht in Betracht. Es sind deshalb neben *freien Randbedingungen* die zwei Möglichkeiten vorgesehen:

- *fester Rand*  $\rightarrow$  die Randspins werden in ihrer Anfangskonfiguration festgehalten.
- *halbfreier Rand*  $\rightarrow$  die Spins können nur in der DM-Ebene variieren.

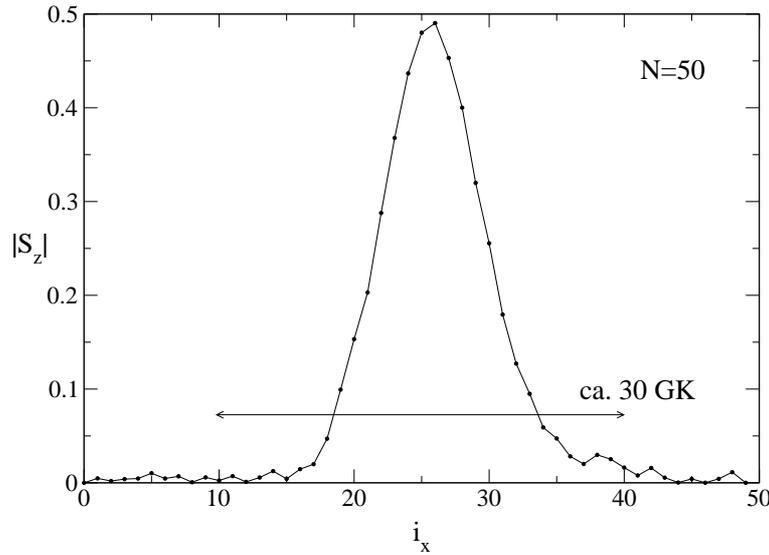
Die Simulation auf einem endlichen Gitter hat *finite-size-Effekte* zur Folge, die im Abschnitt 3.3.1 abgeschätzt werden.

Die Monte-Carlo-Methode folgt einem Pfad durch den Konfigurationsraum. Die *Abbruchbedingung* für den Relaxationsprozeß ist bei dieser Methode nicht befriedigend zu handhaben. Der Abbruch bei dem "richtigen", d.h. globalen Minimum in einer Landschaft mit vielen lokalen Minima ist schlecht zu kontrollieren, so dass wir die Relaxation nach einer festen Anzahl von Durchläufen abbrechen müssen. Eine Abhängigkeit von der Anzahl der Durchläufe muß für den Einzelfall kontrolliert werden. Eine Technik, um diesen Prozeß zu verbessern, ist die Steuerung der Akzeptanzrate. Bei dieser Art von "Simulated Annealing" reduzieren wir die Temperatur  $T$  während der Relaxation.

### 3.3 Ergebnisse

#### 3.3.1 Finite-size-Effekte

Um die Randeffekte aufgrund des endlichen Gitters zu untersuchen, wurde die Gitterlänge  $N$  des  $N \times N$ -Gitters im Bereich  $N = 30 \dots 150$  variiert. Es wurde zunächst ein Vortex als Startkonfiguration benutzt, dessen Spins um den Kern in der Simulation in die  $z$ -Richtung herausdrehen. Die Auftragung von  $|S_z|$  über dem Gitterplatz zeigt einen Abfall von  $S_z$  zum Rand hin. Als Beispiel ist die Kurve für ein  $50 \times 50$ -Gitter in Abb. 3.4 dargestellt. Die Auswertung ergab, dass  $S_z$  auf einer Längenskala von ungefähr 30 Gitterpunkte exponentiell vom Mittelpunkt in das statistische Rauschen abfällt. Ein Gitter von  $N \geq 50$  sollte daher ausreichen, um unabhängig von Randeffekten zu sein. Für numerische Ergebnisse haben wir Gittergrößen von  $N = 150$  benutzt, auf denen wir Vortexzentren bis zu einem Abstand von ca. 100 Gitterkonstanten untersuchen konnten.



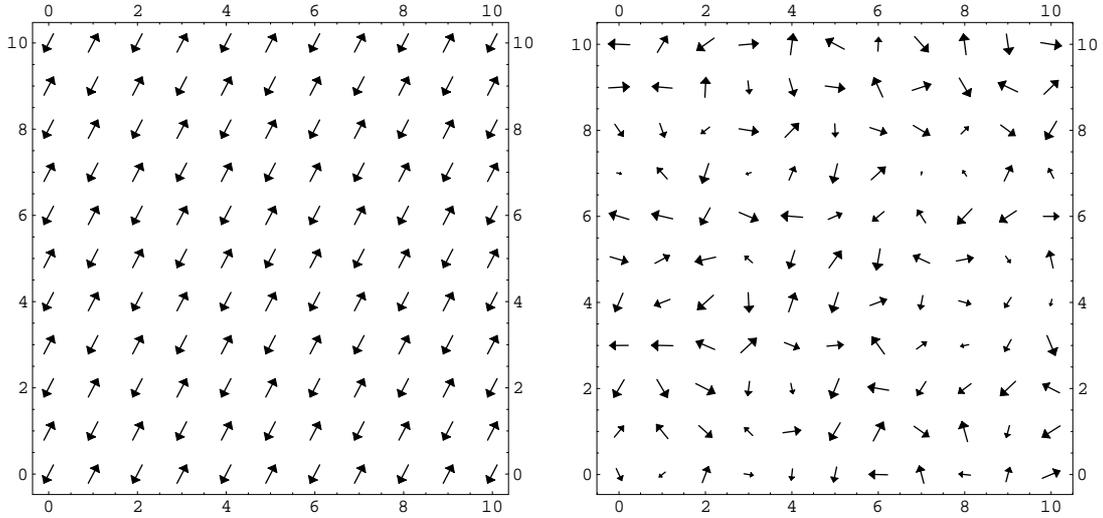
**Abbildung 3.4:** Für ein  $50 \times 50$ -Gitter ist der Betrag der  $z$ -Komponenten des Spins eines Vortex über der Gitterachse  $i_x$  dargestellt. Im Vortex-Zentrum  $i_x \simeq 25$  ist der Spin vollständig in  $z$ -Richtung ausgerichtet.  $S_z$  fällt *exponentiell* zum Rand hin ab. Die Untersuchung verschiedener Gittergrößen hat gezeigt, dass der Abfall auf  $\simeq 30$  Gitterkonstanten (GK) stattfindet.

### 3.3.2 Antiferromagnetismus und DM-Wechselwirkung

Ohne Lochdotierung zeigt das Modell wie erwartet den Grundzustand eines (klassischen) Antiferromagneten. Die Spins ordnen sich auf zwei Untergittern zur Néel-Ordnung. Bei einer Temperatur  $T \simeq J_{sx}$  beobachtet man den Phasenübergang. Beide Zustände sind zur Veranschaulichung in Abb. 3.5 dargestellt. Die DM-Anisotropie bricht die Rotationsinvarianz des Systems. Die Ausrichtung erfolgt *in der leichten Ebene*. Der Zusammenhang zwischen DM-Kopplungsstärke  $D$  und des relativen Kippungswinkels zwischen Anfangs- und Endkonfiguration nach Gl. (3.7) konnte in sehr guter Übereinstimmung bestätigt werden. Vergleiche dazu die Abb. 3.6.

### 3.3.3 Der Einfluß der DM-Anisotropie auf einen Vortex

Um den Einfluß der DM-Wechselwirkung auf eine Vortex-Konfiguration zu verstehen, haben wir bei halbfreien Randbedingungen den relativen Winkel zwischen der Startkonfiguration und der relaxierten Konfiguration in Abhängigkeit von der Kopplungsstärke untersucht. Dabei ging es “nur” um eine quantitative Bestätigung der Winkelabhängigkeit, da die Vortexkonfiguration nur durch die Wahl der geeigneten Randbedingungen stabilisiert werden kann. *Die Gleichung (3.7) konnte auch für einen Vortex bestätigt werden*, siehe Abb. 3.6. Die Untergitter sind also auch für eine Vortex-Konfiguration durch die DM-Anisotropie um den Winkel  $\phi$  zueinander in der DM-Ebene gekippt. Dabei habe ich vier relaxierte Konfigurationen mit unterschiedlicher Schrittzahl gemittelt, um den statistischen Fehler zu reduzieren. Die Werte



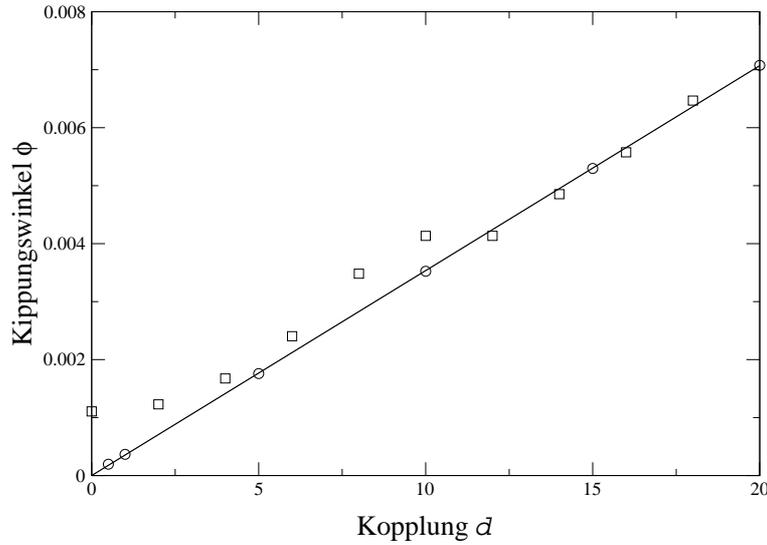
**Abbildung 3.5:** (links) Aus einer zufälligen Startkonfiguration ordnet sich das System in der Monte-Carlo-Simulation *antiferromagnetisch*. Die Spins liegen hauptsächlich in der leichten  $xy$ -Ebene, die hier dargestellt ist. Der Anteil der Anisotropie an der Konfigurationsenergie ist in diesem Fall von der Größenordnung  $10^{-6}$ . Durch den Einfluß der DM-Anisotropie verschwindet die  $z$ -Komponente für  $T \rightarrow 0$ . Um diesen Effekt beobachten zu können, wurde ein Verhältnis von  $T/J_{\text{sx}} = 10^{-7}$  gewählt. (rechts) Die Néel-Ordnung als Startkonfiguration geht bei  $T/J_{\text{sx}} = 1$  in einen *ungeordneten Zustand* über. Dargestellt ist die Projektion in die  $xy$ -Ebene.

streuten nicht stark, es gab aber drei “Ausreißer”, die durch die Mittelung in ihrem Gewicht reduziert wurden. Der Kippungswinkel wurde aus dem Betrag der Differenz zweier *relaxierter* Konfigurationen bestimmt, wobei eine Konfiguration ohne Anisotropie gerechnet wurde, da die vorgegebene Vortex-Startkonfiguration am Anfang der Relaxation noch durch sehr kleine Winkeländerungen korrigiert wird.

Dass die Winkel in einer Vortex-Struktur viel stärker als im Néel-Zustand fluktuieren, sieht man anhand des Falles  $D \rightarrow 0$ . Der Abb. 3.6 kann man entnehmen, dass die Winkeländerungen in der Néel-Ordnung gegen 0 tendieren, während zwei Vortex-Konfigurationen auch ohne Anisotropie um einen *sehr kleinen* Winkel gegeneinander verkippt sind. Da der Betrag des Winkels berechnet wurde, spiegeln sich in diesem Fall die *thermischen* und *statistischen Schwankungen* der Monte-Carlo-Methode bei wider.

### 3.3.4 Vortex-Antivortex-Paare

Wir betrachten nun Vortex-Antivortex-Paare, die als topologische Anregungen aus dem homogenen, windungsfreien Grundzustand entstehen können (vgl. den Anhang A). Die zwei Vortex-Zentren liegen auf den ferromagnetischen Bindungen. Zunächst analysieren wir die Anfangskonfiguration des Paares. In einem zweiten Schritt untersuchen wir durch Relaxation die Stabilität des Paares bzw. den Grundzustand des Modells aus Gl. (3.8). Das Vortex-Antivortex-Paar kann aus dem windungsfreien Zustand durch stetige Verformung erzeugt werden, so dass freie Randbedingungen möglich wären. Damit die Startkonfiguration aber in der



**Abbildung 3.6:** Der Kippungswinkel  $\phi$  über der Kopplungsstärke der DM-Anisotropie. Die Theoriegerade ist gegeben durch Gl. (3.7). Die *Kreise* stellen die Kippung bei einer Relaxation in eine antiferromagnetische Ordnung dar. Die *Quadrate* bezeichnen die Relaxation der Vortexkonfiguration. Sowohl der Antiferromagnet als auch die Vortex-Konfiguration bestätigen die Theorie durch sehr gute Übereinstimmung. Bei der Vortexkonfiguration ist über vier verschiedene Relaxations-Konfigurationen mit unterschiedlicher Schrittzahl gemittelt worden.

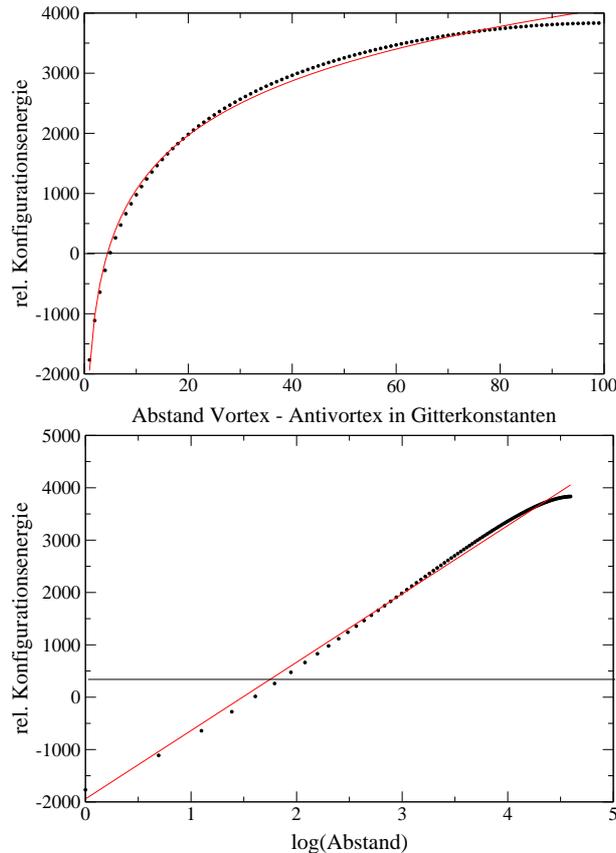
leichten Ebene bleibt, muß die Temperatur  $T$  in der gleichen Größenordnung wie die *sehr kleine* Anisotropie liegen. Deshalb haben sich halbstarre Randbedingungen als geeigneter für die Simulation herausgestellt. Die Anisotropie wird als kleiner Beitrag weiterhin mitgenommen. Im folgenden legen wir die Parameter relativ zu  $J_{sx}$  fest mit  $J_{fm}/J_{sx} = -4$  und  $D/J_{sx} = 3.5 \times 10^{-3}$  fest. Die Temperatur als Parameter wurde im Bereich  $T/J_{sx} \simeq 10^{-3} \dots 10^{-7}$  variiert. Weiterhin haben wir  $J_{sx}$  mit einem Faktor 1000 skaliert.

Die Konfigurationsenergie eines Vortex-Antivortex-Paares ist *logarithmisch* vom Abstand der Zentren abhängig, siehe Gl. (A.12) im Anhang. In Abb. 3.7 wird dies für das Gitter-Spin-Modell bestätigt. Für große Vortex-Abstände weicht das System allerdings leicht ab, was durch *finite-size-Effekte* verursacht ist. Abweichungen durch die Diskretheit des Gitters insbesondere für kleine Abstände sind aber sehr gering. Als “offset” wurde die Konfigurationsenergie des Antiferromagneten abgezogen. Der Vorzeichenwechsel in der Abb. 3.7 ist abhängig von der Stärke der ferromagnetischen Kopplung  $J_{fm}$ , da dieser Parameter die Energie der antiferromagnetischen Ordnung zu höheren Energien verschiebt, während die Vortex-Konfiguration Bindungsenergie gewinnt.

Der Vorfaktor in Gl. (A.12) ist exakt bei großen Abständen für ein unendlich großes Gitter bzw. ein Kontinuum. Mit einem Superaustausch von  $J_{sx} = 1000\text{K}$  ergibt sich [101]

$$2C = 2\pi JS^2 = \frac{\pi J_{sx}}{2} \simeq 1570 \text{ K} \quad \text{für } S = \frac{1}{2}. \quad (3.11)$$

Die Auswertung der Kurve in Abb. 3.7 ergibt eine Steigung von 1305.3 K, die in der Größenordnung des exakten Resultats in Gl. (3.11) liegt. Die Abweichung von dem analytischen

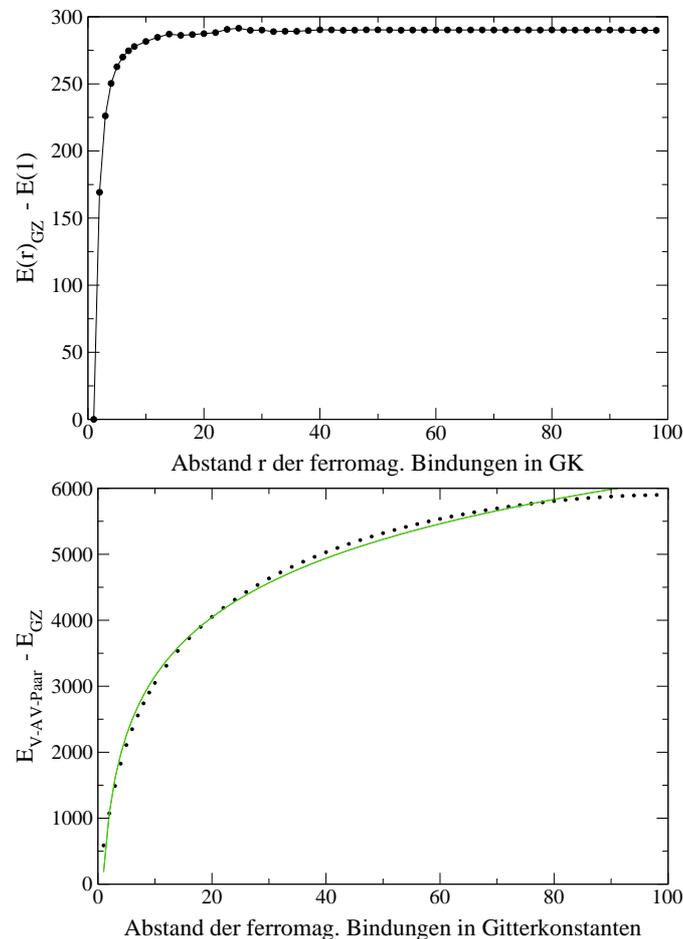


**Abbildung 3.7:** Die Konfigurationsenergie eines Vortex-Antivortex-Paares über dem Abstand der Vortex-Kerne bzw. über dem log des Kern-Abstandes. Die Kurve wurde mit einem Logarithmus “gefittet”. Die Energieskala ist relativ zur Konfigurationsenergie der antiferromagnetischen Ordnung mit ferromagnetischen Bonds gewählt. Es wurde ein  $150 \times 150$ -Gitter benutzt.

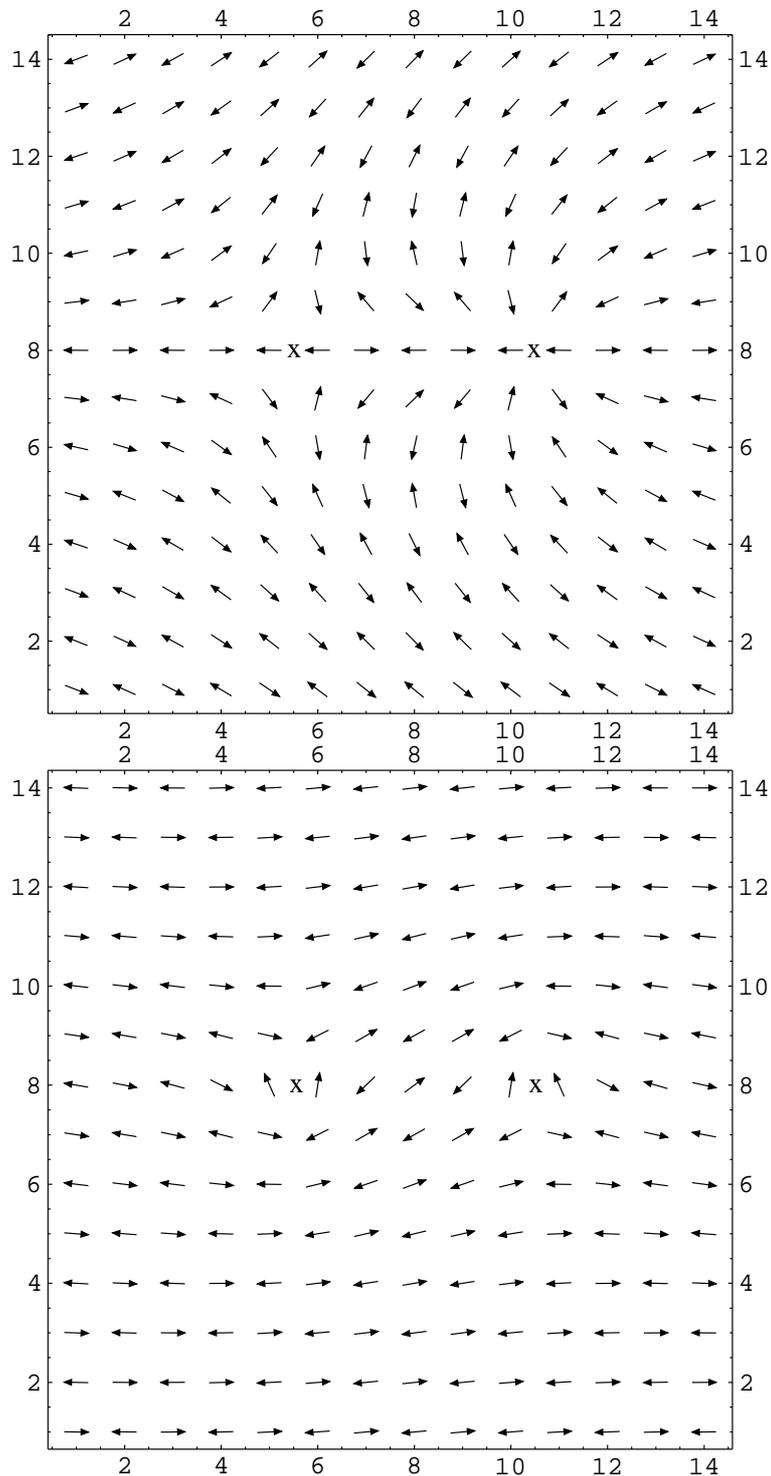
Ergebnis ist auf die Endlichkeit des Gitters zurückzuführen, da eine Vortex-Konfiguration eine langreichweitige Ausrichtung induziert.

Durch Relaxation soll die Stabilität des Vortex-Antivortex-Paares untersucht werden. Die Monte-Carlo-Simulation ergibt, dass das langreichweitig geordnete Paar in eine andere, energetisch günstigere Konfiguration übergeht. *Das Vortex-Antivortex-Paar ist also kein stabiler Grundzustand des betrachteten Spin-Modells.* Die Energiedifferenz zwischen Vortex-Konfiguration und relaxiertem Grundzustand ist in Abb. 3.8 dargestellt. Man entnimmt der Abbildung, dass die Grundzustandsenergie bereits ab einem Abstand der ferromagnetischen Bindungen von ca. 10 Gitterkonstanten nicht mehr vom Abstand abhängt. Das Paar als auch die relaxierte Lösung hängen gleichermaßen von der Stärke der ferromagnetischen Kopplung  $J_{\text{fm}}$  ab. Beide gewinnen durch eine ferromagnetische Parallelstellung der Spins Energie, so dass das *Resultat unabhängig von der Stärke der ferromagnetischen Kopplung* ist. Bei der relaxierten Konfiguration sind die Auswirkungen der ferromagnetischen Bonds auf die Umgebung stärker lokalisiert als beim Paar. In Abb. 3.9 ist beispielhaft das Paar als Startkonfiguration sowie der relaxierte Grundzustand auf einem  $14 \times 14$ -Gitter mit einem Abstand der ferroma-

netischen Bindungen von fünf Gitterkonstanten zu sehen. Im Grundzustand stellen sich die ferromagnetisch gekoppelten Spins in der leichten Ebene senkrecht zur antiferromagnetischen Ordnung.



**Abbildung 3.8:** (oben) Grundzustandsenergie mit den Standardparametern der relaxierten Konfiguration über dem Abstand der zwei ferromagnetischen Bindungen. Die Skala wurde relativ zur Energie für den minimalen Abstand von einer Gitterkonstanten gewählt,  $E_{\text{GZ}}(r = 1)$ . Man sieht, dass die Energie ab ca. 10 Gitterkonstanten *unabhängig vom Abstand der Bindungen* ist. (unten) Energie von Vortex-Antivortex-Konfiguration relativ zum Grundzustand. Die positive Energie für *alle* Abstände bedeutet, dass das Vortex-Antivortex-Paar *kein stabiler Zustand des betrachteten Modells* ist. Die Energiedifferenz ist *unabhängig von der Stärke der ferromagnetischen Kopplung*, da beide Konfigurationen gleichermaßen von  $J_{\text{fm}}$  profitieren. Die Steigung von 1289K spiegelt die bekannte Steigung der Vortex-Wechselwirkung aus Abb. 3.7 wider, da der Grundzustand gegen eine Konstante tendiert. Beide Konfigurationen sind für ein kleineres Gitter in Abb. 3.9 beispielhaft gegenübergestellt.



**Abbildung 3.9:** (oben) Ein Vortex-Antivortex-Paar als *Startkonfiguration* auf dem  $14 \times 14$ -Gitter. Die Vortex-Zentren (X) liegen auf den ferromagnetischen Bindungen, die zwei dotierte Löcher im System simulieren. Die Löcher haben eine Abstand von fünf Gitterkonstanten. (unten) *Relaxation* der Konfiguration. Es ist wiederum die  $xy$ -Projektion dargestellt. Man sieht, dass die Paar-Spinstruktur *kein* stabiler Zustand des Modells ist. Die Lösung ist vielmehr durch eine *stärkere Lokalisierung des Einflusses der ferromagnetischen Bindungen* im ansonsten antiferromagnetischen Hintergrund charakterisiert. Alle Spins bleiben aber in der leichten Ebene.

### 3.4 Zusammenfassung

Aufbauend auf das Heisenberg-Modell mit antiferromagnetischer Kopplung haben wir ein Modell untersucht, das die Simulation von kleinen Lochdotierungen durch einzelne ferromagnetische Bindungen erlaubt. In einer Monte-Carlo-Simulation stellte sich heraus, dass für zwei dotierte Löcher ein Vortex-Antivortex-Paar *kein stabiler Grundzustand* dieses Modells ist. Die erwartete logarithmische Wechselwirkung der Vortizes konnte aber trotzdem bestätigt werden. Weiterhin erlaubt das Modell die Berücksichtigung der Dzyaloshinskii-Moriya-Anisotropie, die eine leichte Ebene im Modell induziert. Die bekannte Abhängigkeit einer kleinen Neigung der Spins zueinander von der Kopplungsstärke konnte sowohl für einen Antiferromagneten als auch für einen Vortex quantitativ bestätigt werden. Dazu mußte der Vortex aber durch geeignete Randbedingungen in der Startebene gehalten werden, da eine leichte Ebene einen topologischen Defekt nur in einem *unendlich großen* System stabilisiert.

Das betrachtete Modell enthält lediglich die Wechselwirkung der Spins *ohne Berücksichtigung der kinetischen Energie der Löcher*. Ein weiterer Fehlereinfluß betrifft die Spins, die hier als *klassische Spins* mit kontinuierlicher Einstellmöglichkeit genähert wurden. Wie diese Schwächen des Modells die Aussagekraft der Ergebnisse einschränken, ist schwer zu sagen. Da aber keinerlei Anzeichen für die Stabilität des Vortex-Paares gefunden wurde, werden wir für eine genauere Analyse auch die Einflüsse der *kinetischen Energie* und der *Quantenmechanik* berücksichtigen müssen. Wir werden daher in den nächsten zwei Kapiteln das *Hubbard-Modell* in der einfachsten, d.h. in der *Hartree-Fock-Näherung* betrachten.

## 34 MC-Simulation eines Heisenberg-Modells mit ferromagnetischen Bindungen

## Kapitel 4

# Die Hartree-Fock-Näherung für das Einband-Hubbard-Modell

Im vorherigen Kapitel hat sich das untersuchte Spin-Modell als unzureichend für unsere Frage nach der Stabilität eines Vortex-Antivortex-Paares herausgestellt. Wir wenden uns in diesem Kapitel dem Hubbard-Modell im einfachen Fall *eines* Bandes zu, das im Theorie-Kapitel in Gl. (2.6) definiert und erläutert wurde. Der Hamiltonian des Hubbard-Modells lautet:

$$\mathcal{H}_{1B} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (4.1)$$

Das Modell berücksichtigt sowohl die *kinetische Energie* der Elektronen als auch die *quantenmechanische Natur des Spins*. Damit geht das Hubbard-Modell über das einfache Spin-Modell hinaus.

Das Hubbard-Modell in zwei Dimensionen ist aber durch den quadratischen Wechselwirkungsterm  $U$  nicht mehr exakt lösbar. Zur näherungsweise Lösung des Vielteilchenproblems bzw. der Suche nach dem Grundzustand bei  $T = 0$  benutzen wir die *statische, inhomogene Hartree-Fock- (HF)-Näherung*. Bei diesem Variationsverfahren erhalten wir durch den HF-Grundzustand eine obere Schranke für die wahre Grundzustandsenergie. Der Hamiltonian in Gl. (2.6) bzw. in Gl. (4.1) wird dabei auf ein effektives Einteilchen-Problem reduziert, indem ein Elektron sich in einem *mittleren, selbstkonsistenten Potential aller anderen Teilchen* bewegt.

Dass der Grundzustand des zweidimensionalen Hubbard-Modells bei halber Füllung ein antiferromagnetischer Isolator ist, wird allgemein angenommen und ist durch verschiedene Ansätze bestätigt worden [77, 78]. Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf den Fall *kleiner Lochdotierungen* gegenüber dem halbgefüllten System. Für ein dotiertes Loch existieren als selbstkonsistente HF-Lösungen sowohl *Polaron-* als auch *Vortexkonfigurationen*, die in diesem Kapitel untersucht und miteinander verglichen werden. Weiter gehen wir der Frage nach der Stabilität eines *Vortex-Antivortex-Paares* in der HF-Näherung nach. Abschließend fassen wir die Resultate zusammen und diskutieren die Frage, ob eine Molekularfeld-Näherung für stark korrelierte Elektronensysteme (wir betrachten den Parameterbereich mit  $U \gtrsim t$ ) in zwei Dimensionen aufgrund der starken Fluktuationen für das untersuchte System ausreichend ist.

Das Einband-Hubbard-Modell wurde für kleine Dotierungen unter ähnlichen Fragestellungen von Vergés *et al.* [75, 76] und von Berciu und John [79, 80] untersucht.

## 4.1 Hartree-Fock-Näherung

Für die Hartree-Fock-Näherung faktorisieren wir den Wechselwirkungsterm  $U$  nach dem folgenden Schema mit den Operatoren  $A$  und  $B$ ,

$$AB = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) + A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (4.2)$$

$$\simeq A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle, \quad (4.3)$$

wobei die Näherung in der zweiten Zeile in der *Vernachlässigung der Fluktuationen* besteht. Damit ergibt sich unter Beachtung von Vertauschungen und dem Verschwinden der anomalen Terme<sup>1</sup> für die Coulomb-Wechselwirkung der Ausdruck.<sup>2</sup>

$$U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \simeq U \sum_i \left[ \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \right. \quad (4.4)$$

$$\left. - c_{i\uparrow}^\dagger \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow} \right] - E_{\text{const}}. \quad (4.5)$$

Die Energiekonstante beträgt

$$E_{\text{const}} = U \sum_i \left( \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle - |\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle|^2 \right). \quad (4.6)$$

Mit Hilfe der Pauli-Matrizen  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$  und der Einheitsmatrix  $\sigma^0$  definieren wir den Ladungsdichte- und den Spindichte-Operator,

$$n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} = c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^0 c_{i\beta} \quad (4.7)$$

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} c_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta}. \quad (4.8)$$

Damit können wir den linearisierten Wechselwirkungsterm auch schreiben als

$$U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \simeq \frac{U}{2} \sum_i \langle n_i \rangle n_i - 2U \sum_i \langle \mathbf{S}_i \rangle \cdot \mathbf{S}_i - E_{\text{const}}. \quad (4.9)$$

Weiter läßt sich die effektive Wechselwirkung kompakt in Matrix-Notation darstellen,

$$U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \simeq U \sum_i \begin{pmatrix} c_{i\uparrow}^\dagger & c_{i\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle n_{i\downarrow} \rangle & -\langle S_i^- \rangle \\ -\langle S_i^+ \rangle & \langle n_{i\uparrow} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix} - E_{\text{const}}. \quad (4.10)$$

<sup>1</sup>Die anomalen Terme der Form  $\sim c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger$  bzw.  $\sim c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}$  haben in der *supraleitenden Phase* nichtverschwindende Erwartungswerte. Durch die Beschränkung auf *kleine* Dotierungen untersuchen wir ausschließlich den isolierenden Zustand.

<sup>2</sup>Da wir auf der Ebene der Erzeuger/Vernichter entkoppelt haben, berücksichtigen wir auch die sog. Spinflip-Terme  $\langle c_{\uparrow}^\dagger c_{\downarrow} \rangle$ , die in der Standardform der Hartree-Fock-Näherung bei einer Entkopplung auf der Ebene von Einteilchen-Operatoren  $n_{i\sigma}$  nicht auftreten.

Dabei haben wir auf der Nebendiagonale die Spinflip-Operatoren eingefuhrt,

$$S^+ = S^x + iS^y = c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\uparrow} \quad (4.11)$$

$$S^- = S^x - iS^y = c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}. \quad (4.12)$$

Die Selbstkonsistenz-Felder  $\langle n_i \rangle$  und  $\langle \mathbf{S}_i \rangle$  sind in der *inhomogenen* Hartree-Fock-Naherung lokal auf jedem Gitterplatz  $i$  definiert. In der hergeleiteten *generalisierten* Form der HF-Naherung werden neben den Ladungsfreiheitsgraden *alle* Spin-Komponenten berucktigt, so dass auch nicht kollineare und nicht koplanare Spinstrukturen als Losungen untersucht werden konnen.

Durch die Hartree-Fock-Faktorisierung haben wir einen *effektiven Einteilchen-Hamiltonian* erhalten. Die elektronische Vielteilchen-Wellenfunktion  $|\Psi\rangle_{\text{HF}}$ , der *HF-Grundzustand*, wird als antisymmetrischer Produktzustand von  $N_e$  Einteilchen-Zustanden konstruiert (*Slater-Determinante*). Ausgedruckt in den Einteilchen-Erzeugungsoperatoren  $a_n^{\dagger}$  des Hartree-Fock-Hamiltonians, die den fermionischen Vertauschungsrelationen genugen, lautet der Grundzustand

$$|\Psi\rangle_{\text{HF}} = \prod_{n=1}^{N_e} a_n^{\dagger} |0\rangle. \quad (4.13)$$

Die Einteilchen-Orbitale folgen aus der Bedingung, dass sie die Gesamtenergie (fur  $T = 0$ ) im Unterraum der antisymmetrischen Produktzustande minimieren, d.h. aus dem Variationsansatz

$$\delta \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle_{\text{HF}}}{\langle \Psi | \Psi \rangle_{\text{HF}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (4.14)$$

Wir entwickeln den Einteilchen-Erzeuger nach Ortszustanden auf dem Gitter mit  $i = (i_x, i_y)$ ,

$$a_n^{\dagger} = \sum_{i\sigma} \phi_n(i, \sigma) c_{i\sigma}^{\dagger}, \quad (4.15)$$

wobei als Entwicklungskoeffizienten die *Einteilchen-Wellenfunktionen*  $\phi_n(i, \sigma)$  auftreten, die ein vollstandiges Orthonormalsystem bilden.

Wir variieren die Gesamtenergie  $E_{\text{tot}}^{\text{HF}} = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle_{\text{HF}}$  bzgl. der  $\phi_n^*(i, \sigma)$  unter der Nebenbedingung der Normierung der  $\phi_n$ , die durch Lagrange-Parameter  $E_p$  berucksichtigt wird:

$$\frac{\delta}{\delta \phi_n^*(i, \alpha)} \left[ \langle \Psi | \mathcal{H}_{\text{HF}} | \Psi \rangle_{\text{HF}} - \sum_{p=1}^{N_e} E_p \sum_{i\sigma} \phi_p^*(i, \sigma) \phi_p(i, \sigma) \right] = 0. \quad (4.16)$$

Es zeigt sich, dass die Lagrange-Parameter gerade die Einteilchen-Energien  $E_n$  ergeben. Damit erhalten wir die *Hartree-Fock-Eigenwertgleichungen* fur den  $n$ -ten Einteilchen-Zustand,

$$-t \sum_{j \in \mathcal{V}_i} \phi_n(j, \alpha) + \left[ \frac{U}{2} \langle n_i \rangle \delta_{\alpha\beta} - U \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} \langle \mathbf{S}_i \rangle \right] \phi_n(i, \beta) = E_n \phi_n(i, \alpha), \quad (4.17)$$

mit den Hartree-Fock-Feldern der selbstkonsistent zu bestimmenden Ladungs- und Spindichte,

wobei über doppelt auftretende Indizes summiert wird:

$$\langle n_i \rangle = \langle \Psi | c_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^0 c_{i\beta} | \Psi \rangle_{\text{HF}} = \sum_{n=1}^{N_e} \sum_{\sigma} |\phi_n(i, \sigma)|^2 \quad (4.18)$$

$$\langle \mathbf{S}_i \rangle = \frac{1}{2} \langle \Psi | c_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta} | \Psi \rangle_{\text{HF}} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_e} \phi_n^*(i, \alpha) \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \phi_n(i, \beta). \quad (4.19)$$

Das Variationsverfahren hat zu einem gekoppelten System für die optimalen Einteilchen-Wellenfunktionen geführt. Da  $\boldsymbol{\sigma}$  hermitesch ist, sind die Eigenwerte  $E_n$  reell und die Eigenfunktionen  $\phi_n$  orthogonal.

Der Hartree-Fock-Grundzustand  $|\Psi\rangle_{\text{HF}}$  ist im Fall  $T = 0$  durch die Besetzung der untersten  $N_e$  Eigenzustände definiert. Die Grundzustandsenergie ist gegeben durch:

$$E_{\text{tot}}^{\text{HF}} = \langle \Psi | \mathcal{H}_{\text{HF}} | \Psi \rangle_{\text{HF}} = \sum_{p=1}^{N_e} E_p - E_{\text{const}}. \quad (4.20)$$

Die Wellenfunktion  $|\Psi\rangle_{\text{HF}}$  sollte auch Eigenfunktion zu den Symmetrie-Operatoren sein, die mit dem Hubbard-Hamiltonian (2.6) vertauschen. Wir stellen aber *keine* Symmetrie-Bedingungen an die Wellenfunktion, weshalb man von *unbeschränkter* Hartree-Fock-Näherung spricht.

## 4.2 Numerische Lösungsmethode

Wir wollen den Grundzustand des Hubbard-Modells in der Hartree-Fock-Näherung für  $T = 0$  berechnen. Da wir an *inhomogenen Lösungen* des lochdotierten Systems interessiert sind, bleibt nur die numerische Lösung des Eigenwert-Problems in Gl. (4.17). Wir benutzen für die Diagonalisierung eine NAG-Standardroutine.

Als Basis nehmen wir die Einteilchen-Ortszustände  $c_{i\sigma}^\dagger |0\rangle = |i\sigma\rangle$  auf einem endlichen  $N \times N$ -Gitter. Wir benutzen ausschließlich *offene Randbedingungen*, um als Lösungen von lochdotierten Systemen auch Vortizes zuzulassen und um sie mit den Polaron-Lösungen vergleichen zu können. Die Verteilungen der Spin- und der Ladungsdichte sind selbstkonsistent zu bestimmen. Dafür gehen wir nach dem folgenden Schema vor:

1. Starte mit einer sinnvollen Näherung für die Felder der Spin- und Ladungsdichte.
2. Berechne die Matrix des Hamilton-Operators  $\mathcal{H}_{\text{HF}}$ .
3. Löse das Eigenwert-Problem für die  $N_e$  untersten Eigenzustände.
4. Berechne mit den erhaltenen Eigenfunktionen die Hartree-Fock-Felder  $\langle n_i \rangle$  und  $\langle \mathbf{S}_i \rangle$ .
5. Iteriere bis zur Selbstkonsistenz. Als Kriterium diene die Bedingung, dass die größte Änderung der Spin- und Ladungskomponenten aller Plätze kleiner als eine vorgegebene Schranke  $\epsilon \sim 10^{-6} \dots 10^{-9}$  ist.

Für eine verbesserte Konvergenz benutzen wir die Linearkombination von Lösungen zweier Iterationsschritte  $\alpha N_i + (1 - \alpha)N_{i-1}$  mit dem Parameter  $\alpha \sim 0.5 \dots 1$ . Die Matrixelemente  $H_{ij,\alpha\beta} = \langle i\alpha | \mathcal{H}_{\text{HF}} | j\beta \rangle$  lauten für den lokalen Coulombterm,

$$H_{ii,\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle & \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle \\ \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle & \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle \end{pmatrix}_{\alpha\beta} = U \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \langle n_i \rangle - \langle S_i^z \rangle & -(\langle S_i^x \rangle - i \langle S_i^y \rangle) \\ -(\langle S_i^x \rangle + i \langle S_i^y \rangle) & \frac{1}{2} \langle n_i \rangle + \langle S_i^z \rangle \end{pmatrix}_{\alpha\beta}$$

und für das Hüpfen zwischen nächsten Nachbarn  $\langle ij \rangle$  mit der Einheitsmatrix  $\sigma^0$ ,

$$H_{ij,\alpha\beta} = -t \sigma_{\alpha\beta}^0. \quad (4.21)$$

Dabei haben wir von der Beziehung  $n_{i\uparrow(\downarrow)} = 1/2 n_i \pm S_i^z$  Gebrauch gemacht, um die Matrixelemente durch die HF-Felder auszudrücken.

Wir definieren zusätzlich die folgenden gemittelten Größen aus den HF-Feldern. Die *mittlere Ladungsdichte* pro Gitterplatz ist definiert als:

$$\langle n \rangle_{\text{HF}} = \frac{1}{N^2} \sum_i \langle n_i \rangle. \quad (4.22)$$

Als *lokales magnetisches Moment* pro Gitterplatz bezeichnen wir den mittleren Betrag der Spindichte, der mit einem Faktor 2 auf einen maximalen Wert von 1 skaliert wird:

$$\langle \mathbf{m} \rangle_{\text{HF}} = \frac{2}{N^2} \sum_i |\langle \mathbf{S}_i \rangle|. \quad (4.23)$$

Den Ordnungsparameter des Antiferromagneten, die *staggered magnetization*, definieren wir als die folgende, ebenfalls auf 1 skalierte Größe:

$$\langle \mathbf{M} \rangle_{\text{HF}} = \frac{2}{N^2} \sum_i (-1)^{i_x+i_y} \langle \mathbf{S}_i \rangle. \quad (4.24)$$

Die *mittlere Energie* pro Elektron ist gegeben durch:

$$e_g = \langle e \rangle_{\text{HF}} = \frac{1}{N_e} \left( \sum_i^{N_e} \epsilon_i - E_{\text{const}} \right). \quad (4.25)$$

Das untere Hubbard-Band (ohne Dispersion) liegt in den Rechnungen und in den Abbildungen für mehr Übersichtlichkeit bei der Platz-Energie  $\epsilon = 0$ . Der physikalische Energie-Nullpunkt ist durch das *Fermi-Niveau* gegeben, das in der Mitte des Mott-Hubbard-Gaps liegt. Für den Energievergleich dotierter Zustände führen wir eine *Anregungsenergie* (besser: "Ionisierungsenergie") ein, wobei wir leicht von der Definition in [79] abweichen. Die Anregungsenergie ist definiert als die Energie, die nötig ist, um ein Elektron aus dem halbgefüllten System zu entfernen bzw. um ein Loch in das System zu dotieren. Ein Beitrag besteht darin, das zu entfernende Elektron auf das Fermi-Niveau zu bringen, das durch die halbe Mott-Hubbard-Energielücke gegeben ist. Ein weiterer Beitrag berücksichtigt die Wechselwirkung der Teilchen im dotierten System. Er drückt sich in der Differenz der Konfigurationsenergien von dotiertem und undotiertem System aus.

### 4.3 Resultate

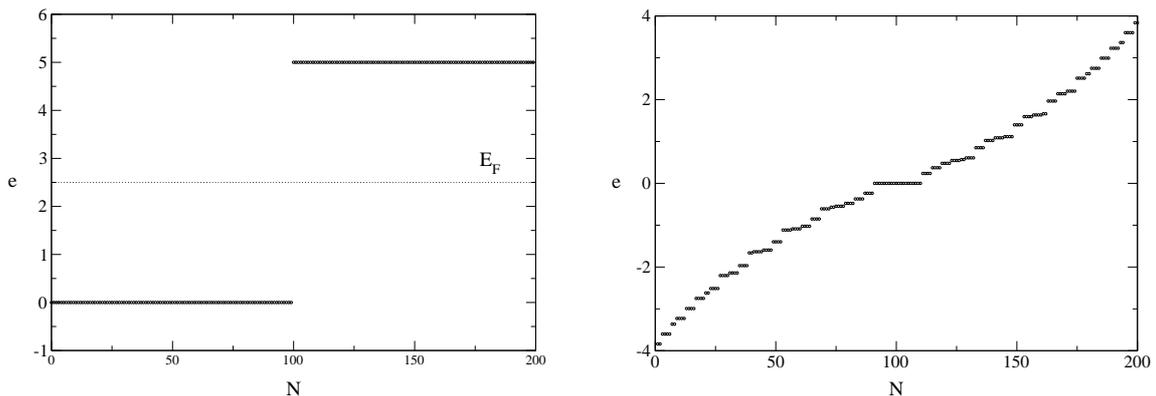
Zunächst stelle ich die homogene Lösung des Antiferromagneten bei halber Füllung vor, die für alle Werte von  $U/t$  die selbstkonsistente Lösung in der HF-Näherung ist. Für den Fall eines dotierten Loches diskutiere ich die zwei erhaltenen Lösungen des *Polarons* und des *Vortex*. Abschließend wird die Stabilität eines *Vortex-Antivortex-Paares* im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung untersucht.

Die *Parameter* des Hubbard-Modells sind die Wechselwirkung  $U$  und die Hüpfenergie  $t$  der Elektronen. Wir untersuchen das Modell vor allem im Bereich mittlerer Kopplung  $U/t \simeq 5 \dots 10$ . Alle Energien werden in Einheiten von  $t$  angegeben.

#### 4.3.1 Antiferromagnet bei halber Füllung

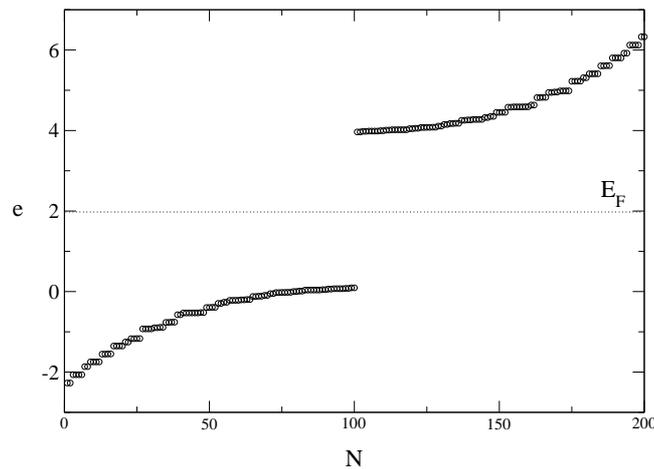
Für halbe Füllung des Einband-Hubbard-Modells, d.h. bei einem Elektron pro Gitterplatz, ist der *antiferromagnetische Néel-Zustand* eine selbstkonsistente Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen für alle Werte von  $U/t$ , vgl. [75]. Als Grenzfälle des Verhältnisses  $U/t$  kann man die Fälle für verschwindende Wechselwirkung  $U \rightarrow 0$  und für verschwindendes Hopping  $t = 0$  betrachten, siehe die Abb. 4.1. Der Grundzustand des Hubbard-Modells in HF-Näherung ist ein *Mott-Hubbard-Isolator* mit einer *Bandlücke* von der Größenordnung  $U$  zwischen Valenz- und Leitungsband. Eine Diskussion der Hartree-Fock-Näherung und der Vergleich mit dem Grundzustand aus anderen numerischen Zugängen ist in [77] zu finden.

In der generalisierten Form der HF-Näherung besitzt der Hamiltonian keine Vorzugsrichtung für eine antiferromagnetische Ausrichtung der Spins  $\langle \mathbf{S}_i \rangle$ . Durch die Vorgabe einer Néel-Startkonfiguration wird die kontinuierliche Symmetrie gebrochen. Eine selbstkonsistente Lösung wurde auch für eine Anfangskonfiguration getestet, die durch zufällige, kleine Abweichungen gestört wurde. Die HF-Näherung konvergierte ebenfalls, benötigte aber, abhängig von der Stärke der Fluktuationen, deutlich mehr Iterationsschritte.

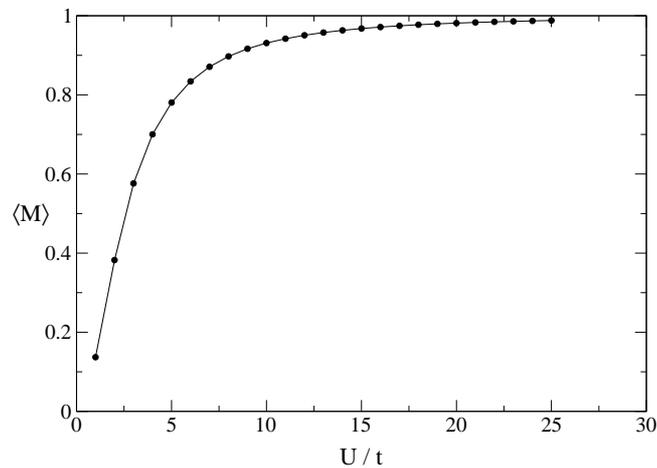


**Abbildung 4.1:** (links) Energiespektrum für ein  $10 \times 10$ -Gitter *ohne Hopping*. Die Eigenenergien  $\epsilon_\alpha$  sind als Funktion von  $\alpha = 1, 2, \dots, 2N^2$  gezeichnet. Es sind alle  $n^2 = 100$  Zustände des unteren Hubbard-Bandes besetzt. Die Hubbard-Bänder sind nicht dispersiv ( $t = 0$ ) und das Mott-Hubbard-Gap ist gegeben durch  $U = 5$ . Das untere Hubbard-Band liegt bei der Platzenergie  $\epsilon = 0$ . (rechts) Energiespektrum für ein  $10 \times 10$ -Gitter *ohne Wechselwirkung* ( $U \rightarrow 0$ ). Die Bandbreite ist  $\simeq 8t$  und das Mott-Hubbard-Gap verschwindet.

Für schwache und mittlere Kopplungen  $U/t$  kann das Elektronensystem durch den Hoppingterm  $t$  seine Energie absenken. In Abb. 4.2 ist für  $U/t = 5$  das Spektrum dargestellt, in dem das Valenzband unter die Platzenergie von  $\epsilon = 0$  absinkt. Die “staggered magnetization” zeigt in Abb. 4.3 das bekannte Verhalten der zunehmenden Ausrichtung auf zwei Untergittern mit wachsendem  $U$ , so dass für  $U \gg t$  das Hubbard-Modell auf das *Heisenberg-Modell* als effektives Spin-Modell abgebildet werden kann [72, 43].



**Abbildung 4.2:** Spektrum der Einteilchen-Energien für ein  $10 \times 10$ -Gitter bei halber Füllung mit  $U/t = 5$ . Der kinetische Beitrag des Hüpfens senkt die Energie ab. Das Mott-Hubbard-Gap ist gegeben durch  $|\langle m \rangle|U \simeq 0.79U$ .



**Abbildung 4.3:** Abhängigkeit der staggered magnetization  $|\langle M \rangle|$  des Hubbard-Modells bei halber Füllung als Funktion von  $U/t$  auf einem  $20 \times 20$ -Gitter. Mit zunehmender Wechselwirkung  $U$  nimmt die Ausrichtung des mittleren Spin-Moments entlang einer Vorzugsrichtung zu. Im Grenzfall großer  $U/t$  geht  $|\langle M \rangle|$  wie erwartet gegen 1 und das Hubbard-Modell kann auf das *Heisenberg-Modell* abgebildet werden (vgl. Kapitel 2).

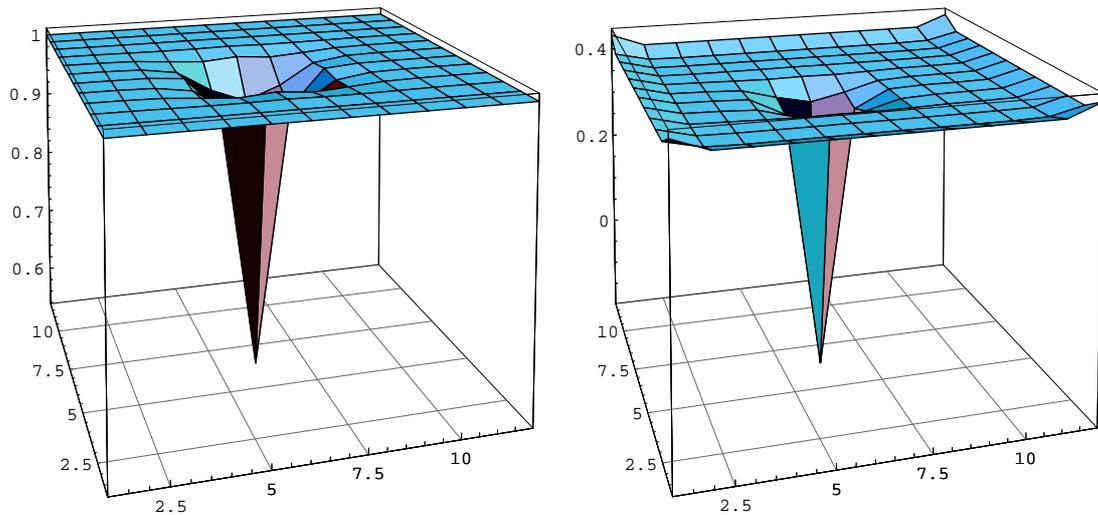
### 4.3.2 Polaron-Lösung

Das *Polaron* ist eine selbstkonsistente Lösung der Hartree-Fock-Näherung des Hubbard-Modells für den Fall, dass wir ein einzelnes Loch in das halbgefüllte System dotieren. Bei dem Polaron ist die dotierte Ladung hauptsächlich auf einem bestimmten Gitterplatz lokalisiert und die restliche Ladung verteilt sich um diesen Platz. Dies führt zu einem kleinen *ferromagnetischen Moment* auf diesem Platz, siehe Abb. 4.4 und Abb. 4.5. Die übrigen Gitterplätze sind nur sehr wenig durch die Polaron-Konfiguration beeinflusst. Für  $U \gtrsim 10$  verteilt sich die Ladung praktisch ausschließlich auf das Polaronzentrum und die vier nächsten Nachbarn. Das Polaron ist eine Lösung auch für  $U \rightarrow \infty$ . Im Bereich mittlerer Kopplung  $U \gtrsim 3$  verteilt sich die Defektladung im geringen Maß auch auf weitere umliegende Plätze. Der Ordnungsparameter bleibt aber im Zentrum gegenüber der antiferromagnetischen Ordnung invertiert, vgl. Abb. 4.6. Im Parameterbereich schwacher Wechselwirkung  $U \lesssim 3$  ist die mittlere staggered magnetization lediglich stark reduziert. Die selbstkonsistente Ladungsdichte verteilt sich in Form einer "Zigarre" über die Diagonale des Systems, siehe Abb. 4.7. Der diagonale Streifen ist aber keine Domänenwand, wie sie für Kuprate angenommen wird. Die Energielücke verschwindet, so dass im Spektrum keine lokalisierten Zustände mehr auftreten. Diese Konfiguration wird von Su und Chen [82] diskutiert und von Schrieffer *et al.* im Rahmen der "spin-bag"-Kopplung theoretisch erwartet [83].

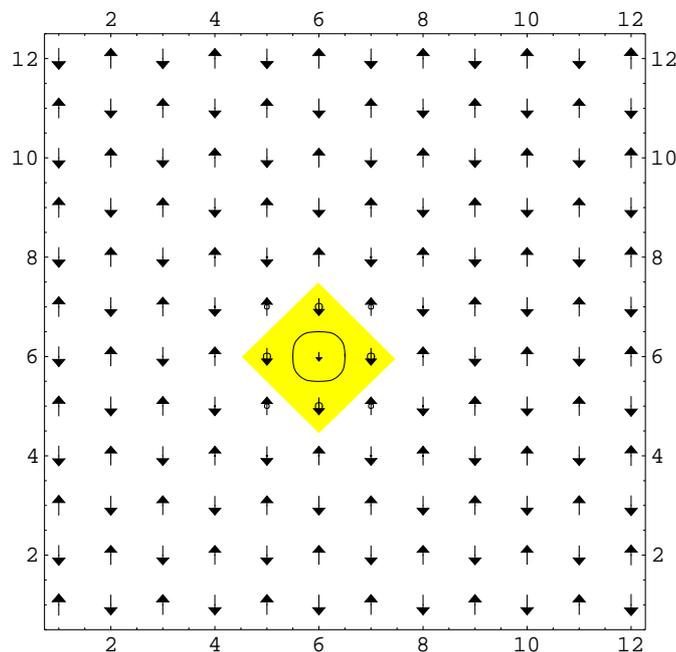
Für eine Genauigkeit von  $\epsilon = 10^{-8}$  wurden ca. 100 Iterationsschritte für die Selbstkonsistenz benötigt. Dabei relaxieren die Spin-Freiheitsgrade deutlich langsamer als die mittlere Ladungsdichte. Diese Tendenz verstärkt sich mit zunehmendem  $U$ , in Übereinstimmung mit der Spinwellen-Theorie, in der  $J \sim 1/U$  gilt [43]. Die Spins haben zwar die volle  $SU(2)$ -Symmetrie, orientieren sich aber kollinear entlang der durch die Startkonfiguration vorgegebenen Vorzugsrichtung.

In der Darstellung des Spektrums in Abb. 4.8 erkennt man, dass durch die Dotierung eines Loches zwei diskrete *unbesetzte* Zustände tief in das Mott-Hubbard-Gap induziert werden. Je ein Zustand stammt aus dem unteren und dem oberen Hubbard-Band. Es spaltet ebenfalls noch der unterste Zustand aus dem Valenzband ab. In Abb. 4.9 ist für den obersten besetzten und untersten unbesetzten Zustand die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\Psi_n|^2$  der Einteilchen-Wellenfunktion dargestellt. Man erkennt den lokalisierten Charakter des Zustandes im Gap auf dem Polaron-Platz. Die besetzten Zustände innerhalb des unteren Bandes sind deutlich ausgedehnter. Die Anregungsenergien werden im nächsten Abschnitt zusammen mit der Vortex-Lösung diskutiert.

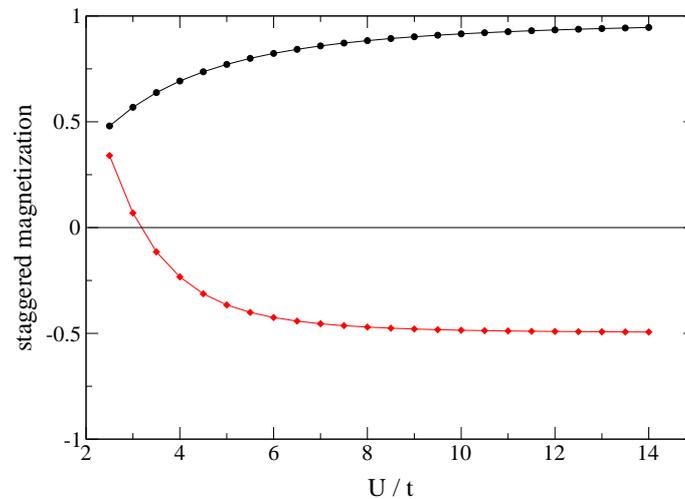
Um zu verstehen, warum ein Loch eine ferromagnetische Spin-Umgebung bevorzugt, stellen wir uns vor, wir nähmen ein Elektron z.B. mit einem Spin- $\downarrow$  aus dem antiferromagnetisch geordnetem Gitter heraus. Ist das Loch immobil, kostet das Energie von der Ordnung  $4J \sim t^2/U$  im Grenzfall  $U/t \gg 1$ . Das System kann aber Energie durch *virtuelle Hüpfprozesse* von Elektronen der benachbarten Plätze auf den Lochplatz gewinnen. Das hat eine erhöhte Besetzungswahrscheinlichkeit von Spin- $\uparrow$  Teilchen auf diesen Platz und damit zu einem invertierten Ordnungsparameter  $\langle \mathbf{M} \rangle$  zur Folge. Diese Tendenz führt auf das *Theorem von Nagaoka* [44], wonach im Grenzfall  $U \rightarrow \infty$  der Grundzustand eines beliebig großen aber endlichen Gitters mit einem Loch ferromagnetisch ist.



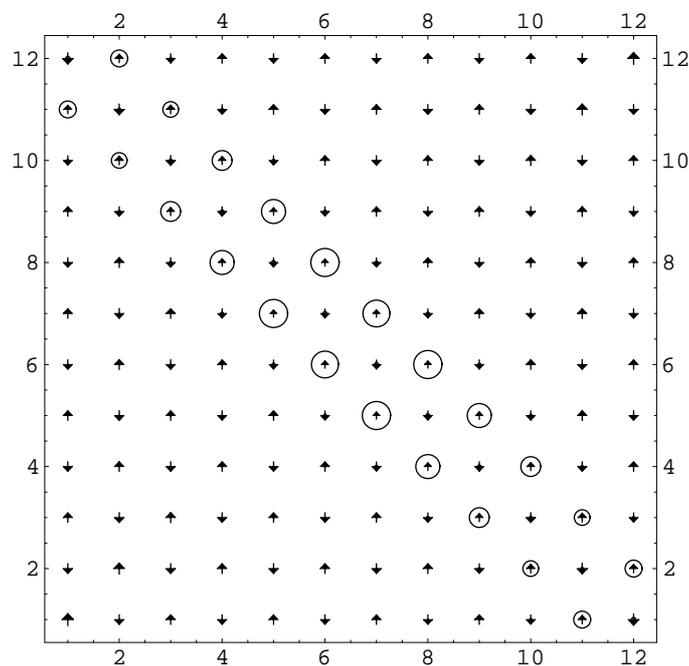
**Abbildung 4.4:** Für ein  $12 \times 12$  Gitter mit  $U/t = 5$  ist die Ladungsdichte-Verteilung (**links**) und die Spindichte-Verteilung (**rechts**) dargestellt. Die dotierte Ladung ist hauptsächlich auf dem Platz  $(6,6)$  lokalisiert, wo die Ladungsdichte reduziert ist auf  $\langle n_i \rangle \simeq 0.55$ . Die staggered magnetization  $(-1)^{i_x+i_y} S_i^z$  ist auf diesem Platz auf den Wert  $-0.18$  reduziert. Der negative Wert zeigt eine Umkehrung zur antiferromagnetischen Néel-Ordnung an. Ein dotiertes Loch bevorzugt eine ferromagnetische Spin-Umgebung, um seine kinetische Energie abzusenken. Die minimale Änderung auf den Randplätzen ist ein Effekt der offenen Randbedingungen, der aber vernachlässigbar ist.



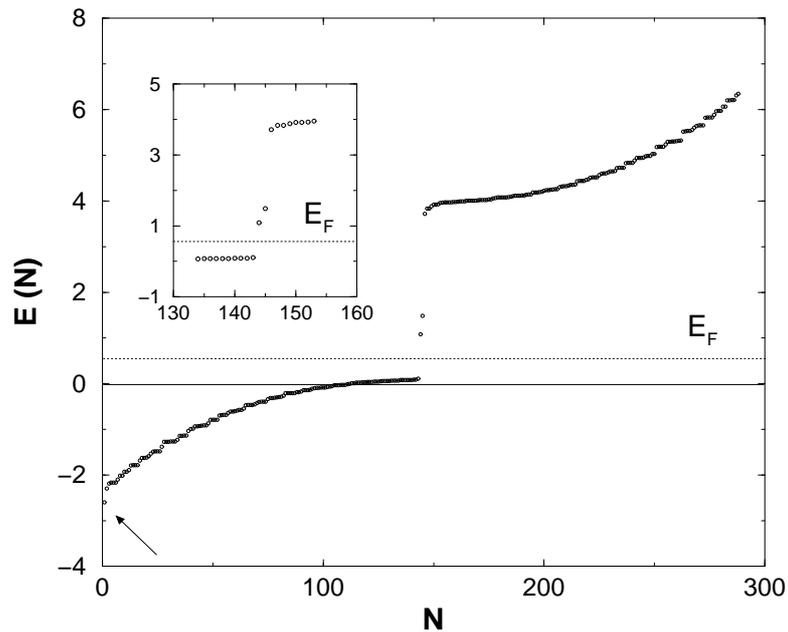
**Abbildung 4.5:** Alternative Darstellung zu Abb. 4.4. Spin- und Ladungsdichte des Polarons mit  $U/t = 5$  auf einem  $12 \times 12$ -Gitter. Die Kreise stellen die relative Ladungsdichte dar. Für größere  $U$  lokalisiert die Ladung praktisch vollständig auf dem Platz  $(6,6)$  und seinen vier nächsten Nachbarn. Effekte durch die offenen Randbedingungen sind vernachlässigbar. Die Pfeile symbolisieren die Projektion der Spins in die Ebene der Startkonfiguration.



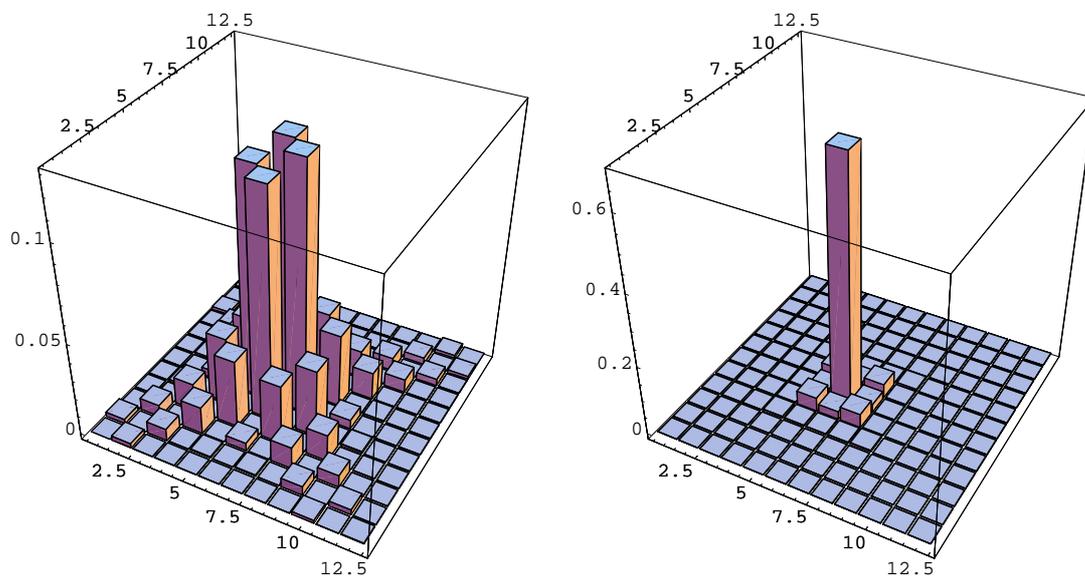
**Abbildung 4.6:** Für ein  $10 \times 10$  Gitter mit offenen Randbedingungen ist der Ordnungsparameter des Antiferromagneten, die mittlere staggered magnetization, durch Kreise und der Ordnungsparameter auf dem Lochplatz durch Rauten von Polaron-Lösungen dargestellt. Ab einem kritischen Wert  $U/t \gtrsim 3$  bildet sich ein ferromagnetisches Zentrum in Form des Polarons aus Abb. 4.5 heraus.



**Abbildung 4.7:** Selbstkonsistente Lösung für ein Loch mit der *kleinen* Wechselwirkung  $U/t = 2$ . Die Ladung ist nicht mehr in einem Zentrum lokalisiert, sondern verteilt sich in Form einer “Zigarre” über die Diagonale des System. Die Spindichte ist ebenfalls moduliert, was den unterschiedlichen Spin-Längen zu entnehmen ist.



**Abbildung 4.8:** Energiespektrum eines Polarons auf einem  $12 \times 12$  Gitter mit  $U/t = 5$ . Es sind nur die ersten  $N^2 - 1 = 143$  Zustände besetzt. Im Mott-Hubbard-Gap liegen zwei diskrete Zustände, die aus dem unteren und dem oberen Hubbardband stammen. Der besetzte Zustand  $N = 1$  ist ebenfalls diskret (siehe Pfeil).

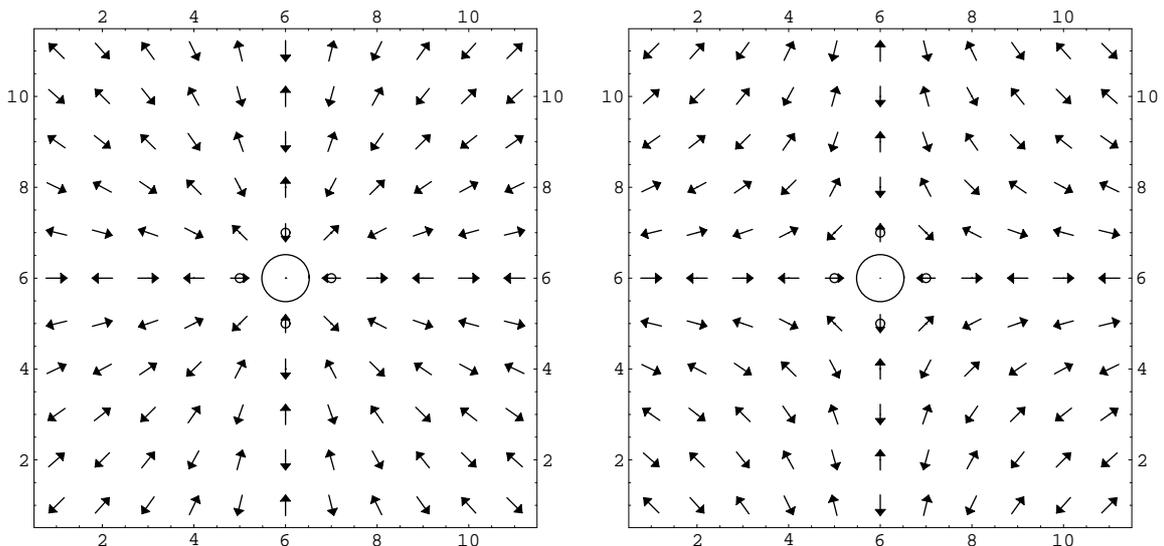


**Abbildung 4.9:** Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\Psi(i)|^2$  (**links**) für den obersten besetzten Zustand  $n = 143$  und (**rechts**) für den untersten unbesetzten Zustand  $n = 144$  der Polaron-Lösung mit  $U/t = 5$ . Der Zustand  $n = 144$  innerhalb der Energielücke ist deutlich lokalisierter. In der Aufenthaltswahrscheinlichkeit spiegelt sich die Ladungsverteilung der Ladung des Loches wider.

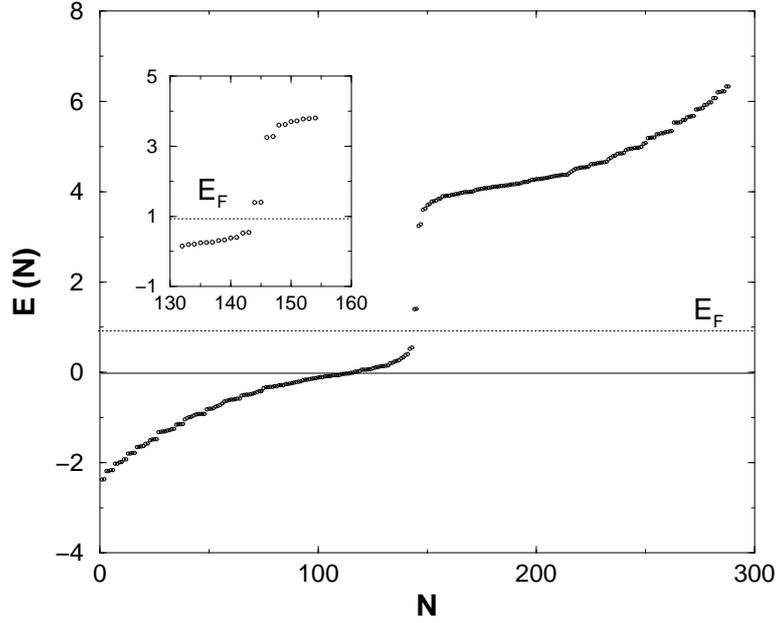
### 4.3.3 Vortex-Lösung

(Anti-) Vortizes sind ebenfalls selbstkonsistente Lösungen des lochdotierten 2D-Hubbard-Modells. Diese *topologischen Anregungen* besitzen eine Windungszahl von 1 ( $-1$ ), d.h. bei einem vollständigen Umlauf um das Zentrum rotieren die Spins auf jedem Untergitter um  $2\pi$  ( $-2\pi$ ). Der Vortexkern ist dabei auf einem *Gitterplatz* lokalisiert (*platzzentrierter Vortex*), auf dem der größte Anteil der dotierten Ladung lokalisiert ist (siehe Abb. 4.12). Als Ergebnis stellt sich heraus, dass plaquetten- oder bindungszentrierte Vortex-Konfigurationen *nicht* stabil sind. Beide Konfigurationen konvergieren in der Hartree-Fock-Näherung zur *platzzentrierten Konfiguration*. Vortex- und Antivortexlösungen haben identische Spektren und unterscheiden sich lediglich in ihrer Windungszahl (Abb. 4.10). Darin drückt sich die Spiegelsymmetrie von Vortex und Antivortex im Spinraum aus. Die Spins liegen in einer durch die Startkonfiguration vorgegebenen Ebene. Die Lösung weist keine Komponente senkrecht zu dieser Ebene auf, so dass keine Meron-Konfiguration vorliegt. Typischerweise ist es für einen einzelnen Spin ungünstig, sich senkrecht zu der Spinstruktur zu stellen. Für Vortex-Lösungen eignen sich aufgrund der Topologie ausschließlich *offene Randbedingungen*. Bis zur Selbstkonsistenz sind einige 1000 Iterationsschritte nötig, vgl. Abb. 4.14.

Das elektronische Spektrum der Eigenzustände ist in Abb. 4.11 dargestellt. Durch die Lochdotierung ist ein *zweifach entartetes, unbesetztes, diskretes Energieniveau innerhalb des Mott-Hubbard-Gaps* induziert worden. Je ein Zustand stammt aus dem Valenz- und aus dem Leitungsband des undotierten Antiferromagneten. Die zweifache Entartung des Einteilchenspektrums deutet auf zwei äquivalente Möglichkeiten hin, ein weiteres Elektron in das System einzubringen. In der selbstkonsistenten Vortex-Lösung ist der Spin im Vortexkern nahezu vollständig unterdrückt, so dass kein Unterschied zwischen einem Spin- $\uparrow$  oder einem Spin- $\downarrow$  Teilchen existiert. Das Energieniveau ist daher *Spin-entartet*.



**Abbildung 4.10:** Selbstkonsistente Spin- und Ladungsverteilung auf einem  $11 \times 11$ -Gitter mit  $U/t = 8$ . Auch für diesen Parameter ergeben sich Vortex-Lösungen: **(links)** Platzzentrierter Vortex. **(rechts)** Platzzentrierter Antivortex. Beide Lösungen haben identische Spektren, vgl. Abb. 4.11.



**Abbildung 4.11:** Energiespektrum eines (Anti-)Vortex aus Abb. 4.12 auf einem  $12 \times 12$ -Gitter mit  $U = 5t$ . Es sind nur die ersten  $N^2 - 1 = 143$  Zustände besetzt. In dem Mott-Hubbard-Gap liegt ein zweifach entartet, diskretes Niveau. Die Zustände stammen aus dem Valenz- und dem Leitungsband.

Wir betrachten die Anregungsenergien  $E_{\text{ex}}$ , wie sie in Abschnitt 4.2 für die Polaron- und die Vortextlösung definiert wurden. In Abb. 4.13 sind sie für die Parameter  $U/t = 5, 8$  über der Gittergröße  $N$  dargestellt. Wie erwartet ist die Anregungsenergie für beide Parameterwerte für das Polaron niedriger als für einen Vortex mit seiner höheren Windungszahl. Die Vortex-Energien wurden mit der zu erwartenden Funktion  $E_{\text{vortex}} = \alpha \ln N + e_{\text{core}}$  in sehr guter Näherung approximiert. Die Parameterwerte  $\alpha$  und  $e_{\text{core}}$  finden sich in der Erläuterung zu Abb. 4.13. Sie stimmen mit den Resultaten in der Arbeit von Berciu/John [79] überein.

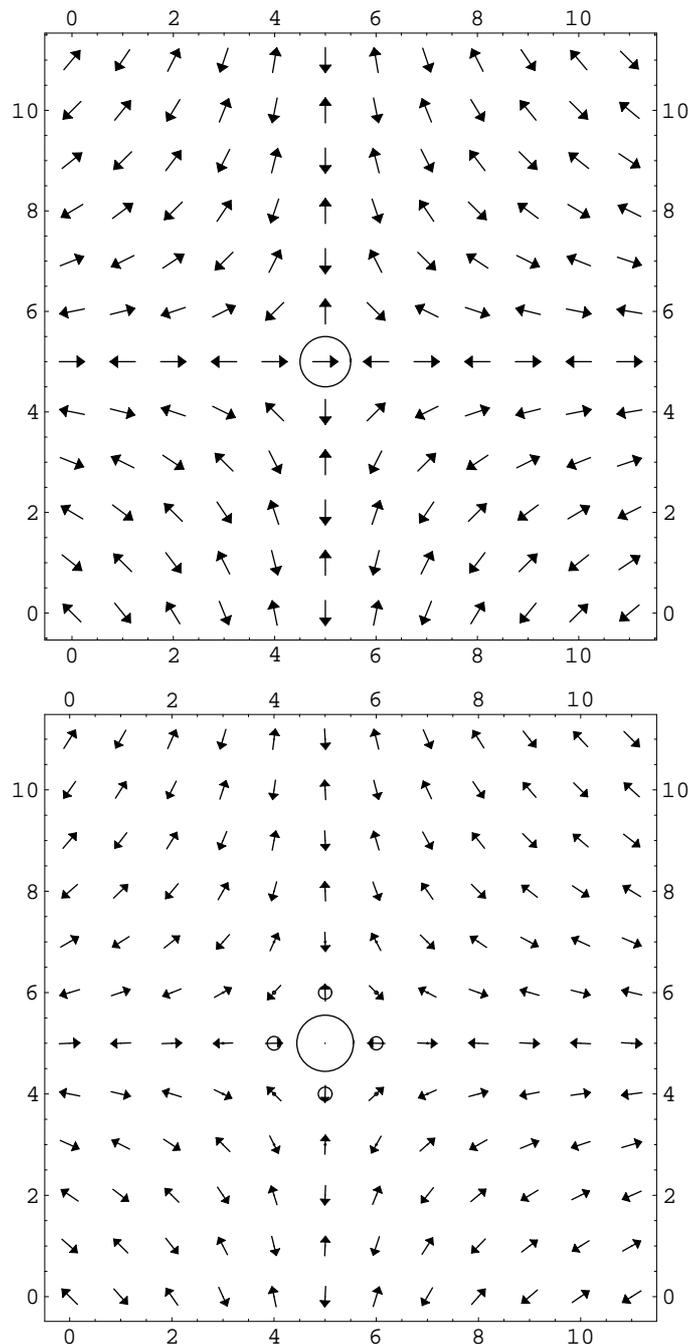
N	$U/t = 5$				$U/t = 8$			
	AFM		Pol.	Vor.	AFM		Pol.	Vor.
	$e_g/t$	gap/t	$E_{\text{ex}}^{\text{pol}}/t$	$E_{\text{ex}}^{\text{vor}}/t$	$e_g/t$	gap/t	$E_{\text{ex}}^{\text{pol}}/t$	$E_{\text{ex}}^{\text{vor}}/t$
8	-0.6069	3.8820	1.1339	1.7578	-0.4110	7.1560	2.4989	3.0512
10	-0.6221	3.8724	1.1281	1.8567	-0.4372	7.1491	2.4953	3.1281
12	-0.6321	3.8680	1.1257	1.9390	-0.4399	7.1459	2.4937	3.1907
14	-0.6393	3.8657	1.1245	2.0093	-0.4424	7.1444	2.4929	3.2436
16	-0.6447	3.8644	1.1239	2.0706	-0.4385	7.1435	2.4925	3.2894
18	-0.6489	3.8636	1.1235	2.1247	-0.4463	7.1430	2.4922	3.3298
20	-0.6522	3.8632	1.1232	2.1733	-0.4478	7.1427	2.4921	3.3659

**Tabelle 4.1:** Energie pro Teilchen  $e_g$  und Energielücke des Antiferromagneten (AFM) und die Anregungsenergien  $E_{\text{ex}}$  der Polaron (Pol.)- und Vortex (Vor.)-Konfiguration in Einheiten von  $t$  für  $U = 5$  und  $U = 8$ . Die Anregungsenergien sind in der Abb. 4.13 grafisch dargestellt.

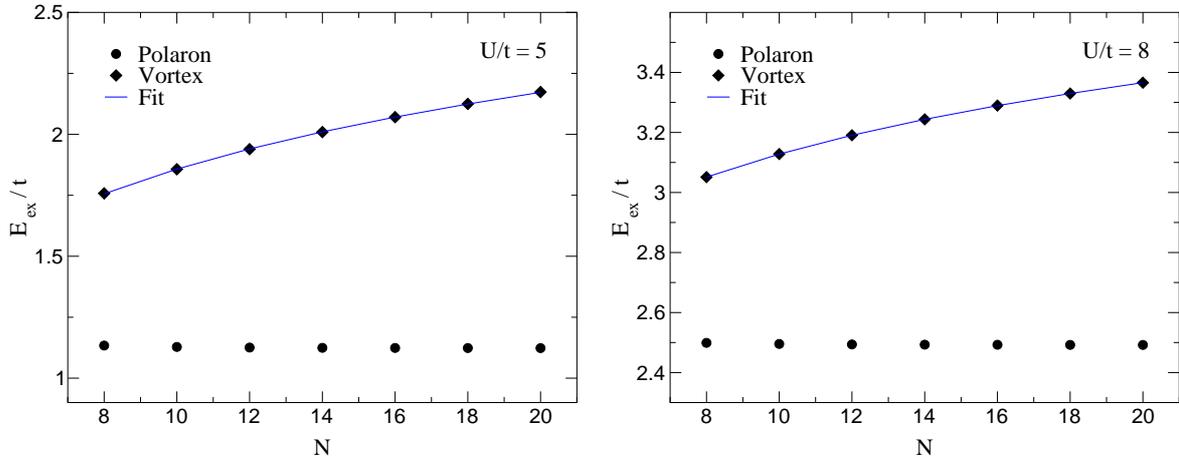
Um eine selbstkonsistente Vortex-Lösung zu erhalten, muß die Startkonfiguration bereits eine Windungszahl von  $\pm 1$  besitzen. Eine Vortex-Anregung aus dem antiferromagnetischen Néel-Zustand, der als homogener Zustand eine topologische Konstanten von 0 besitzt, kostet eine Energie, die mit der Systemgröße logarithmisch divergiert, vgl. Abb. 4.13. In der Selbstkonsistenziteration der Hartree-Fock-Gleichungen bleibt aber die Topologie der Startkonfiguration erhalten, so dass ein einzelner Vortex nur einen *metastabiler* Zustand mit einer höheren Energie als z.B. das Polaron darstellt. Vergés *et al.* [75] haben fälschlicherweise argumentiert, dass die Fluktuationen des Iterationsprozesses bereits für eine Stabilitätsaussage ausreichen. Yonemitsu und Bishop [81] haben die Instabilität der Vortex-Lösung gezeigt, indem sie innerhalb der Iterationsprozedur kleine Zufallszahlen zu den Selbstkonsistenzfeldern addiert haben.

Auch im Parameterbereich  $1 \leq U \leq 4$  bleibt die plattformzentrierte Vortex-Spinstruktur eine selbstkonsistente Lösung in der HF-Näherung. Erhöht man die Wechselwirkungsstärke  $U \gtrsim 8$ , so ändert sich die resultierende Konfiguration qualitativ. Anstatt eines Vortex-Kerns mit unterdrücktem mittleren Spin bildet sich im Gitterzentrum ein Gebiet von ferromagnetisch gekoppelten Spins heraus. Für zunehmendes  $U$  nimmt die Ausdehnung dieses Gebietes zu, vgl. die Abb. 4.15. Es scheint, dass das System ein ferromagnetisches Polaron bilden möchte, aber der Vortex nicht aufgelöst werden kann. Die dazu nötigen starken Fluktuationen sind innerhalb der Selbstkonsistenz-Iteration nicht möglich. Der Vortex mit einer Windungszahl von 1 bleibt als metastabiler Zustand erhalten. Quantitativ kann man die kritische Stärke  $U_c$ , oberhalb der ein Vortex keine Lösung mehr ist, abschätzen, indem man den Betrag des mittleren Spinmoments auf dem Gitterplatz des Vortex-Kerns über  $U$  aufträgt. Man erkennt in der Abb. 4.16, dass ab  $U \gtrsim 9$  der Spin auf diesem Platz nicht mehr unterdrückt ist. Die Lösungen konvergieren langsamer, da sie nicht mehr durch die Startkonfiguration approximiert sind.

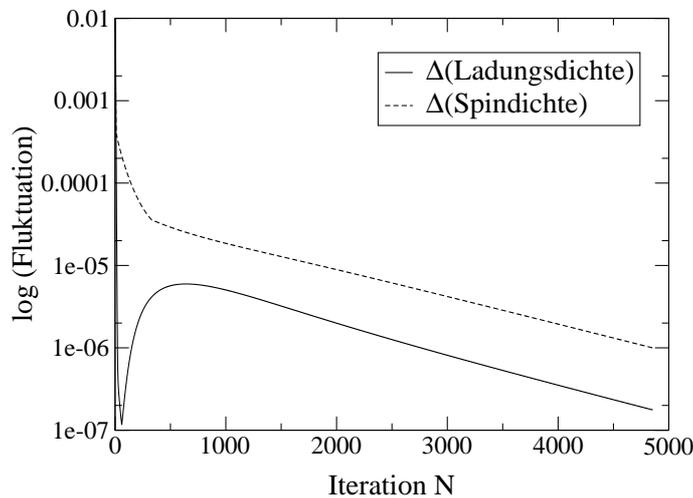
In Abb. 4.17 habe ich den Fall eines doppelt geladenen Vortex betrachtet, der bei Vergés [75] als Lösung für *zwei* dotierte Löcher auftritt. In diesem Fall ergibt sich für  $U/t = 5$  eine *plaquettenzentrierte Spinverteilung*. Für  $U/t = 8$  tendiert die Ladungsverteilung zu einer Polaron-Lösung, das System bleibt aber aus topologischen Gründen ein Vortex. Es zeigt sich hier die Tendenz, dass für große  $U$  ein Vortex keine selbstkonsistente Lösung der HF-Näherung mehr ist. Das gilt auch für den Fall, wenn nur ein Loch dotiert wird.



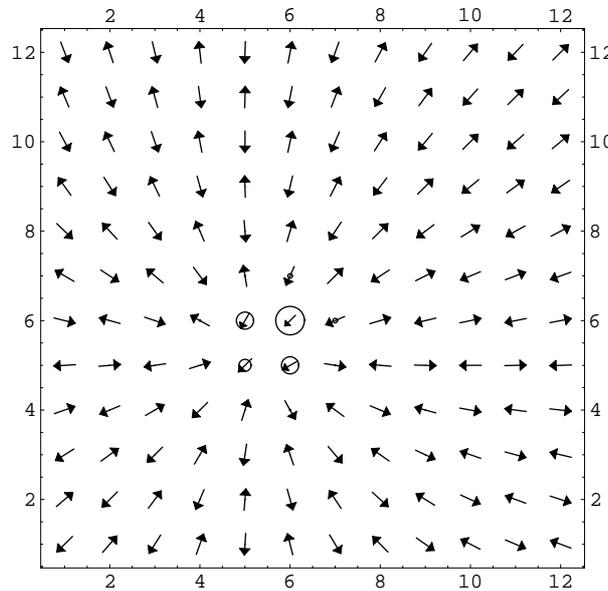
**Abbildung 4.12:** (oben) Startkonfiguration der Spin- und Ladungsdichte für einen Anti-Vortex auf einem  $12 \times 12$  Cluster mit  $U/t = 5$ . (unten) Selbstkonsistente Lösung nach ca. 3500 Iterationsschritten. Die Ausdehnung des Vortexkern beschränkt sich auf einen Gitterplatz. Auf dem Platz (5,5) beträgt die mittlere Ladungsdichte  $\simeq 0.61$  und die Magnetisierung ist praktisch auf Null reduziert. Sie besitzt weiterhin keine Komponente senkrecht zur Vortex-Ebene. Die platzzentrierte Lösung ist unabhängig davon, ob  $N$  gerade oder ungerade gewählt wird. Die kleine Anisotropie der Spins ist durch Gittereffekte verursacht (vgl. Abb. 4.10). Wenn das Gitter vergrößert wird, ist der Spin im Vortex-Core *vollständig* unterdrückt.



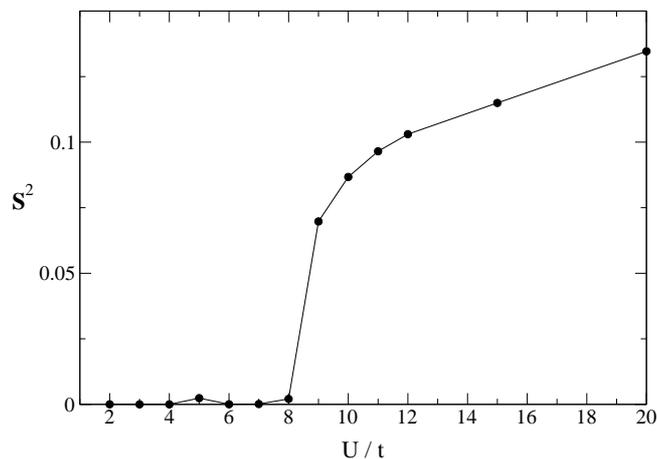
**Abbildung 4.13:** Anregungsenergien (in Einheiten von  $t$ ) eines einzelnen Vortex (Raute) und eines Polarons (Kreis) als Funktion der Clustergroe  $N$ . In dem linken Diagramm ist  $U/t = 5$ , in dem rechten wurde  $U/t = 8$  gewahlt. Die Vortex-Energie zeigt die erwartete logarithmische Abhangigkeit  $E_{\text{vortex}} = \alpha \ln N + e_{\text{core}}$  mit den Parametern  $\alpha = 0.454$  und  $e_{\text{core}} = 0.81209$  fur  $U/t = 5$  und  $\alpha = 0.34338$  und  $e_{\text{core}} = 2.3373$  fur  $U/t = 8$ . Man erkennt, dass die Anregungsenergie fur beide Parameter fur ein Polaron deutlich niedriger als fur einen einzelnen Vortex ist. Weiter kann man der Darstellung entnehmen, dass die Polaronkonfiguration in beiden Fallen schon fur  $N \geq 10$  praktisch unabhangig von  $N$  ist, so dass bei den betrachteten Gittergroen und durch die offenen Randbedingungen *keine finite-size-Effekte* auftreten.



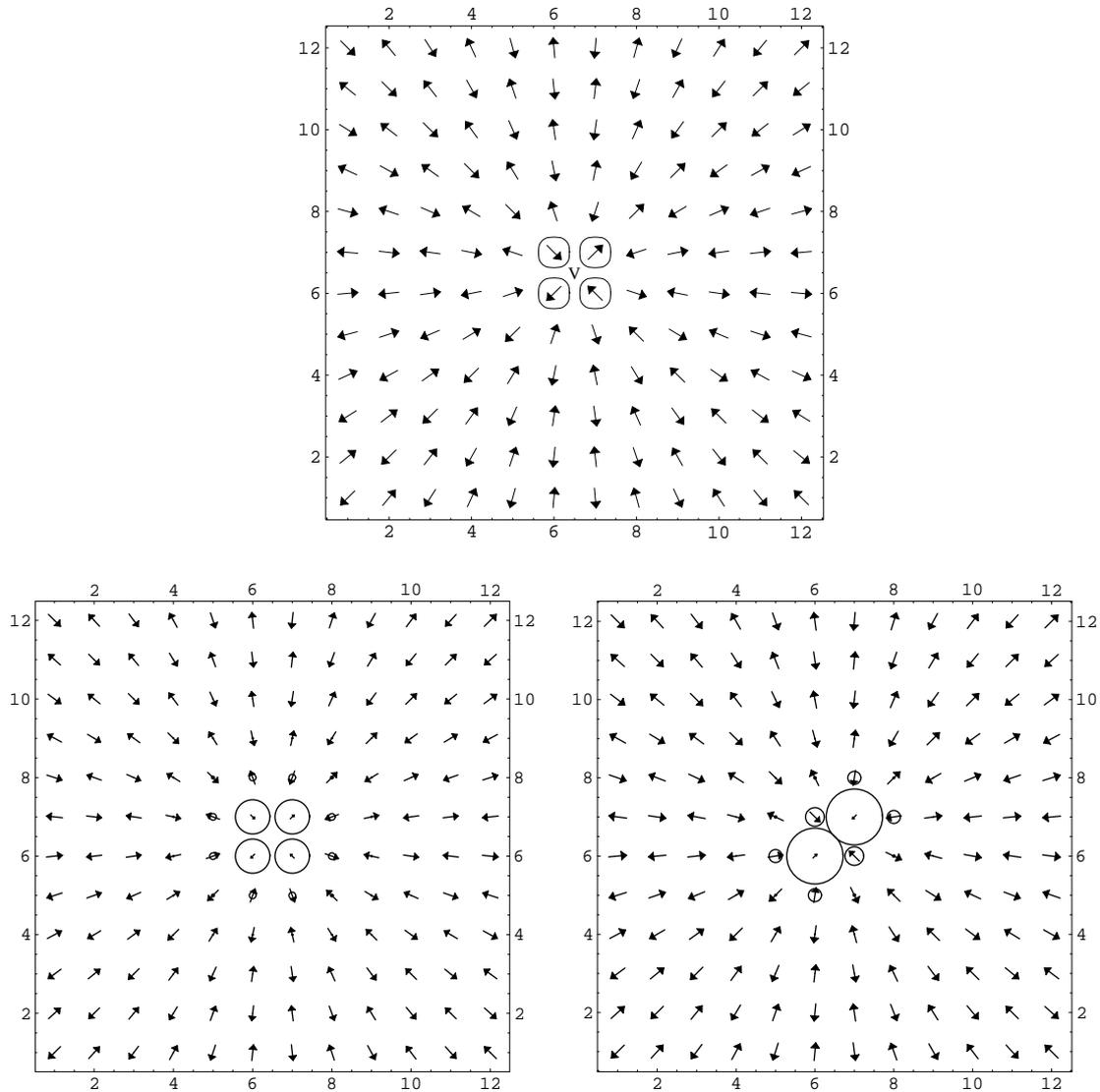
**Abbildung 4.14:** Darstellung der maximalen Abweichung der Spin- und Ladungsdichte in jedem Iterationsschritt. Die Fluktuationen sind logarithmisch aufgetragen. Fur eine vorgegebene Genauigkeit von  $\epsilon = 10^{-6}$  werden ca. 5000 Schritte auf einem  $12 \times 12$ -Cluster bei  $U/t = 8$  benotigt. Die Spindichte konvergiert langsamer als die Ladungsdichte. Polaron- oder Neel-Losungen benotigen deutlich weniger Iterationsschritte ( $\sim 100$ ).



**Abbildung 4.15:** Konfiguration mit  $U/t = 15$  nach 8000 Iterationsschritten und einer maximalen Abweichung von  $8.4 \cdot 10^{-8}$  in der lokalen Ladungsdichte und  $4.1 \cdot 10^{-6}$  in den mittleren Spindichte-Komponenten. Der Vortexkern ist nicht mehr auf einem Platz zentriert, sondern wird auf eine Plaquette “gedrückt”. Das System hat die Tendenz, mit stärkerer Wechselwirkung ferromagnetische Cluster ähnlich einem Polaron zu bilden. Der topologische Windungszustand kann aber innerhalb der HF-Iterationsprozedur nicht aufgelöst werden.



**Abbildung 4.16:** Das quadrierte mittlere Spinmoment  $\langle \mathbf{S} \rangle^2$  über der Wechselwirkung  $U$  des Gitterplatzes (6,6) eines  $12 \times 12$ -Gitters, auf dem der Vortex-Kern in der Startkonfiguration lokalisiert ist. Man erkennt, dass oberhalb von  $U_c \gtrsim 9$  der Spin auf diesem Platz nicht mehr unterdrückt ist. Das steht in Verbindung mit einer qualitativen Änderung von einer Vortex-Lösung mit plattformzentriertem Kern hin zu einem ferromagnetischen Cluster, vgl. Abb. 4.15.

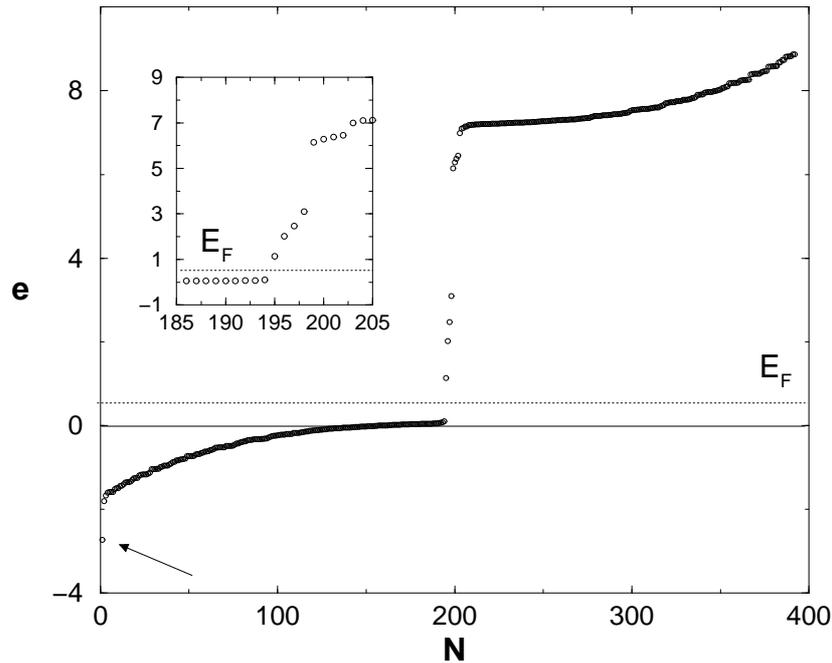


**Abbildung 4.17:** In diesen Vortex-Lösungen dotieren wir *zwei* Löcher in das halbgefüllte Hubbard-Modell, um die Lösung mit [75] vergleichen zu können. Wir gehen (**oben**) von einer plaquettenzentrierten Spinkonfiguration aus. Interessanterweise sind in diesem Fall die beiden Lösungen im Unterschied zu *einer* dotierten Ladung ebenfalls *plaquettenzentriert*. Die Ladungskonfigurationen unterscheiden sich aber deutlich. Für  $U/t = 5$  (**links**) verteilt sich die Ladung homogen um die Plaquette, wohingegen die Ladungsverteilung für  $U/t = 8$  (**rechts**) derjenigen von zwei Polaronen gleicht, vgl. Abb. 4.20. Es sieht so aus, als ob die Lösung zur Polaron-Konfiguration tendiert, aber die Windung in den Spins nicht auslösen kann.

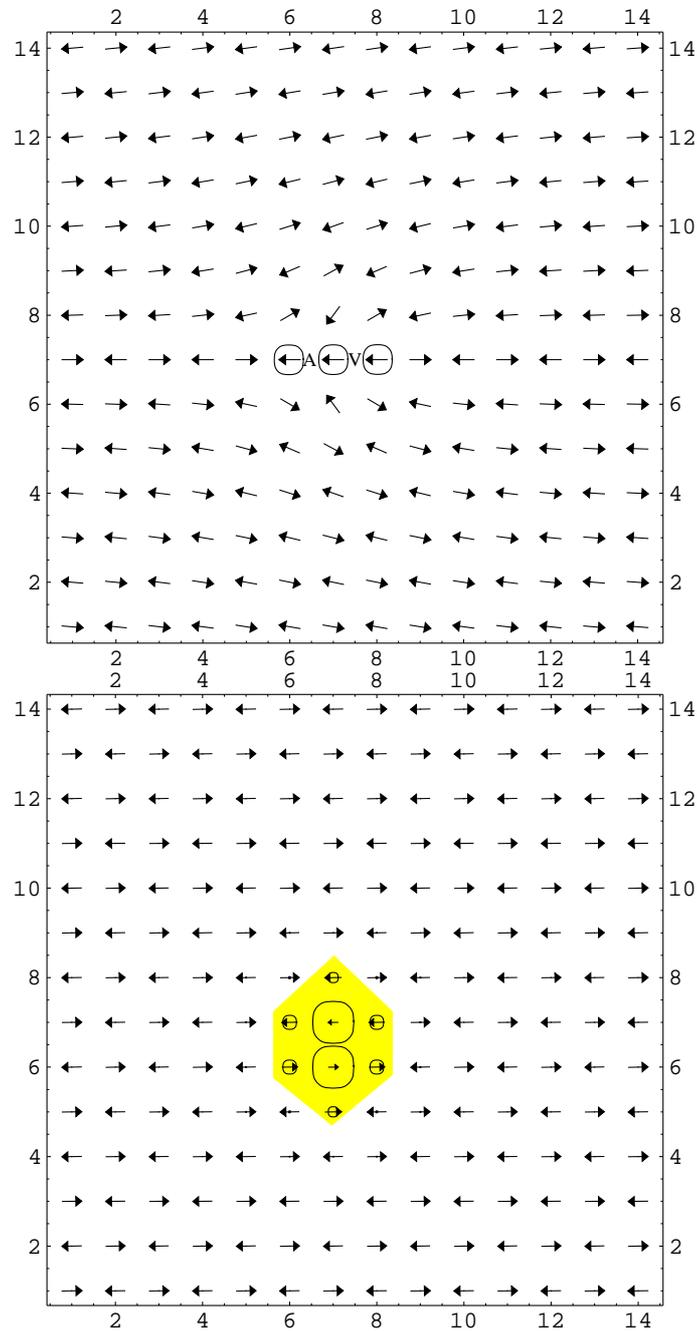
#### 4.3.4 Untersuchung eines Vortex-Antivortex-Paares

Die logarithmische Divergenz im Fall eines Vortex kann dadurch kompensiert werden, dass man *zwei* Löcher betrachtet, die ein Vortex-Antivortex-Paar bilden. Die Windungszahlen kompensieren sich und das Paar kann als *Anregung aus dem antiferromagnetischen Grundzustand* auftreten. Als mögliche Startkonfigurationen benutzen wir zum einen die in [25] vorgeschlagene *bindungscentrierte Anordnung* der Vortexzentren (Abb. 4.19 oben) und zum anderen den Fall, dass die Zentren auf den Plaquetten von diagonalen übernächsten Nachbarn lokalisiert sind (Abb. 4.20 oben). Diese Konfiguration tritt als Lösung in der Hartree-Fock-Näherung des “Spin-Flux”-Hamiltonians [79] und in der “slave-boson”-Näherung des Einband-Hubbard-Modells [26] auf .

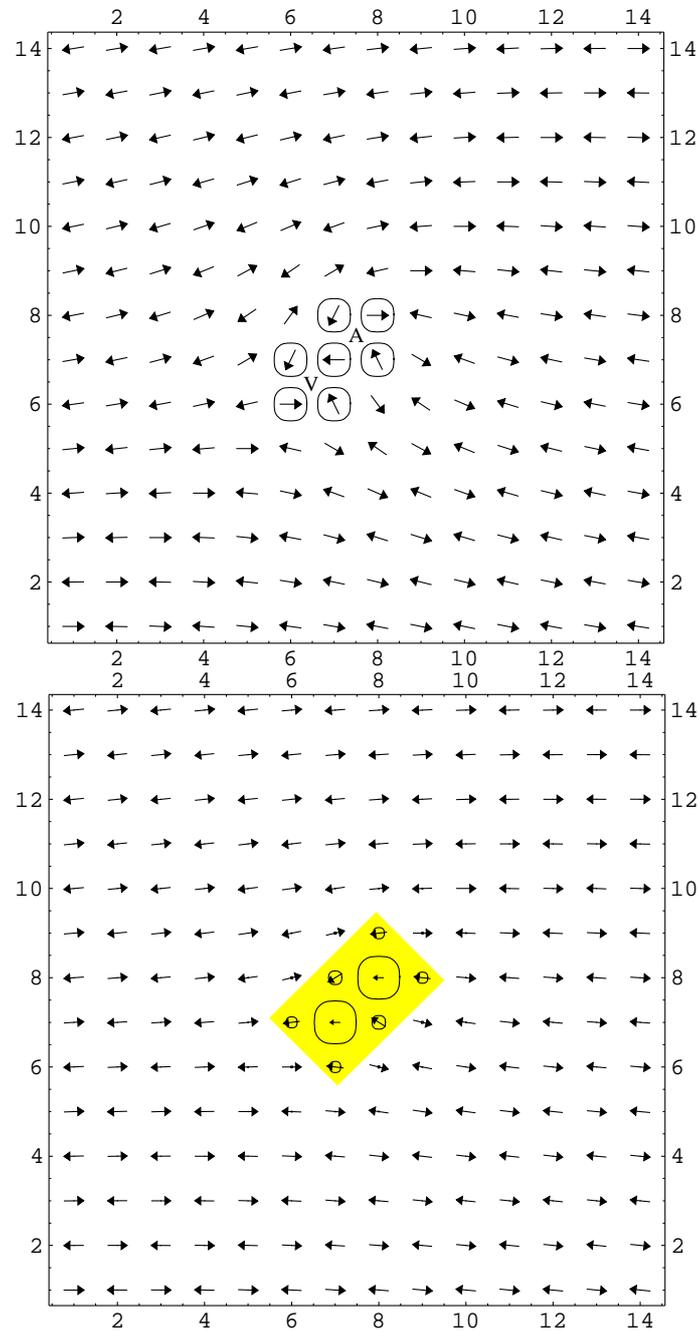
Als Ergebnis stellt sich heraus, dass alle Startkonfigurationen für  $U/t = 5$  bzw. 8 in der HF-Näherung zu einer *Doppelpolaron-Lösung* konvergieren, vgl. die Lösungen in Abb. 4.19 und 4.20. In Abb. 4.18 ist das *Energie-Spektrum* zu der Lösung aus Abb. 4.20 dargestellt. Pro Loch wird je ein Zustand aus dem oberen und aus dem unteren Band in die Lücke induziert. Der unterste besetzte ist ebenfalls ein lokalisierter Zustand geworden. Für den Parameter  $U/t = 5$  ergeben sich ähnliche Situationen. Die Ladung ist delokalischer als für  $U/t = 8$ . Selbstkonsistenz wurde schneller erreicht ( $\sim 2000$  Schritte gegenüber  $\sim 7000$ ).



**Abbildung 4.18:** Eigenenergie-Spektrum der Lösung für zwei Löcher aus Abb. 4.20 mit  $U/t = 8$ . Pro Loch werden je ein Zustand aus dem oberen und unteren Hubbard-Band in die Energielücke induziert. Die unterste Einteilchen-Energie  $E_1$  ist ein diskreter Zustand (Pfeil). Weiterhin ergibt sich ein vierfaches unbesetztes Niveau unterhalb des oberen Bandes.



**Abbildung 4.19:** (oben) Als Startkonfiguration wird ein bindungszentriertes Vortex-Antivortex-Paar auf einem  $14 \times 14$ -Gitter mit  $U/t = 8$  betrachtet. (unten) Die selbstkonsistente Lösung besteht aus einem Polaron mit zwei ferromagnetischen Plätzen. Bei einer Genauigkeit von  $\epsilon = 10^{-6}$  wurden ca. 5300 Iterationsschritte benötigt.



**Abbildung 4.20:** (oben) Das plaquettenzentrierte Vortex-Antivortex-Paar als Startkonfiguration auf einem  $14 \times 14$ -Gitter mit  $U/t = 8$ . (unten) Die selbstkonsistente Lösung besteht aus zwei *Polaronen* auf diagonal benachbarten Gitterplätzen. Bei einer Genauigkeit von  $\epsilon = 10^{-6}$  wurden ca. 7000 Iterationsschritte benötigt. Eine Anordnung den Paares auf übernächsten diagonalen Plaquetten konvergiert ebenfalls zu dieser Lösung.

Da die Vortex-Antivortex-Paare keine selbstkonsistenten Lösungen der HF-Gleichungen sind, können wir die Konfigurationsenergien nicht direkt mit der stabilen Doppelpolaron-Lösung vergleichen. Wir benutzen daher für eine *Abschätzung der Größenordnung* die Konfigurationsenergie des nicht selbstkonsistenten Paares nach ca. 15 Iterationsschritten. Die Ladungs- und Spindichte haben sich bereits eingependelt und variieren nur noch langsam. Der Iterationsverlauf der maximalen Abweichung zeigt dort ein erstes Minimum. Das bondzentrierte (plaquettenzentrierte) Paar hat eine Gesamtenergie (d.h. Summe der besetzten Zustände) von  $-86.90t$  ( $-86.90t$ ). Die selbstkonsistenten Polaron-Lösungen besitzen die lediglich wenig niedrigeren Energien  $-87.2925t$  ( $-87.2729t$ ). Die selbstkonsistenten Doppelpolaron-Lösungen unterscheiden sich von den Vortex-Antivortex-Konfigurationen nur durch eine *kleine* Energiedifferenz. Auch eine Variation der Parameter hat das Resultat nicht verändern können.

#### 4.4 Zusammenfassung

Die Hartree-Fock-Näherung ist eine Molekularfeld-Näherung, die zeitliche Fluktuationen um die elektronischen Mittelwerte vernachlässigt. Sie erlaubt uns in der generalisierten Form mit allen Spin-Freiheitsgraden und lokalen HF-Feldern die Lösung geeignet großer Systeme mit inhomogenen Spin-Strukturen. Durch den nicht-störungstheoretische Zugang ist die Näherung aber nicht kontrollierbar, so dass man immer die kritische Frage stellen muß, ob es sich bei der Lösung um eine wirkliche Eigenschaft des Hamiltonians oder um einen numerischen Artefakt handelt.

Durch eine starke Wechselwirkung  $U$  werden die Fluktuationen verringert, so dass man in diesem Fall vernünftige Resultate mit der HF-Methode erwarten kann. Bei halber Füllung beschreibt die Hartree-Fock-Näherung qualitativ korrekt über einen weiten Parameterbereich den Grundzustand des Hubbard-Modells als *antiferromagnetischen Isolator*. Für ein nahezu völlig gefülltes System würde der HF-Ansatz ebenfalls das qualitativ richtige Verhalten liefern, da die lokale Coulomb-Abstoßung in diesem Fall irrelevant wird.

Die interessante Frage ist die Gültigkeit der statischen HF-Lösungen im *mittleren Bereich* von  $U/t$ . Wir konnten in diesem Kapitel die in der Literatur [75, 95, 79] diskutierten Lösungen für Vortex und Polaron bei  $T = 0$  reproduzieren und systematisch untersuchen. Das Polaron ist – wie erwartet – energetisch günstiger als ein einzelner topologischer Defekt. Der Vortex ist lediglich ein *metastabiler Zustand* mit seinem Zentrum auf einem Gitterplatz. Unser Interesse galt dem Vortex-Antivortex-Paar, das sich in der HF-Näherung aber als *instabil* herausstellte.

Für die Diskussion der Resultate können technische Beschränkungen der Näherung wie z.B. finite-size-Effekte oder Konvergenzprobleme ausgeschlossen werden. Als mittlere Feld-Näherung unterschätzt der HF-Ansatz die Bedeutung von *Quantenfluktuationen* der Spin- und Ladungsfreiheitsgrade. Thermische Fluktuationen spielen hier wegen der Beschränkung auf  $T = 0$  keine Rolle. Die Effekte aufgrund der offenen Randbedingungen ist für die untersuchten Gittergrößen ebenfalls zu vernachlässigen gewesen.

Für die weitere Untersuchung der Stabilität von Vortex-Antivortex-Paaren im Hubbard-Modell betrachten wir in Kapitel 5 das physikalischere Dreiband-Hubbard-Modell, in dem zusätzlich die Sauerstoff-Orbitale der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen berücksichtigt werden.

## Kapitel 5

# Die Hartree-Fock-Näherung für das Dreiband-Hubbard-Modell

Im letzten Abschnitt haben wir mit Hilfe der inhomogenen, generalisierten Hartree-Fock (HF)-Näherung das Einband-Hubbard-Modell für kleine Lochdotierungen untersucht. In diesem Kapitel wenden wir die gleiche Methode für die Lösung des Dreiband-Hubbard-Modells an, das im Kapitel 2 als Minimalmodell zur Beschreibung der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen der Kuprate eingeführt wurde. Im Dreiband-Modell werden explizit die *Sauerstoff-Zustände* in den  $\text{CuO}_2$ -Ebenen und die Hybridisierung von Cu- und O-Zuständen berücksichtigt. Der Grundzustand des Dreiband-Modells ohne Dotierung ist ein Mott-Isolator vom Ladungstransfer-Typ mit unterschiedlichem Verhalten bei Elektron- und Lochdotierung, wie es das Phasendiagramm der Kuprate nahelegt (vgl. Abb. 1.2). Das Modell bietet uns damit einen realistischeren Ausgangspunkt als das Einband-Modell im vorherigen Kapitel.

Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung werden wir die Lösungen des undotierten und des mit einem Loch dotierten Systems untersuchen. Zum Vergleich können einige Arbeiten aus der Literatur herangezogen werden [84, 85, 86]. Wieder werden wir nach der *Stabilität eines Vortex-Antivortex-Grundzustandes* in dem mit zwei Löchern dotierten System fragen. Für das Dreiband-Modell ist diese Frage noch nicht explizit untersucht worden.

Zusätzlich stellt sich die Frage nach qualitativen Unterschieden zwischen den Lösungen des Einband- und Dreiband-Modells im Rahmen der HF-Näherung. In diesem Zusammenhang werden wir untersuchen, inwieweit die Beschränkung auf ein Einband-Modell gerechtfertigt ist. Angesichts des offensichtlich unterschiedlichen Verhaltens bei Loch- und Elektron-dotierung erwarten wir zwischen den beiden Modellen einige Unterschiede. Hiermit ist die Frage nach der Gültigkeit des Bildes von Zhang und Rice [72] für ein Cu-O-Singulett verbunden, das eine Beschränkung auf ein Einband-Modell ermöglicht (vgl. Kapitel 2). Wir schließen mit der Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse.

## 5.1 Naherung des Dreiband-Hamiltonians

Wir wiederholen ohne weitere Erlaunderung den bereits in Gl. (2.1) im Kapitel 2 eingefuhrten Hamiltonian des Dreiband-Hubbard-Modells:

$$\mathcal{H}_{3B} = \epsilon_d \sum_{i,\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \epsilon_p \sum_{j\alpha\sigma} p_{j\alpha\sigma}^\dagger p_{j\alpha\sigma} - t_{pd} \sum_{\langle ij \rangle, \alpha, \sigma} g_{ij}^\alpha (p_{j\alpha\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + h.c.) \quad (5.1)$$

$$- t_{pp} \sum_{\langle jj' \rangle} \tilde{g}_{jj'} (p_{j\sigma}^\dagger p_{j'\sigma} + h.c.) + U_d \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d + U_p \sum_{j,\alpha} n_{j\alpha\uparrow}^p n_{j\alpha\downarrow}^p. \quad (5.2)$$

Fur eine Einteilchen-Naherung analog zum Einband-Fall mussen wir wieder den quadratischen Wechselwirkungsterm linearisieren. Dabei sind die lokalen Spin- und Ladungsdichte-Felder fur die drei Orbitale  $d_{x^2-y^2}$ ,  $p_x$  und  $p_y$  fur Cu und O auf einem Gitterplatz  $i$  durch den weiteren Index  $\alpha = (d, p_x, p_y)$  zu berucksichtigen.<sup>1</sup> Die entkoppelte Wechselwirkung enthalt in der generalisierten Form der HF-Naherung ebenfalls transversale Spin-Freiheitsgrade  $S^x$  und  $S^y$ :

$$\sum_{i\alpha} U_{i\alpha} n_{i\uparrow\alpha} n_{i\downarrow\alpha} \simeq \sum_{i\alpha} U_{i\alpha} \left( \langle c_{i\uparrow\alpha}^\dagger c_{i\uparrow\alpha} \rangle c_{i\downarrow\alpha}^\dagger c_{i\downarrow\alpha} + \langle c_{i\downarrow\alpha}^\dagger c_{i\downarrow\alpha} \rangle c_{i\uparrow\alpha}^\dagger c_{i\uparrow\alpha} - \right. \quad (5.3)$$

$$\left. - c_{i\uparrow\alpha}^\dagger \langle c_{i\downarrow\alpha}^\dagger c_{i\uparrow\alpha} \rangle c_{i\downarrow\alpha} - c_{i\downarrow\alpha}^\dagger \langle c_{i\uparrow\alpha}^\dagger c_{i\downarrow\alpha} \rangle c_{i\uparrow\alpha} \right) - E_0 \quad (5.4)$$

$$= \sum_{i\alpha} \left( \frac{U_{i\alpha}}{2} \langle n_{i\alpha} \rangle n_{i\alpha} - 2U_{i\alpha} \langle \mathbf{S}_{i\alpha} \rangle \cdot \mathbf{S}_{i\alpha} \right) - E_0 \quad (5.5)$$

$$= \sum_{i\alpha} U_{i\alpha} (c_{i\uparrow\alpha}^\dagger, c_{i\downarrow\alpha}^\dagger) \begin{pmatrix} \langle n_{i\downarrow\alpha} \rangle & -\langle S_{i\alpha}^- \rangle \\ -\langle S_{i\alpha}^+ \rangle & \langle n_{i\uparrow\alpha} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{i\uparrow\alpha} \\ c_{i\downarrow\alpha} \end{pmatrix} - E_0. \quad (5.6)$$

Die Energiekonstante betragt

$$E_0 = \sum_{i\alpha} U_{i\alpha} \left( \langle n_{i\uparrow\alpha} \rangle \langle n_{i\downarrow\alpha} \rangle - |\langle c_{i\uparrow\alpha}^\dagger c_{i\downarrow\alpha} \rangle|^2 \right) \quad (5.7)$$

$$= \sum_{i\alpha} U_{i\alpha} \left( \frac{1}{4} \langle n_{i\alpha} \rangle^2 - \langle S_{i\alpha}^z \rangle^2 - \langle S_{i\alpha}^x \rangle^2 - \langle S_{i\alpha}^y \rangle^2 \right). \quad (5.8)$$

Das weitere Vorgehen gestaltet sich analog zum Einband-Fall: Der Hartree-Fock-Grundzustand bei  $T = 0$  wird aus dem antisymmetrischen Produkt der  $N_e$  Einteilchen-Zustande gebildet,

$$|\Psi\rangle_{\text{HF}} = \prod_{n=1}^{N_e} a_n^\dagger |0\rangle, \quad (5.9)$$

wobei  $a_n^\dagger$  Eigenzustande des Hartree-Fock-Hamiltonians erzeugt. Diese Zustande entwickeln wir nach den Gitteroperatoren  $c_{i\sigma\alpha}$ , wobei als Entwicklungskoeffizient fur jedes Orbital auf einem Gitterplatz  $i$  eine Einteilchen-Wellenfunktion  $\phi_n(i, \sigma, \alpha)$  auftritt. Die Matrixelemente fur die lokalen Terme,

$$\underline{H}_{ii,\alpha} = \begin{pmatrix} \langle c_{i\uparrow\alpha}^\dagger c_{i\uparrow\alpha} \rangle & \langle c_{i\uparrow\alpha}^\dagger c_{i\downarrow\alpha} \rangle \\ \langle c_{i\downarrow\alpha}^\dagger c_{i\uparrow\alpha} \rangle & \langle c_{i\downarrow\alpha}^\dagger c_{i\downarrow\alpha} \rangle \end{pmatrix}, \quad (5.10)$$

<sup>1</sup>Im obigen Hamiltonian ist dieser Index durch die verschiedenen Ortsindizes  $i$  bzw.  $j$  vermieden worden.

lassen sich in der Ortsbasis mit den HF-Feldern für Ladungs- und Spindichte  $\langle n_{i,\beta} \rangle$  und  $\langle \mathbf{S}_{i,\beta} \rangle$  und dem Index  $\beta = (d, p)$ , der nur noch  $d$ - und  $p$ -Orbitale unterscheidet, schreiben als

$$\underline{H}_{ii,\beta} = U_{i\beta} \begin{pmatrix} \epsilon_{i\beta}/U_{i\beta} + \frac{1}{2}\langle n_{i\beta} \rangle - \langle S_{i\beta}^z \rangle & -(\langle S_{i\beta}^x \rangle - i\langle S_{i\beta}^y \rangle) \\ -(\langle S_{i\beta}^x \rangle + i\langle S_{i\beta}^y \rangle) & \epsilon_{i\beta}/U_{i\beta} + \frac{1}{2}\langle n_{i\beta} \rangle + \langle S_{i\beta}^z \rangle \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

Dabei bezeichnen  $\epsilon_{i\beta}$  die Platzenergien  $\epsilon_d$  und  $\epsilon_p$  von Cu- und O-Orbitalen und  $U_{i\beta}$  die Coulomb-Energien  $U_d$  und  $U_p$ . Die Mittelwerte der lokalen Ladungsdichten berechnen sich aus den Einteilchen-Wellenfunktionen gemäß

$$\langle n_i^d \rangle = \langle \Psi | d_{i\nu}^\dagger \sigma_{\nu\mu}^0 d_{i\mu} | \Psi \rangle_{\text{HF}} = \sum_n \sum_\sigma |\phi_n(i, \sigma, \alpha = d)|^2 \quad (5.12)$$

$$\langle n_i^p \rangle = \langle \Psi | p_{i\nu}^\dagger \sigma_{\nu\mu}^0 p_{i\mu} | \Psi \rangle_{\text{HF}} = \sum_n \sum_\sigma \sum_{\alpha=p_x}^{p_y} |\phi_n(j, \sigma, \alpha)|^2, \quad (5.13)$$

wobei über gleiche Indizes summiert wird und die Summe  $n$  über die Gitterplätze  $i$  läuft. Entsprechend gilt für die selbstkonsistent zu bestimmenden, mittleren lokalen Spindichten der Cu- und der O-Orbitale:

$$\langle \mathbf{S}_i^d \rangle = \frac{1}{2} \langle \Psi | c_{i\nu d}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\nu\mu} c_{i\mu d} | \Psi \rangle_{\text{HF}} = \frac{1}{2} \sum_n \phi_n^*(i, \nu, \alpha = d) \boldsymbol{\sigma}_{\nu\mu} \phi_n(i, \mu, \alpha = d) \quad (5.14)$$

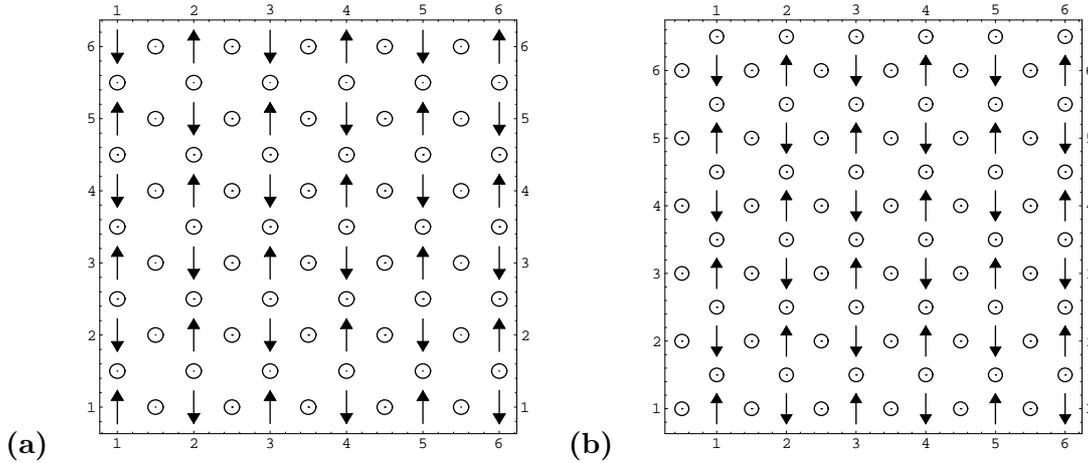
$$\langle \mathbf{S}_i^p \rangle = \frac{1}{2} \langle \Psi | c_{i\nu\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\nu\mu} c_{i\mu\alpha} | \Psi \rangle_{\text{HF}} = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{\alpha=p_x}^{p_y} \phi_n^*(i, \nu, \alpha) \boldsymbol{\sigma}_{\nu\mu} \phi_n(i, \mu, \alpha). \quad (5.15)$$

## 5.2 Randbedingungen und Parameter

Damit auch Vortizes (Windungszahl  $\neq 0$ ) als selbstkonsistente Lösungen möglich sind, benutzen wir wie schon im Einband-Modell *offene Randbedingungen*. Dabei gibt es für den Randabschluß des  $N \times N$ -Quadratgitters mehrere Möglichkeiten. Wir benutzen die Konfiguration, bei der der Rand aus Sauerstoff- und Kupferplätzen gebildet wird, siehe 5.1(a). In [85] wird zusätzlich die Möglichkeit betrachtet, dass der Rand ausschließlich durch Sauerstoff-Plätze besteht. Die Lösungen zu den beiden Randbedingungen unterscheiden sich nicht qualitativ, so dass wir für offene Randbedingungen ausschließlich von der ersten Gitterkonfiguration Gebrauch machen. Dabei reduziert sich die Zahl der Sauerstoff-Plätze um  $2N$ , so dass sich im dotierungsfreien Fall lediglich  $3N^2 - 2N$  Elektronen im System befinden.

Anders als im Einband-Modell, in dem der Einfluß der offenen Randbedingungen in homogenen Lösungen vernachlässigbar war, verursachen die offenen Randbedingungen im Dreiband-Fall eine starke Störung an den Gitterrändern (vgl. Abschnitt 5.3). Da wir Vortex- und Polaron-Lösungen in diesem Kapitel nicht quantitativ vergleichen, benutzen wir ergänzend *periodische Randbedingungen* als Gitterkonfiguration. In diesem Fall bleiben die Einheitszellen auch am Rand unverändert, siehe Abb. 5.1(b).

Bei den Hochtemperatur-Supraleitern handelt es sich im undotierten Fall um Ladungstransfer-Isolatoren (siehe Einleitung). Die relevanten *Parameter* im undotierten Dreiband-Modell sind (a) das *Hopping*  $t_{pd}$ , (b) die *Coulomb-Wechselwirkung*  $U_d$  und (c) der *Band-Abstand*  $\Delta =$



**Abbildung 5.1:** Benutzte Gitterkonfigurationen anhand eines  $6 \times 6$ -Gitters. **(a)** *Offene Randbedingungen.* Der Rand besteht aus Cu- und O-Plätzen. Die antiferromagnetisch geordneten Spins symbolisieren das halbbesetzte Cu-Orbital und bilden ein Quadratgitter. Die O-Plätze sind durch Kreise repräsentiert. Die Zahl der Sauerstoff-Plätze am Rand reduziert sich für ein  $N \times N$ -Gitter um  $2N$ . **(b)** *Periodische Randbedingungen.* Die Einheitszelle wird durch einen Cu-Platz und zwei O-Plätze gebildet. Ein  $N \times N$ -Cluster besteht demnach aus  $3N^2$  Orbitalen.

$\epsilon_p - \epsilon_d$ . Die Coulomb-Wechselwirkung der Sauerstoff-Orbitale  $U_p$  wird vernachlässigt, da dieser Prozess im Fall doppelt besetzter O-Orbitale irrelevant ist. Weiterhin vernachlässigen wir auch das O-O-Hopping.<sup>2</sup> Ein Band-Abstand  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d > 0$  in Verbindung mit  $U_d > \Delta$  hat zur Folge, dass dotierte Löcher vorzugsweise Sauerstoff-Orbitale besetzen, wie es im Experiment beobachtet wird. Die Ladungstransferlücke, die im *Elektronenbild* die besetzten Zustände im Sauerstoff-dominierten Band und die unbesetzten Cu-artigen Zustände im oberen Hubbard-Band trennt, ist durch  $E_{CT} = U_d - \Delta$  gegeben. Wir gehen von den folgenden effektiven Parametern des Dreiband-Modells aus (vgl. Kapitel 2):

$$t_{pd} = 1 \text{ eV}, \quad U_d = 8 \text{ eV}, \quad \Delta = 5 \text{ eV} \quad \text{bzw.} \quad E_{CT} = 3 \text{ eV}. \quad (5.16)$$

Die Hüpf-Energie  $t_{pd}$  dient in den numerischen Rechnungen als Energie-Einheit, auf die die anderen Größen bezogen werden.

## 5.3 Resultate

### 5.3.1 Lösungen des undotierten Modells

Ohne Dotierung sind die drei Orbitale  $d_{x^2-y^2}$ ,  $p_x$  und  $p_y$  mit insgesamt 5 Elektronen besetzt. Für verschiedene Parametersätze aus der Literatur sind die Lösungen des Dreiband-Hubbard-Modells in der Hartree-Fock-Näherung *antiferromagnetische Isolatoren* vom Ladungstransfer-Typ mit einer Energielücke der Größenordnung  $E_{CT} \sim U_d - \Delta$ , die besetzte und unbesetzte

<sup>2</sup>Die Parameter  $U_p$  und  $t_{pp}$  ermöglichen einen quantitativen Vergleich mit anderen Arbeiten und damit eine Kontrolle des Computerprogramms.

Elektronenzustände trennt. Insbesondere konnte eine quantitative Übereinstimmung mit der Arbeit von Vergés *et al.* [85] erzielt werden, was eine Bestätigung für die Korrektheit des Computerprogramms ist. Die untersuchten Parameter und einige Größen sind in der Tabelle in Abb. 5.2 zusammengefasst. Die berechneten Größen zeigen *keine qualitativen Unterschiede* zwischen den einzelnen Sätzen. Diese Beobachtung rechtfertigt die Festlegung auf einen einzigen, effektiven Standard-Parametersatz, siehe Gl. (5.16).

Einen quantitativen Unterschied beobachtet man zwischen *periodischen* und *offenen Randbedingungen*. Bei offenen Randbedingungen ändern sich die Ladungstransferprozesse am Rand. Aus der Tabelle 5.2 geht hervor, dass die Sauerstoff-Plätze ein nicht mehr verschwindendes magnetisches Moment besitzen. In der Abb. 5.3 sind die selbstkonsistente Spindichte und die relative Ladungsdichte mit offenen Randbedingungen dargestellt. Man erkennt, dass sich am Rand eine inhomogene Ladungsverteilung einstellt. Auch in den Spektren der Einteilchen-Energien sieht man den Effekt der Randbedingungen. Bei periodischen Randbedingungen ergeben sich zahlreiche entartete Niveaus im Spektrum, in denen sich die räumlichen Symmetrien der Lösungen widerspiegeln. Bei offenen Randbedingungen sind diese Entartungen reduziert.

Die Rotationsinvarianz des Hartree-Fock-Hamiltonians wird durch die Wahl der Startkonfiguration aufgehoben. In der Abb. 5.3 orientieren sich die Cu-Spins kollinear entlang der vorgegebenen Achse.

Wir stellen im weiteren die selbstkonsistenten Lösungen einiger Grenzfälle und physikalischer Regime vor und diskutieren vor allem deren elektronische Spektren, die man aus den Eigenwerten der Matrix des HF-Hamiltonians erhält. Zusätzlich kann man den Charakter des Einteilchen-Zustandes bestimmen, indem man die lokale Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\phi(i)|^2$  der Einteilchen-Wellenfunktion getrennt für Cu- und O-Orbitale berechnet. Die Gesamtwahrscheinlichkeit für alle Plätze ist exakt 1.

Wir beginnen mit dem *Grenzfall ohne Hopping*  $t_{pd} = 0$ . Die Zustände hybridisieren nicht und besitzen daher *keine Dispersion*, siehe Spektrum in Abb. 5.4 (oben). Das Cu-Band liegt bei der Platzenergie  $\epsilon_d = 0$  und die Sauerstoff-Zustände haben die Energie  $\epsilon_p = 5$ . Das System enthält für ein  $N \times N$ -Gitter im dotierungsfreien Fall  $2N^2$  Cu-Zustände und  $4N^2$  Sauerstoff-Zustände. Die  $N^2$  Cu-Zustände im oberen Hubbard-Band sind nicht besetzt. Ihre Energie liegt bei  $\epsilon_d + U_d = 8$ .

Im unteren Spektrum in Abb. 5.4 ist der *Fall verschwindender Wechselwirkung*  $U_d \rightarrow 0$  dargestellt.<sup>3</sup> Die Cu-Zustände spüren in diesem Fall keine Abstoßung bei Doppelbesetzung eines Orbitals. Durch das Hüpfen mischen die Cu- und O-Zustände und werden dadurch dispersiv. In dem vom Kupfer bestimmten *bindenden Band* können die Zustände ihre Energie durch das Hopping absenken, wohingegen das halbbesetzte *antibindende Band* seine Energie anhebt. Eine der möglichen Linearkombination von Sauerstoff-Zuständen bildet – wie erwartet – ein dispersionsloses, *nichtbindendes Band* bei der Platzenergie  $\epsilon_p = 5$ .

Im Parameterbereich  $U_d < \Delta$  stellt das System einen *Mott-Hubbard-Isolator* dar. Wir unterscheiden die beiden Parameter  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d > 0$  (Kupratregime) und  $\Delta < 0$ . Im ersten

---

<sup>3</sup>Der Fall  $U_d = 0$  führt zu numerischen Problemen, so dass eine beliebig kleine Wechselwirkung benutzt wird.

	A, pRB	A, oRB	B	C	D
$t_{pd}$	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
$U_d$	8.0	8.0	6.3	4.0	8.1
$\Delta$	5.0	5.0	4.0	1.0	5.0
$E_{CT}$	3.0	3.0	2.3	3.0	3.1
$t_{pp}$	-	-	0.4	-	0.5
$U_p$	-	-	-	-	2.8
$E/N_e$	3.794	3.707	3.000	0.588	4.815
$Q_{Cu}/N_{Cu}$	1.212	1.200	1.210	1.222	1.430
$m_{Cu}^z$	0.779	0.791	0.780	0.743	0.560
$m_O^z$	$\sim 10^{-16}$	0.002	$\sim 10^{-16}$	$\sim 10^{-16}$	$\sim 10^{-15}$

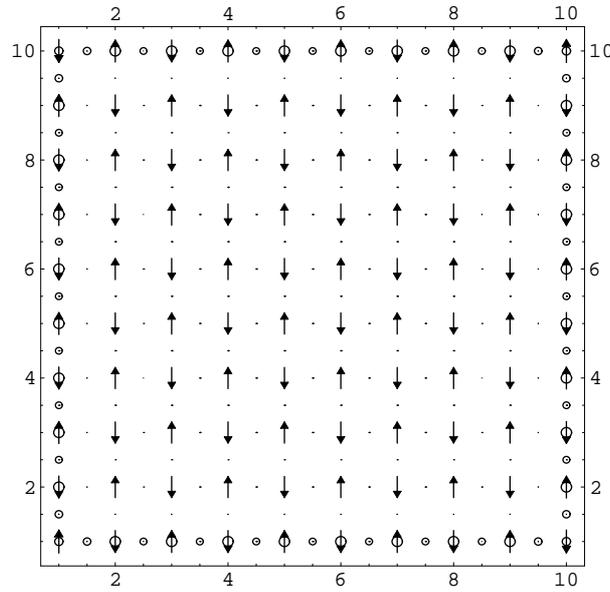
**Abbildung 5.2:** Vergleich verschiedener Parametersatze fur das Dreiband-Modell auf einem  $10 \times 10$ -Gitter. Als Losung der Hartree-Fock-Naherung ergibt sich in allen Fallen eine antiferromagnetische Neel-Ordnung der Cu-Spins. Der Standardsatz *A* aus Gl. (5.16) weist einen deutlichen Unterschied in der Magnetisierung  $m^z$  zwischen periodischen Randbedingungen (pRB) und offenen Randbedingungen (oRB) auf, vgl. auch Abb. 5.3. Im Satz *B* [47] wurde zusatzlich das O–O-Hupfen  $t_{pp}$  berucksichtigt. Der Satz *C* [87] weist ein deutlich kleines  $U_d$  bei gleicher Ladungstransferlucke  $E_{CT}$  auf. Dieser Satz wurde in der Arbeit von Verges *et al.* [85] verwendet. Im Satz *D* [88] wird zusatzlich der Einflu der Coulomb-Wechselwirkung zwischen Sauerstoff-Zustanden  $U_p$  berucksichtigt, der ansonsten vernachlassigt wird. Die Parameter sind auf das Hopping  $t_{pd}$  normiert, das uns in den Rechnungen als Energie-Einheit dient.

Fall ist die Platzenergie fur Cu niedriger als fur O. Die Fermi-Energie  $E_F$  liegt innerhalb des antibindenden Bandes, siehe Abb. 5.5 (oben). Die Cu-Zustande an der Fermi-Energie spuren die Wechselwirkung  $U_d$ . Da dem antibindenden Band aber nur wenige Cu-Zustande beigemischt sind, ergibt sich lediglich eine *kleine* Bandaufspaltung. Die deutlich groere Bandlucke im bindenden Band spiegelt im korrelierten System die Wirkung von  $U_d$  der Cu-Zustande im antibindenden Band wider. Insgesamt sind die Energieskalen in diesem Regime deutlich “renormiert”, vgl. Abb. 5.5 (oben). Das nichtbindende Band von Sauerstoff-Zustanden besteht weiterhin.

Im Fall  $\Delta < 0$  liegen die Sauerstoff-Platze energetisch gunstiger als Cu-Platze.<sup>4</sup> Das bindende Band ist von Sauerstoff-Zustanden dominiert. Das Cu-artige Band an der Fermi-Energie spaltet aufgrund der Coulomb-Abstoung in ein unteres und oberes Hubbard-Band auf, siehe 5.5 (unten). Die Fermi-Energie liegt in der Energielucke ( $\sim U_d$ ) zwischen den Hubbard-Bandern.

Verwendet man die in Gl. (5.16) angefuhrten Parameter, entspricht die HF-Naherung einem *Ladungstransfer-Isolator* mit einer Energielucke  $E_{CT} \sim U_d - \Delta$  zwischen dem besetzten, sauerstoffdominierten Band und dem unbesetzten, Cu-artigen oberen Hubbard-Band, siehe Abb. 5.6 (oben). Das lediglich schwach dispersive untere Hubbard-Band bei  $\epsilon \sim -1$  konnte durch den kinetischen Beitrag des Hupfens die Energie relativ zur Platzenergie  $\epsilon_d = 0$

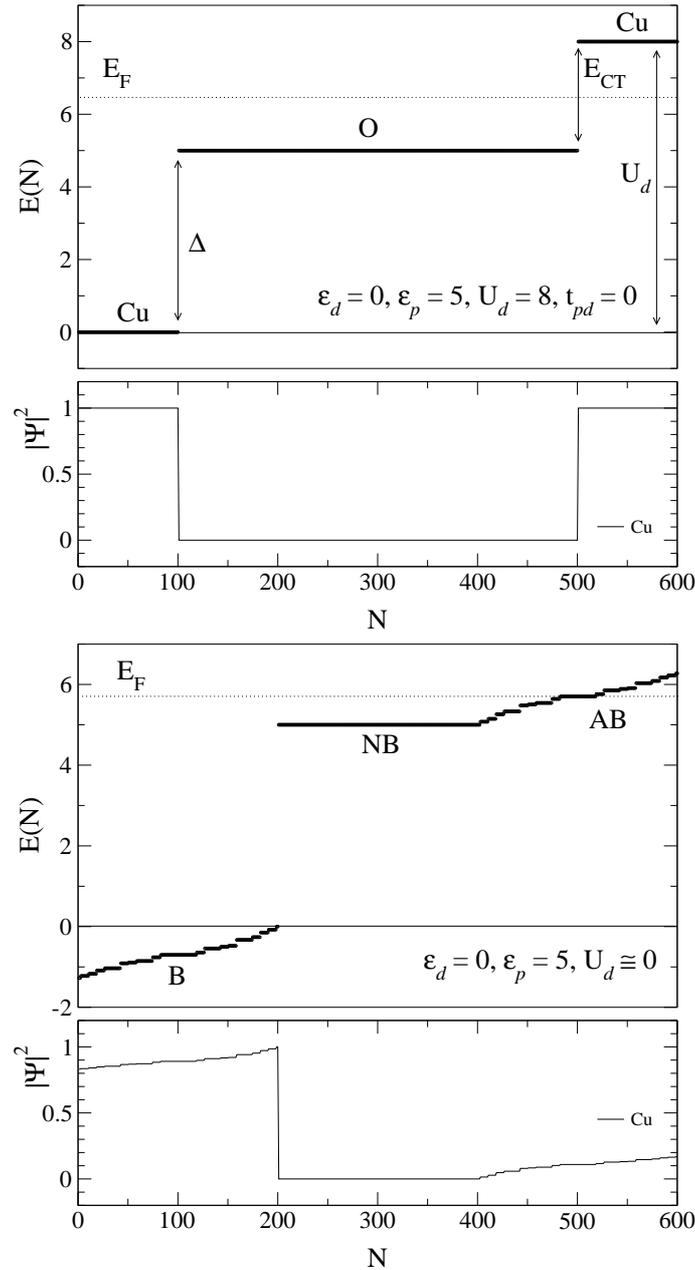
<sup>4</sup>Obwohl bei den Kupraten dieser Fall *nicht* vorliegt, diskutieren wir die Losung. In einem Review-Artikel von Brenig [52] wird dieser Fall falschlicherweise fur die Kuprate diskutiert, vgl. auch das *Zaanen-Sawatzky-Allen*-Schema im Kapitel 2.



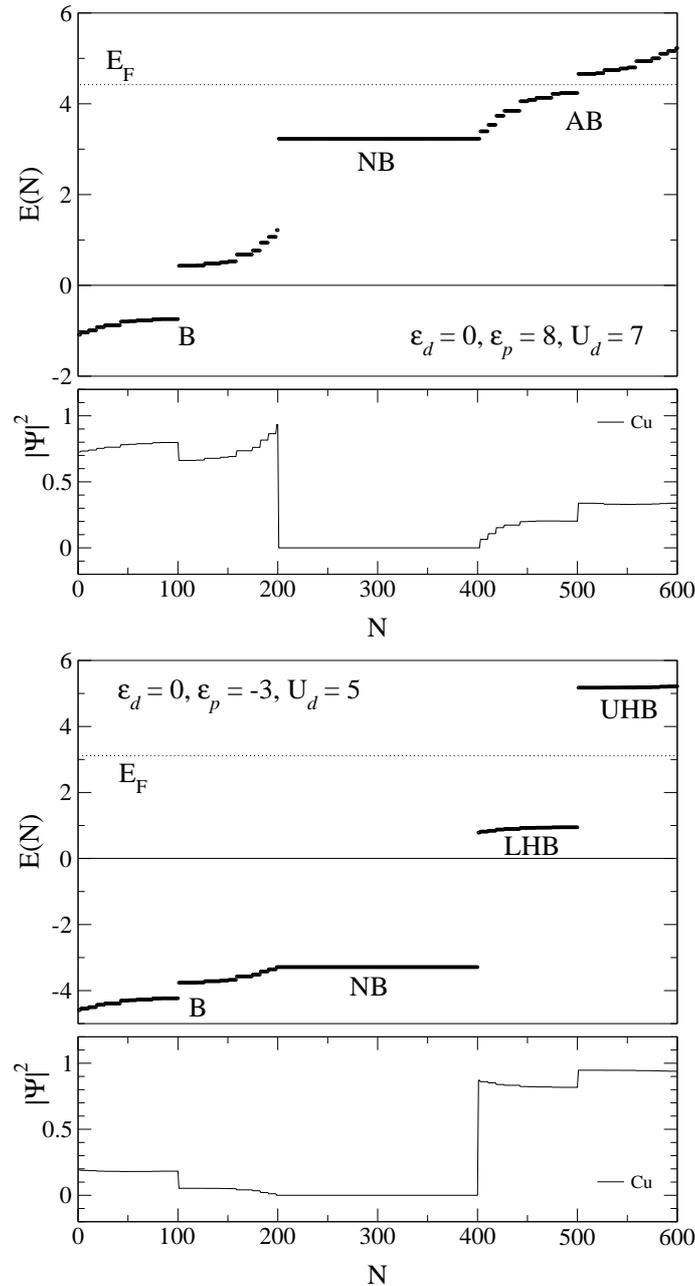
**Abbildung 5.3:** Antiferromagnetische Ordnung der Cu-Spins als Lösung der HF-Näherung des Dreiband-Modells mit *offenen Randbedingungen* ohne Dotierung. Es sind die Standard-Parameter verwendet worden. Ein Effekt der offenen Randbedingungen ist, dass die Ladungsdichte am Rand nicht mehr homogen verteilt ist. Die Kreise stellen die relative Ladungsdichte dar.

absenken. Das nichtbindende Band ( $\epsilon \sim 3$ ) liegt ebenfalls unterhalb der Platzenergie von  $\epsilon_p = 5$ . Symmetrisch ober- und unterhalb zum nichtbindenden Band liegen sauerstoffdominierte Bänder, die aus dem bindenden und dem antibindenden Band hervorgegangen sind. Die zahlreichen Energieentartungen entsprechen den räumlichen Symmetrien der Lösung, die durch die periodischen Randbedingungen erhalten bleiben.

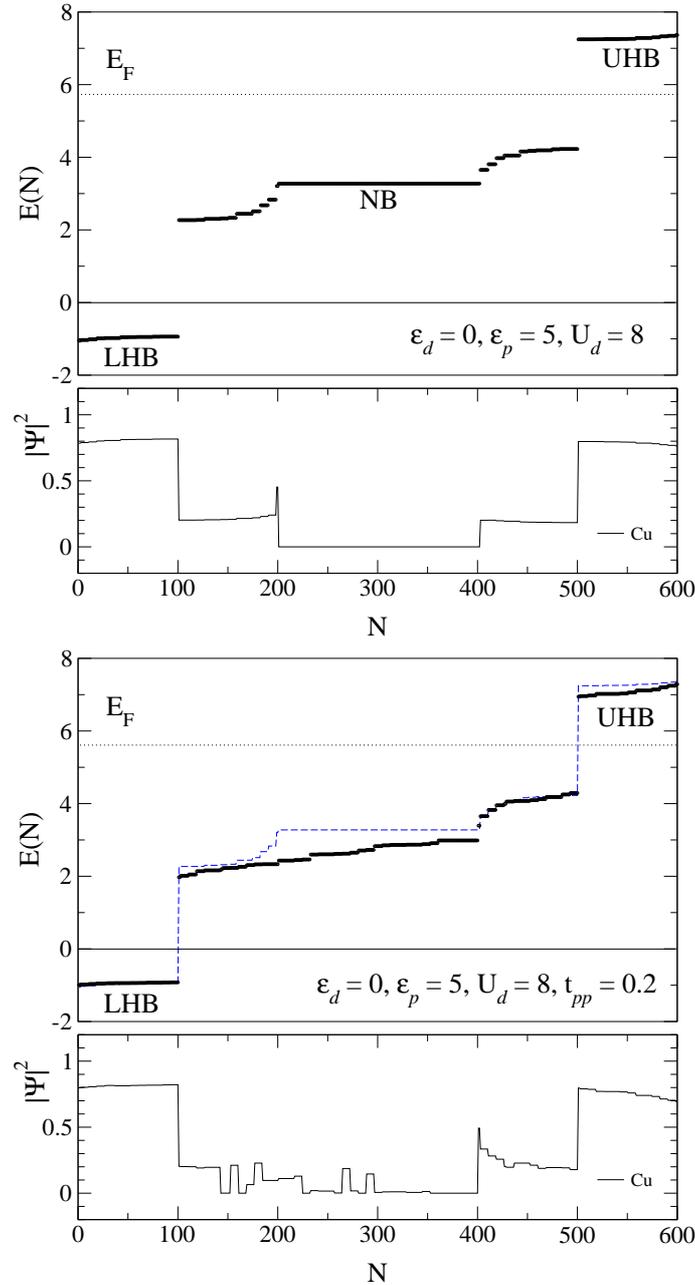
Im unteren Spektrum in Abb. 5.6 wird der *Einfluß des O–O-Hüpfens* mit  $t_{pp} = 0.2$  studiert. Dieser Prozess führt im wesentlichen zu einer Energieabsenkung von Zuständen des nichtbindenden Bandes, das nun dispersiv wird. Die scheinbare Asymmetrie im Spektrum ist dadurch verursacht, dass die Eigenwerte energetisch aufsteigend aufgetragen werden. Durch  $t_{pp}$  profitieren vor allem Zustände im nichtbindenden Band, die damit z.T. energetisch unterhalb der bindenden O-Zustände liegen. Der unstetige Verlauf in der Ausfenthaltungswahrscheinlichkeit zeigt diese Mischung der Eigenzustände unterschiedlichen Charakters, da die Zustände aus dem nichtbindenden Band ihren überwiegenden Sauerstoff-Charakter behalten.



**Abbildung 5.4:** Einteilchen-Energiespektren eines  $10 \times 10$ -Gitters für die Grenzfälle *ohne Hopping*  $t_{pd} = 0$  (**oben**) und ohne Wechselwirkung  $U_d \rightarrow 0$  (**unten**). Ansonsten bleiben die Standard-Parameter unverändert. (**oben**) Das nicht-dispersive Sauerstoff-Band liegt bei der onsite-Energie  $\epsilon_p = 5$ , wohingegen die Cu-Zustände in ein unteres und oberes Band bei  $\epsilon_d = 0$  und  $U_d = 8$  aufspalten. Das Fermi-Niveau  $E_F$  liegt zwischen dem vollbesetzten O-Band und dem unbesetzten oberen Cu-Band. Die lokale Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\Psi_n(i)|^2$  der Einteilchen-Wellenfunktionen für die Cu-Plätze zeigt, dass die Cu- und Sauerstoff-Plätze nicht mischen. Da die Gesamtwahrscheinlichkeit für ein Teilchen 1 ist, ergibt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf einem O-Platz durch  $1 - |\Psi_n(i = \text{Cu})|^2$ . (**unten**) In der Lösung ohne Wechselwirkung gibt es keine Cu-Band-Aufspaltung. Das Hüpfen bewirkt eine Energie-Absenkung des Cu-dominierten *bindenden Bandes* (B) und eine Energie-Anhebung des halbgefüllten *antibindenden Bandes* (AB). Beide Bänder sind symmetrisch zueinander. Eine Linearkombination von Sauerstoff-Freiheitsgraden koppelt nicht an die Cu-Ladungen ( $|\Psi_n(i = \text{O})|^2 = 1$ ) und bildet eine  $\delta$ -Funktion in der Zustandsdichte (nichtbindendes Band).



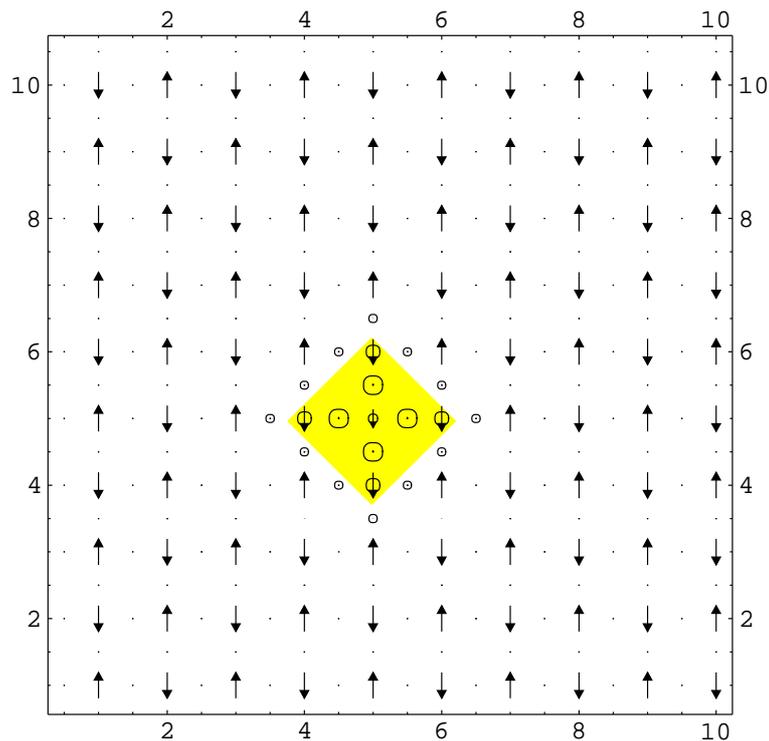
**Abbildung 5.5:** Mott-Hubbard-Isolator  $U_d < \Delta$ : **(oben)** Mit  $\Delta = \epsilon_p - \epsilon_d = 8 > 0$  liegen die Cu-Zustände trotz der Wechselwirkung von  $U_d = 7$  energetisch niedriger als die Sauerstoff-Zustände, die insgesamt ihre Energie durch Korrelationen deutlich absenken. Das nichtbindende Band (NB) liegt z.B. bei der Energie  $\epsilon \sim 3 \ll 8$ . Die repulsive Coulomb-Wechselwirkung der Cu-Zustände bewirkt eine *kleine* Aufspaltung des antibindenden Bandes. Die Aufspaltung wirkt sich auch auf die Cu-Zustände im bindenden Band aus. **(unten)** Liegt das Energie-Niveau der Cu-Plätze  $\epsilon_d$  über dem Niveau der Sauerstoff-Zustände  $\epsilon_p$ , so spalten die Cu-dominierten Zustände in ein unteres (LHB) und oberes (UHB) Hubbard-Band mit einer Energie-Lücke der Größe  $\sim U_d$  auf. Die Fermi-Energie liegt in der Mitte der Mott-Hubbard-Energielücke. Durch Hybridisierung mit den O-Zuständen tritt die in der Größe reduzierte Energielücke auch im bindenden Band auf.



**Abbildung 5.6:** Ladungstransfer-Isolator  $U_d > \Delta$ : **(oben)** Einteilchen-Energiespektrum  $E_n$  und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten  $|\Psi_n(i = \text{Cu})|^2$  der Hartree-Fock-Lösung mit den Standard-Parametern. Die Sauerstoff-Bänder liegen zwischen den Hubbard-Bänder, die zu ca. 80% aus Cu-Zuständen bestehen. Die Energielücke beträgt  $\sim 3$  eV. Symmetrisch ober- und unterhalb des nichtbindenden (NB) Sauerstoff-Bandes liegen Sauerstoff-dominierte Bänder, die aus den bindenden und antibindenden Band hervorgegangen sind. **(unten)** Durch das zusätzliche O-O-Hopping mit  $t_{pp} = 0.2$  bekommt das von den Cu-Freiheitsgraden entkoppelte nichtbindende Band einen dispersiven Charakter und kann seine Energie absenken (die gepunktete Kurve stellt das Spektrum aus der oberen Darstellung mit  $t_{pp} = 0$  dar). Die Energien sind aufsteigend aufgetragen, so dass Zustände aus den nichtbindenden Band z.T. mit Zuständen aus dem bindenden O-Band vermischen.

### 5.3.2 Polaron-Lösungen

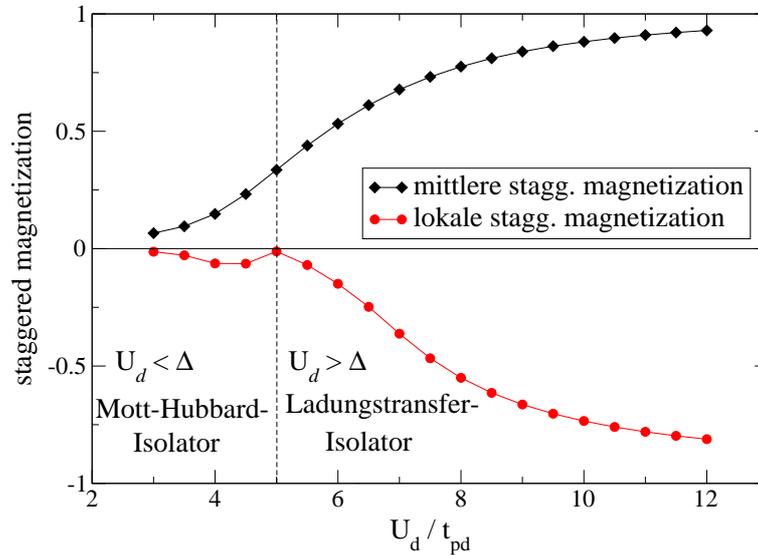
Das Polaron ist eine selbstkonsistente Lösung des mit einem Loch dotierten Dreiband-Modells, siehe Abb. 5.7. Die Lösung ist unabhängig von der Wahl der Randbedingungen, so dass wir periodische Randbedingungen für eine homogene Ladungsverteilung am Gitterrand bevorzugen. Im Zentrum ist ein reduzierter Cu-Spin ferromagnetisch zu seinen vier nächsten Cu-Nachbarn orientiert. Die Ladung verteilt sich hauptsächlich auf die umliegenden vier Sauerstoff-Plätze und die nächsten Cu-Plätze. Durch die Lochladung weisen die vier O-Plätze um das Zentrum ein kleines magnetisches Moment auf, das antiferromagnetisch mit den Cu-Nachbarn koppelt. Der antiferromagnetische Superaustausch der Cu–Cu-Bindungen wird durch das induzierte Moment am Sauerstoff durch einen direkten Austausch auf der Cu–O-Bindung ersetzt. Dadurch koppeln die Cu-Spins effektiv *ferromagnetisch* und bestätigen qualitativ das Bild von Aharony et al. [28]. Im Ladungstransfer-Regime  $U_d > \Delta$  ist das Polaron-Zentrum für alle Werte von  $U_d$  gegenüber dem antiferromagnetischen Hintergrund invertiert, siehe Abb. 5.8. Für zunehmendes  $U_d$  nimmt die kollineare Ausrichtung des Antiferromagneten zu, so dass sich im Grenzfall großer  $U_d$  das Hubbard-Modell auf das Heisenberg-Modell reduziert (vgl. Kapitel 2).



**Abbildung 5.7:** *Polaron-Lösung* in der Hartree-Fock-Näherung des Dreiband-Modells auf einem  $10 \times 10$ -Gitter mit periodischen Randbedingungen und den Standard-Parametern. Die Ladungsdichte des dotierten Loches verteilt sich hauptsächlich auf die vier Sauerstoffplätze um den Cu-Platz (5, 5). Die O-Spins weisen durch die Dotierung je ein kleines, zu den Cu-Nachbarn antiferromagnetisch orientiertes Moment auf. Der zentrale Cu-Spin koppelt dadurch effektiv ferromagnetisch an die vier Cu-Nachbarn und ist in seinem Wert leicht gegenüber dem mittleren Ordnungsparameter von 0.78 auf 0.55 reduziert.

Das Einteilchen-Energiespektrum ist in der Abb. 5.9 dargestellt. Aus dem besetzten, von Sauerstoff-Zuständen dominierten Band und dem unbesetzten Cu-artigen oberen Hubbard-Band wird je ein Zustand in die Energielücke induziert. Diese *anomale Übertragung von spektralem Gewicht*, das auch im Einband-Modell bei Dotierung auftrat, ist von Eskes *et al.* [90] als generelle Eigenschaft des korrelierten Systems analysiert worden. Aufgrund der Wechselwirkung sind von dem Entfernen eines Elektrons *zwei* Zustände betroffen. Der erste unbesetzte Zustand in der Lücke ist zu 75% auf Sauerstoff-Plätzen lokalisiert. Damit bestätigt die Lösung des Dreiband-Modells die Tatsache, dass dotierte Löcher vor allem O-Charakter besitzen [91]. Durch die Dotierung verschiebt sich die Fermi-Energie deutlich von ca. 5.8 eV auf 4.4 eV. Spektroskopie-Experimente an z.B. LSCO zeigen allerdings *keine* Verschiebung von  $E_F$  [92].

Um die Polaron-Lösung mit der von Zhang und Rice vorgeschlagenen Singulett-Lösung [72] zu identifizieren, betrachten wir den Grenzfall starker Wechselwirkung  $U_d/t_{pd} \gg 1$ , in dem das Resultat hergeleitet wurde. Die Lösung mit den Parametern  $U_d = 50$  und  $\Delta = 25$  ist in der Abb. 5.10 dargestellt. Die Ladung des dotierten Loches verteilt sich zu 80% auf die vier O-Nachbarn des Polaron-Zentrums und zu 0.5% auf den zentralen Cu-Platz. Das induzierte magnetische Moment auf den vier Sauerstoff-Plätzen beträgt insgesamt  $-0.785$ , gegenüber einem Moment des Cu-Zentrums von  $0.988$ . Aus der Konfiguration kann man schließen, dass in der HF-Näherung das Cu-Atom mit den vier O-Nachbarn ein *Zhang-Rice-Singulett* bildet (vgl. auch [84, 89]). Der antiferromagnetische Superaustausch der Cu-Spins wird hier durch einen direkten Cu-O-Austausch ersetzt, der die Cu- und O-Momente antiferromagnetisch koppelt. Mit der Ladungsverteilung auf einer Sauerstoff-Plaquette wird die Frustration minimiert.



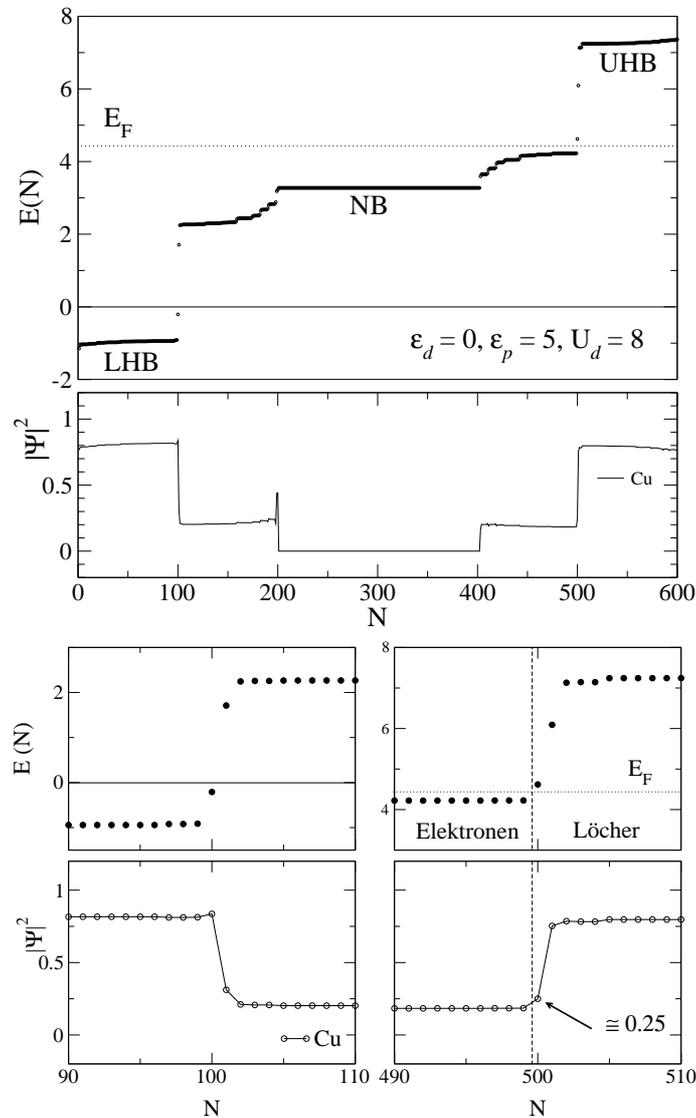
**Abbildung 5.8:** Der gemittelte Ordnungsparameter und die lokale “staggered magnetization” für den Cu-Platz (5,5) über der Wechselwirkung  $U_d$  bei konstanter Bandlücke  $\Delta = 5$  auf einem  $10 \times 10$ -Gitter mit periodischen Randbedingungen. Mit zunehmender Wechselwirkung  $U_d$  nimmt die kollineare Polarisation der Cu-Spins zu. Der Spin des Cu-Platzes (5,5) ist für *alle* Werte von  $U_d$  negativ und damit umgekehrt zur Néel-Ordnung, d.h. ferromagnetisch orientiert. Für  $U_d < 5$  handelt es sich um das Regime eines Mott-Hubbard-Isolators und für  $U_d > 5$  um das Ladungstransfer-Regime.

Wir diskutieren nun die *finite-size-Effekte* und den Einfluß der Randbedingungen. In der Abb. 5.11 ist die mittlere Energie pro Teilchen für offene und periodische Randbedingungen über der Gittergröße dargestellt. Wie zu erwarten ist, zeigt sich bei offenen Randbedingungen eine stärkere Abhängigkeit von der Gittergröße  $N$  als bei periodischen Randbedingungen, da bei offenen Randbedingungen die Einheitszellen am Rand nicht mehr erhalten bleiben. Für periodische Randbedingungen ist die Gitterabhängigkeit zu vernachlässigen. Die Schwankung der mittleren Energie bei offenen Randbedingungen beträgt für die Gittergrößen  $N = 10$  und  $N = 16$  ca. 1.4% und ist damit auch für Gittergrößen von  $N \geq 10$  vernachlässigbar. Finite-size-Effekte spielen daher unabhängig von den Randbedingungen keine Rolle für die verwendeten Gittergrößen.

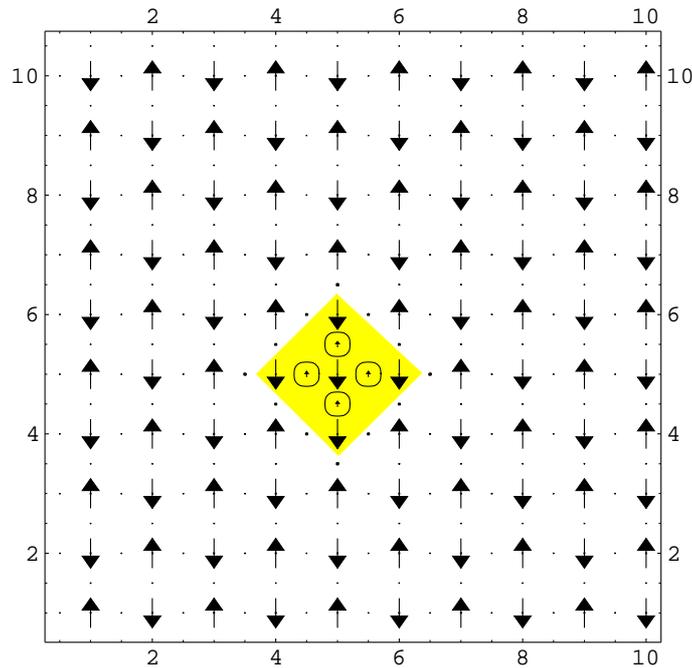
Im Abschnitt 4.3.2 haben wir die Polaron-Lösung im Einband-Modell diskutiert. Der Vergleich zu den Lösungen des Dreiband-Modells zeigt *keine qualitativen Unterschiede*.<sup>5</sup> Vergleicht man die staggered magnetization über der Wechselwirkungsstärke  $U_d$  bzw.  $U$  in Abb. 5.8 bzw. 4.6 quantitativ, so ergeben sich bei einer Wahl von  $U_d = 8$  im Dreiband-Modell annähernd gleiche Magnetisierungen im Bereich für  $U \simeq 5 \dots 8$  im Einband-Modell. Damit bestätigt sich, dass die im Einband-Modell verwendeten Parameterwerte dem physikalischen Regime im Dreiband-Modell entsprechen. Aber anders als erwartet, simuliert das Mott-Hubbard-Gap des Einband-Modells *nicht* die Ladungstransferlücke des Dreiband-Modells (die mit  $\epsilon \sim 2$  klein ist). Vielmehr liegt  $U$  in der Größenordnung von  $U_d$ , so dass die sauerstoffartigen Zustände nur einen sehr geringen Einfluß haben.

---

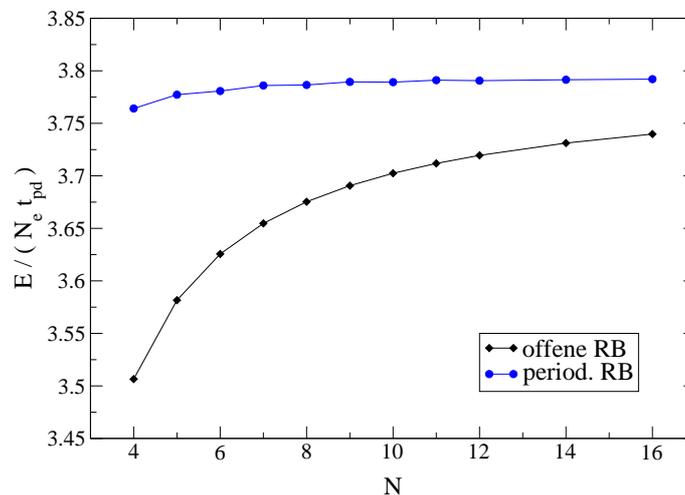
<sup>5</sup>Eine Bemerkung: Im Einband-Spektrum (siehe Abb. 4.8) ist der erste Einteilchen-Zustand diskret. Diesen Effekt sieht man auch in der Dreiband-Lösung mit offenen Randbedingungen (nicht dargestellt), nicht aber im Spektrum mit periodischen Randbedingungen (vgl. Abb. 5.9). Die Abspaltung des untersten Zustandes ist ein Effekt der offenen Randbedingungen, der daher keine physikalische Relevanz besitzt.



**Abbildung 5.9:** Einteilchen-Energiespektrum und die Besetzungswahrscheinlichkeit von Cu-Plätzen zur Polaron-Lösung in Abb. 5.7. Im unteren Teil sind Ausschnitte des Spektrums detaillierter dargestellt. Durch die Dotierung eines Loches wird aus dem besetzten, Sauerstoff-dominierten und dem unbesetzten, Cu-artigen Band je ein Zustände in die Energielücke induziert. Das gleiche passiert auch in der Bandlücke, die das untere Hubbard-Band und das Sauerstoff-dominierte Band trennt. Der erste Lochzustand  $n = 500$  ist zu 75% auf O-Plätzen lokalisiert.



**Abbildung 5.10:** *Zhang-Rice-Singulett:* Polaron-Lösung für ein Loch mit den Parametern  $U_d = 50$  und  $\Delta = 25$  auf einem  $10 \times 10$ -Gitter. Die Defektladung verteilt sich zu 80% auf die vier Sauerstoff-Plätze, die den ferromagnetisch gekoppelten Cu-Spin umgeben. Das durch die Lochladung verursachte magnetische Moment auf der Sauerstoff-Plaquette ( $-0.785$ ) um den Cu-Platz koppelt antiferromagnetisch mit den Cu-Spins ( $0.988$ ). Dadurch werden vier ferromagnetische Cu-Cu-Bindungen induziert.

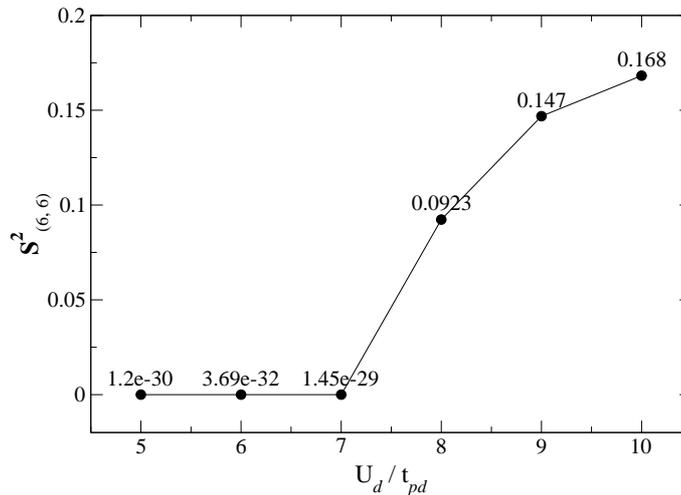


**Abbildung 5.11:** *Finite-size-Effekte:* Mittlere Energie pro Teilchen über der Gitterlänge  $N$  für *periodische* und *offene Randbedingungen* (RB) mit einem Loch. Während die mittlere Energie pro Teilchen mit periodischen RB nur sehr schwach von der Gittergröße abhängt, variiert die Energie bei offenen RB um ca. 7%. Anders als im Einband-Fall werden die Einheitszellen bei offenen RB am Rand asymmetrisch um Sauerstoff-Zustände reduziert (vgl. Abb. 5.1). Dadurch werden bei periodischen RB mehr Sauerstoff-Plätze berücksichtigt, so dass die mittlere Energie gegenüber den offenen RB erhöht ist.

### 5.3.3 Vortex-Losungen

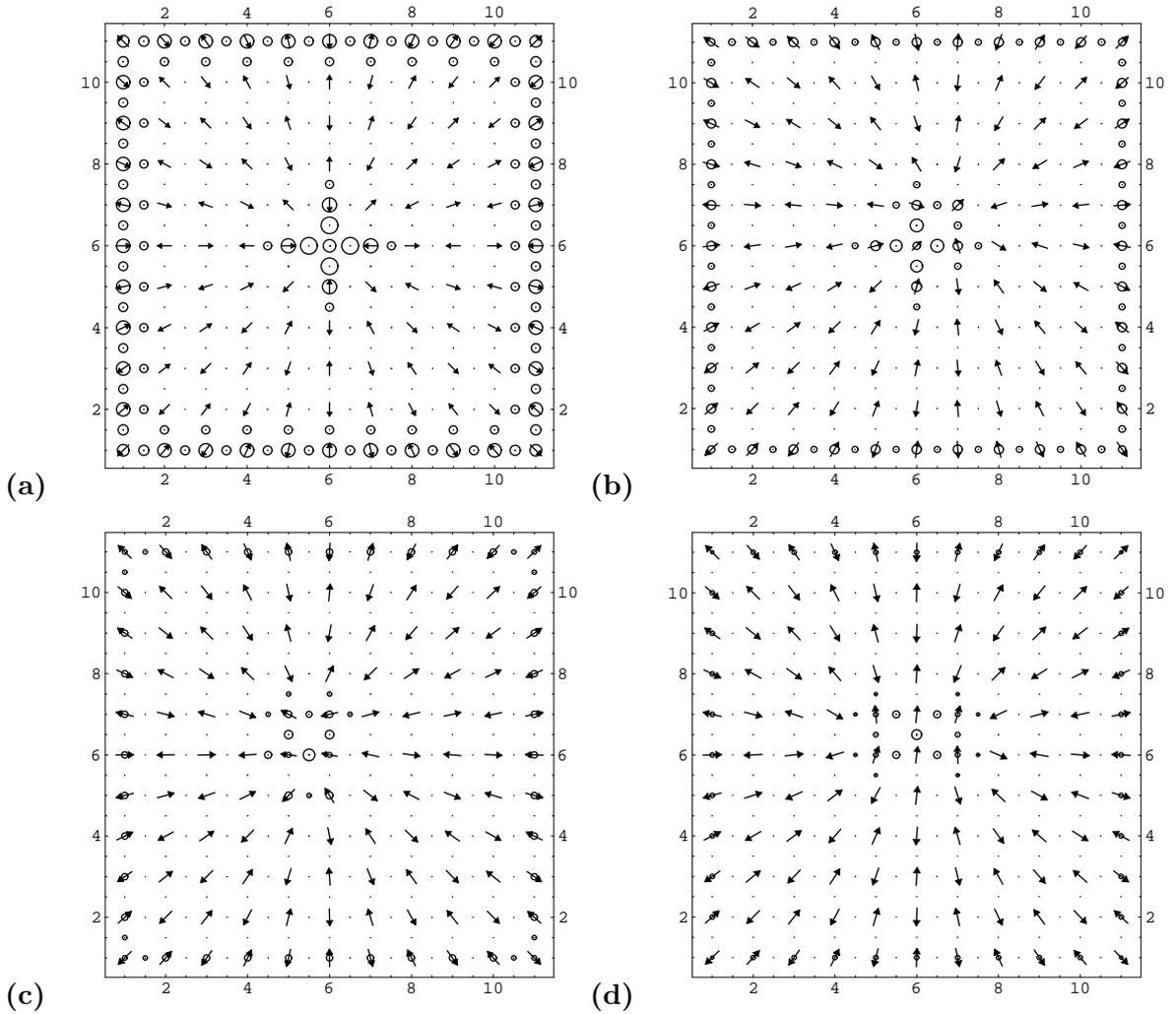
Eine alternative Losung mit einem dotierten Loch ist die metastabile Vortex-Losung, die auch im Dreiband-Hubbard-Modell existiert. In der Abb. 5.13 sind die selbstkonsistenten Losungen mit offenen Randbedingungen fur Wechselwirkungsstarken  $U_d = 7, \dots, 10$  dargestellt. Bei  $U_d = 7$  ergibt sich der plattzentrierte Vortex (und aquivalent Antivortex) als Losung, bei der sich die dotierte Ladung im Vortex-Kern und den nachsten O- und Cu-Platzen zu ungefahr gleichen Anteilen verteilt. Die Ladung am Rand ist ein Effekt der offenen Randbedingungen, die fur eine Losung mit nicht-verschwindender Windungszahl notwendig sind. Fur den Standard-Wert  $U_d = 8$  liegt der Vortex-Kern nicht mehr auf einem Gitterplatz, sondern wird auf eine Plaquette “gedruckt”, um die sich die Ladung inhomogen verteilt. Fur wachsende Werte von  $U_d$  koppeln zunehmend mehr Cu-Spins ferromagnetisch, so dass die Losungen sich qualitativ von einem plattzentrierten Vortex unterscheiden. Die Windungszahl von 1 der Anfangskonfiguration bleibt aber in den dargestellten Losungen erhalten, da die von der Iterationsprozedur der HF-Naherung produzierten Fluktuationen nicht fur eine Auflosung der Vortizitat ausreichen. Diese Losungen hangen ausschlielich von der Groe der Ladungstransferlucke  $E_{CT} \sim U_d - \Delta$  ab.

Es reicht daher eine Variation von  $U_d$  bei festem Bandabstand  $\Delta$ , um die Parameterabhangigkeit zu erfassen. In der Abb. 5.12 ist der bergang von einer Vortex-Losung zu einer anderen Losung durch das lokale Spin-Quadrat  $\mathbf{S}^2$  des Gitterplatzes (6, 6), auf dem in einer Vortex-Losung der Vortexkern lokalisiert ist, ber  $U_d$  dargestellt. Man erkennt den unterdruckten OP fur  $U_d \leq 7$ , was mit einer plattzentrierten Vortex-Losung zu identifizieren ist. Fur  $U_d \geq 8$  weist der Gitterplatz ein endliches magnetisches Moment auf, was auf eine andere Losung hindeutet. Dieses Verhalten hat sich auch im Einband-Modell (vgl. Kapitel 4.3.3) gezeigt, fur das auch ab einer Wechselwirkung  $U \gtrsim 8$  keine Vortex-Losungen mehr existierten.

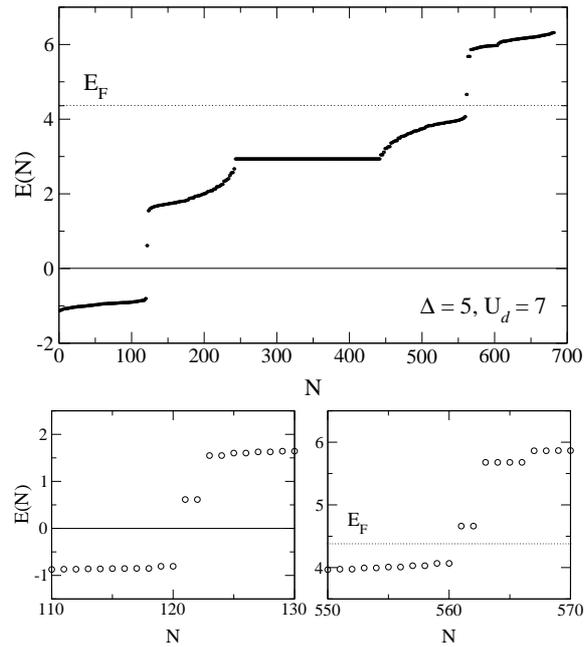


**Abbildung 5.12:** Das lokale Spin-Moment  $\mathbf{S}_{(6,6)}$  des Cu-Platzes (6, 6) ber der Wechselwirkung  $U_d$ . Fur  $U_d \leq 7$  ist der Ordnungsparameter auf diesem Platz vollstandig unterdruckt, da der plattzentrierte Vortex eine Losung ist. Fur  $U_d \geq 8$  bildet sich ein magnetisches Moment aus. Das ist mit einer qualitativen anderung der selbstkonsistenten Losung verbunden (vgl. Abb. 5.13).

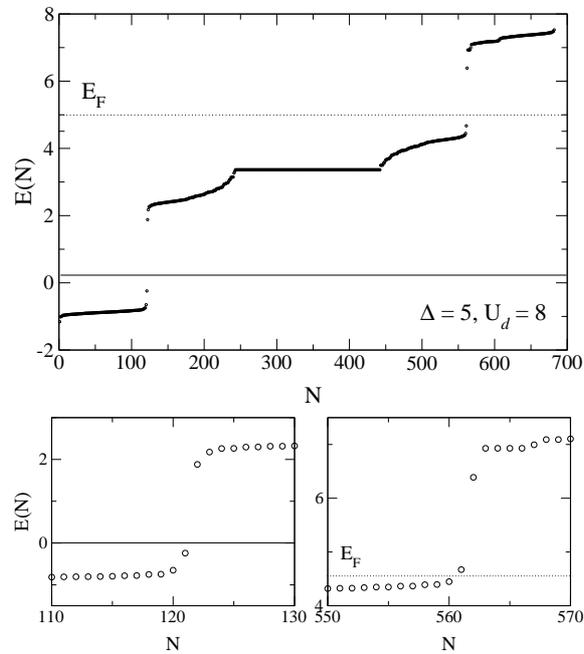
Das Energiespektrum zur Vortexlösung mit  $U_d = 7$  ist in der Abb. 5.14 zu sehen. Je ein Zustand aus dem Sauerstoff-artigen Band und aus dem unbesetzten oberen Hubbard-Band spaltet ab in die Energielücke. Die zwei diskreten Lochzustände sind *spinentartet*, da ein zusätzliches Elektron entweder mit Spin- $\uparrow$  oder mit Spin- $\downarrow$  in das System eingebracht werden kann. Diese Entartung zeigt sich auch im Einband-Spektrum (vgl. Abb. 4.11). Im Spektrum zur Lösung mit  $U_d = 8$  in Abb. 5.15 ist die Entartung aufgehoben.



**Abbildung 5.13:** Variation der Wechselwirkung  $U_d$  für eine Vortex-Antivortex-Startkonfiguration bei offenen Randbedingungen. (a)  $U_d = 7$ . Als selbstkonsistente Lösung ergibt sich ein plattformzentrierter Vortex. (b)  $U_d = 8$ . Verschiebung des Vortex-Kerns auf die Plaquette. Tendenz zu alternativer Spinpolaron-Konfiguration, aber die Windungszahl von 1 kann nicht aufgehört werden. (c)  $U_d = 9$ . Als alternative Konfiguration ergibt sich ein ferromagnetischer Cluster von 4 Cu-Plätzen. (d)  $U_d = 10$ . Ferromagnetische Kopplung von 6 Cu-Spins.



**Abbildung 5.14:** Einteilchen-Spektrum zu der plattzentrierten Vortex-Losung in Abb. 5.13(a) mit  $U_d = 7$  auf einem  $11 \times 11$ -Gitter. Aus dem besetzten und dem unbesetzten Band wird jeweils ein Zustand in die Energielucke abgespalten (siehe die unteren Detail-Ausschnitte aus dem Spektrum). Das Niveau ist aufgrund der Spin-Entartung zweifach entartet. Diese doppelte Entartung zeigt sich spiegelbildlich in der Lucke zwischen den besetzten Cu- und O-Zustanden.



**Abbildung 5.15:** Einteilchen-Spektrum fur die selbstkonsistente Losung aus Abb. 5.13 (b) mit  $U_d = 8$ . Mit der Aufhebung der Vortex-Losung ist das Verschwinden der Entartung der lokalisierten Zustande verbunden.

### 5.3.4 Lösungen mit zwei Löchern

Für Lösungen des mit zwei Löchern dotierten Systems benutzen wir bindungs- und plaquettenzentrierte Vortex-Antivortex-Paare als Startkonfigurationen (siehe die Abb. 4.19 und 4.20 im Abschnitt 4.3.4), um die Stabilität dieser Konfigurationen in der HF-Näherung des Dreiband-Hubbard-Modells zu untersuchen. Die selbstkonsistenten Lösungen sowohl mit offenen als auch mit periodischen Randbedingungen sind für die unterschiedlichen Startkonfigurationen in den Abb. 5.17 und 5.18 angegeben. Es zeigt sich – analog zum Einband-Modell – dass die Vortex-Spinstrukturen zu *Doppelpolaron-Lösungen* konvergieren. Das Vortex-Antivortex-Paar ist also auch im Dreiband-Modell *kein stabiler Grundzustand* in der Hartree-Fock-Näherung. Auch eine Variation der Parameter ändert qualitativ nichts an den Polaronen-Lösungen.

Die folgende Tabelle faßt die Anzahl an Iterationsschritten und die Grundzustandsenergien pro Teilchen der dargestellten Lösungen zusammen:

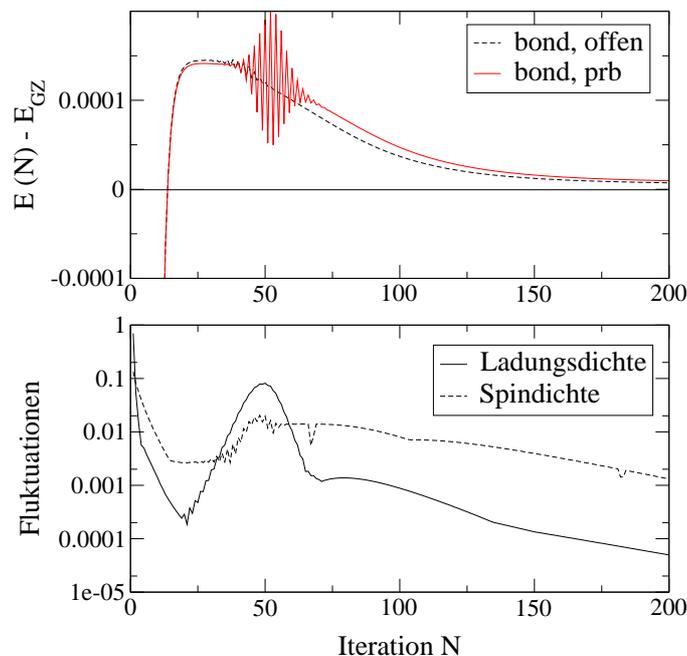
	Bindungszentriert		Plaquettenzentriert	
	offene RB	period. RB	offene RB	period. RB
$i$	6000	3073	9000	4313
$\epsilon$	1.0e-5	2.0e-5	1.4e-5	2.0e-5
$E_{GZ}$	3.72863	3.78911	3.72861	3.78911

Die Lösungen mit gleichen Randbedingungen haben praktisch identische Energien. Der Unterschied zwischen periodischen und offenen Randbedingungen ist auf die unterschiedliche Anzahl von Sauerstoff-Plätzen zurückzuführen. Selbstkonsistenz wurde bei periodischen Randbedingungen mit geringerer Schrittzahl bei vergleichbarer Genauigkeit erreicht. Die Lösungen zwischen offenen und periodischen Randbedingungen unterscheiden sich lediglich in einem Detail: In der Abb. 5.17 ist bei offenen Randbedingungen die diagonale Koordination der Lochladung der Startkonfiguration auch in der Doppelpolaronen-Lösung erhalten. Die Spins zeigen auf allen Polaronenplätzen in die gleiche Richtung. Bei periodischen Randbedingungen sind die Spins der zwei Polaronen entgegengesetzt ausgerichtet. Die Lösung ist mit einer geraden Anzahl von Gitterplätzen zu den Rändern koordiniert, um den periodischen Randbedingungen zu genügen.

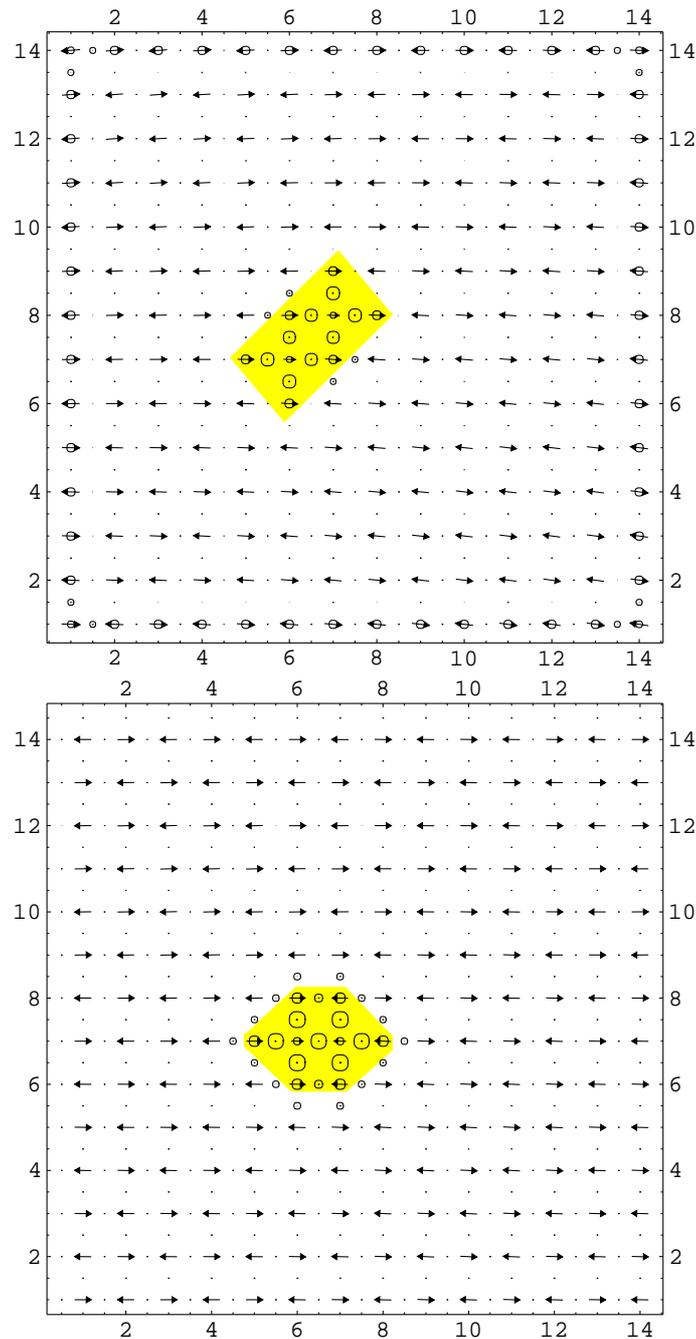
In der Abb. 5.19 ist das Spektren der Einteilchen-Energien für periodische Randbedingungen zu der Lösung in Abb. 5.18 dargestellt. Für jedes dotierte Loch wird ein Zustand aus dem besetzten und unbesetzten Band in die Energielücke abgespaltet. Die ersten zwei Lochzustände sind zu 80% auf Sauerstoff-Plätzen lokalisiert. Weiterhin sind sie *energieentartet*, da die beiden Gitterplätze (7, 6) und (7, 7) in der Darstellung 5.18 gleichwertige Möglichkeiten darstellen, ein weiteres Elektron dem System zuzuführen. In der Abb. 5.20 ist das Spektrum zu der Lösung mit offenen Randbedingungen in 5.18 angegeben. Die Energie-Entartung ist hier aufgehoben. Der erste Lochzustand (Zustand  $n = 923$ ) weist nur eine wenig höhere Energie zu den mit Elektronen besetzten Zuständen auf. Ein weiterer Unterschied liegt im Zustand  $n = 1$ , der aus dem unteren Hubbard-Band abgespaltet.

Um einen zumindest qualitativen Eindruck der Energien der Vortex-Antivortex-Startkonfiguration und der selbstkonsistente Lösung zu bekommen, ist in der Abb. 5.16 die Energiedifferenz der mittleren Teilchen-Energie der ersten 200 Iterationsschritte und der Grund-

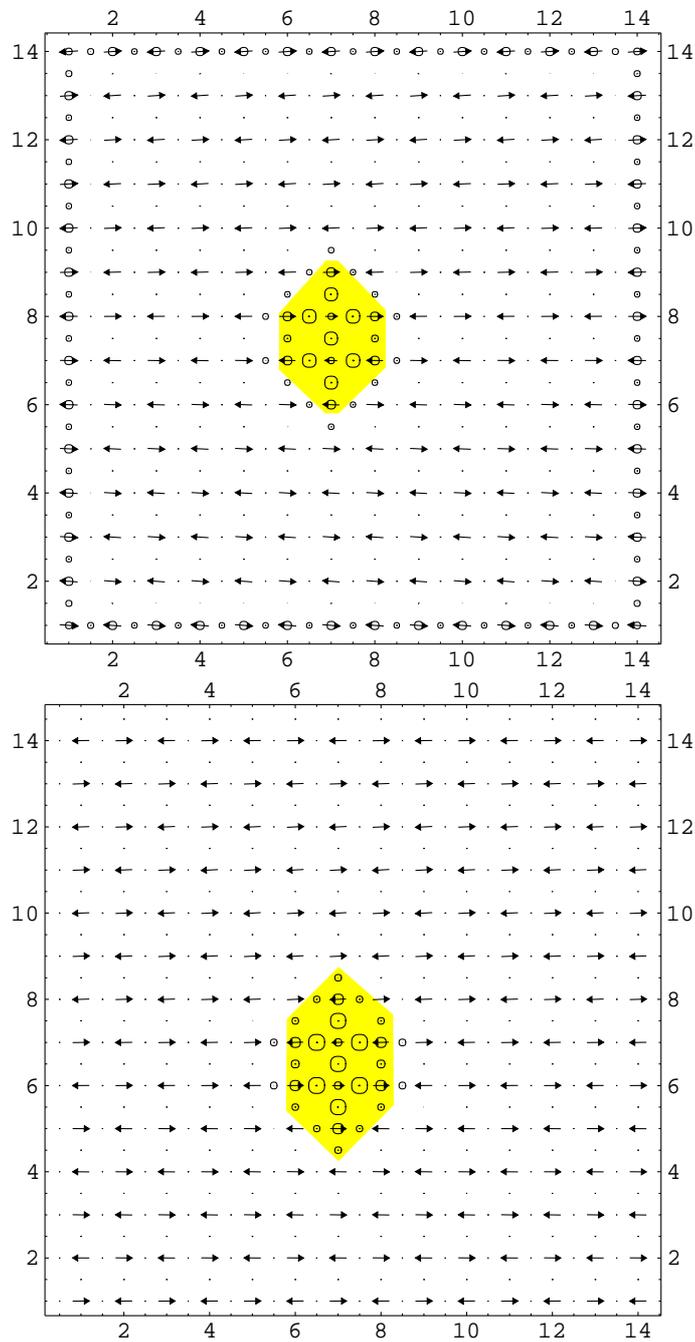
zustandsenergie der Doppelpolaron-Losung aufgetragen. Die Energiebetrage innerhalb der Iterationsprozedur besitzen *keine* physikalische Bedeutung. Sie weisen aber darauf hin, dass die Energiedifferenzen der verschiedenen Konfigurationen innerhalb der Iteration *sehr klein* sind. Die Energiedifferenz betragt maximal  $\sim 0.2$ . Insbesondere ist die Konfigurationsenergie innerhalb der ersten 10 Schritte *niedriger* als die Grundzustandsenergie der selbstkonsistenten Doppelpolaron-Losung. Die maximalen anderungen der Ladungs- und Spindichte-Felder, die im unteren Graphen dargestellt sind, nehmen innerhalb der ersten Iterationsschritte sehr schnell ab. Im weiteren Verlauf wachsen die Fluktuationen kurzfristig noch einmal an, wobei im Fall periodischer Randbedingungen die Energie oszilliert. Ein derartiges Verhalten ist typischerweise mit einer Konfigurationsanderung verbunden. Bei periodischen Randbedingungen mu sich die Losung z.B. kompatibel zu den Randbedingungen auf dem Gitter positionieren. Bereits nach ca. 100 Schritten ist die Energiedifferenz sehr klein und die Fluktuationen nehmen stetig ab. Obwohl die mittlere Energie sich sehr schnell der Grundzustandsenergie nahert, ist die Selbstkonsistenz-Schranke  $\epsilon$  in *allen* lokalen HF-Feldern erst nach einigen 1000 Schritte erreicht.



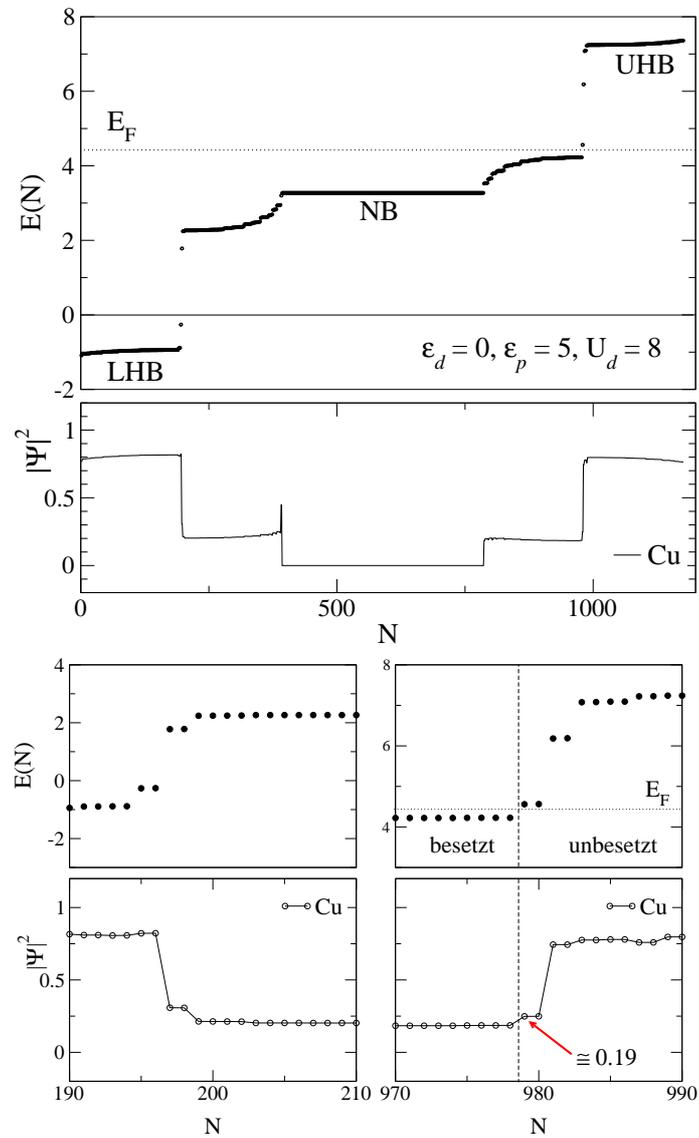
**Abbildung 5.16:** (oben) Darstellung der Energiedifferenz  $E_n - E_{GZ}$  der mittleren Teilchen-Energie innerhalb der ersten 200 Iterationsschritte, wobei  $E_{GZ}$  die mittlere Teilchenenergie der selbstkonsistenten Losung ist. Die maximale Differenz (nicht dargestellt) betragt  $\simeq 0.2$ . (unten) Maximale Fluktuation der Ladungs- und Spindichte der ersten 200 Iterationsschritte in halblogarithmischer Auftragung. Es ist nur der Verlauf bei periodischen Randbedingungen dargestellt. Man sieht, dass die Spindichte langsamer konvergiert als die Ladungsdichte. Der Anstieg bei  $n \sim 50$  ist mit einer Konfigurationsanderung verbunden.



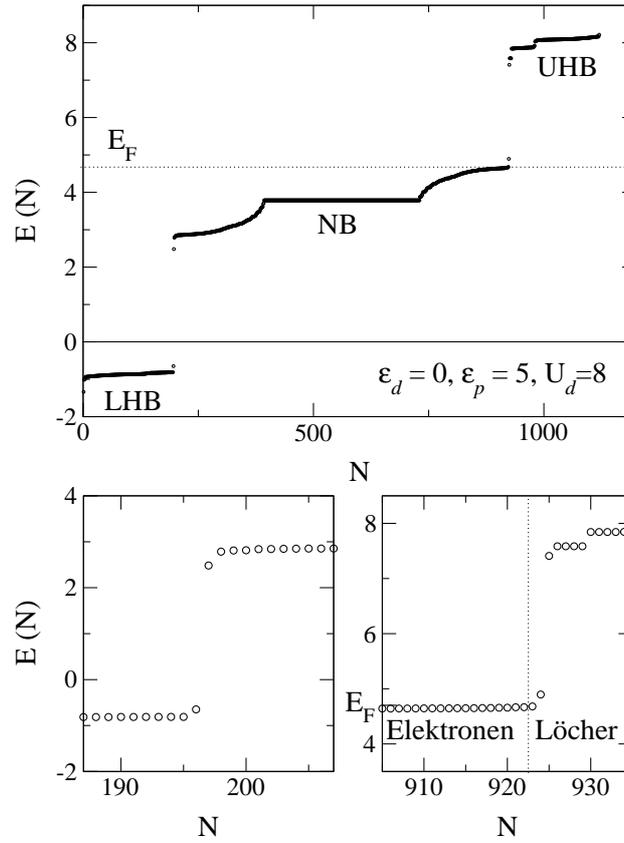
**Abbildung 5.17:** Selbstkonsistente Lösungen für zwei Löcher in der Hartree-Fock-Näherung mit den Standard-Parametern. Als Startkonfiguration ist jeweils ein *plaquettenzentriertes Vortex-Antivortex-Paar* benutzt worden (siehe Abb. 4.19 im Einband-Modell). **(oben)** Mit *offenen Randbedingungen* ergibt sich ein diagonal ausgerichtetes Doppelpolaron mit einer ferromagnetischen Kopplung aller Plätze. Die Verteilung der Ladung auf die Ränder in gleicher Größenordnung ist ein Effekt der Randbedingungen. **(unten)** Mit *periodischen Randbedingungen* ist das Vortex-Antivortex-Paar ebenfalls kein stabiler Grundzustand in der Hartree-Fock-Näherung. Die zwei Polaron-Zentren sind auf direkt benachbarten Cu-Plätzen lokalisiert. Die zwei Polaronen sind antiferromagnetisch zueinander orientiert. Die Anzahl der Plätze zum Rand ist in beiden Gitterrichtungen gradzahlig, um mit den periodischen Randbedingungen kompatibel zu sein.



**Abbildung 5.18:** Losungen, die aus einer Startkonfiguration mit einem *bondzentrierten Vortex-Antivortex-Paar* mit den Standard-Parametern hervorgehen. **(oben)** Mit *offenen Randbedingungen* verteilt sich die Ladung neben der Doppelpolaron-Konfiguration auf den Rand. **(unten)** Mit *periodischen Randbedingungen* verschwindet dieser Effekt, die Losungen sind aber nahezu identisch. In beiden Fallen sind die zwei Polaronen antiferromagnetisch zueinander orientiert.



**Abbildung 5.19:** Spektrum zur Lösung des bondzentrierten Paares mit *periodischen Randbedingungen* aus Abb. 5.18 (unten). Die Energie-Entartung der ersten beiden Lochzustände spiegelt die gleichartige Symmetrie der Gitterplätze (7,6) und (7,7) wider (vgl. Abb. 5.18). Diese Lochzustände sind zu ca. 80% auf Sauerstoff-Plätzen lokalisiert.



**Abbildung 5.20:** Spektrum zur Lösung des bondzentrierten Paares mit *offenen Randbedingungen* aus Abb. 5.18 (oben). Es sind die ersten 922 Zustände mit Elektronen besetzt. Die offenen Randbedingungen verursachen eine Abspaltung des Zustands  $n = 1$  aus dem unteren Hubbard-Band (LHB) und die Energie-Entartung der ersten zwei Lochzustände ist aufgehoben.

## 5.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel haben wir die generalisierte Hartree-Fock-Näherung für die Lösung des zweidimensionalen Dreiband-Hubbard-Modells angewandt. Die generellen Eigenschaften der Kuprate können vom Dreiband-Modell reproduziert werden und bestätigen damit die Gültigkeit der Methode. Die Ergebnisse sind auf Übereinstimmung zu andere Methoden (vgl. [84]). Im dotierungsfreien Fall ergibt sich ein Ladungstransfer-Isolator mit antiferromagnetischer Ordnung. Mit der Dotierung von Löchern erscheinen Zustände innerhalb der Energielücke, die hauptsächlich O-Charakter besitzen.

Wie bereits im Einband-Fall ist das Polaron die selbstkonsistente Lösung des lochdotierten Systems. Für starke Wechselwirkung  $U_d$  haben wir das *Zhang-Rice-Singulett* als den Grenzfall des magnetischen Polarons identifiziert. Eine Vortex-Spinkonfiguration ist ebenfalls eine Lösung des Dreiband-Systems bei offenen Randbedingungen, die im relevanten Parameterbereich aber kritisch von  $U_d$  abhängt.

Die Stabilität eines Vortex-Antivortex-Paares im Dreiband-Modell wurde in der Literatur bisher noch nicht explizit untersucht. Als Ergebnis ergibt sich wie bereits im Einband-Modell eine Doppelpolaron-Lösung, so dass die explizite Berücksichtigung der Sauerstoff-Zustände und die Asymmetrie von Löcher- und Elektronendotierung – wider Erwarten – *keinen* Einfluß besitzt. Der Vergleich der Resultate aus dem Einband- und Dreiband-Modell ergibt vielmehr ein konsistentes Bild: zwischen den Lösungen gibt es *keine qualitativen Unterschiede*. Die Beschränkung auf das einfachere Einband-Modell ist demnach gerechtfertigt, zumal das Bild von Zhang und Rice bestätigt werden konnte.

Obwohl sich die generelle Hartree-Fock-Näherung als nützliches Werkzeug zur Untersuchung der elektronischen Struktur und der lokalen Ladungs- und Spindichte herausgestellt hat, muß man sie als einfachste Molekularfeld-Näherung des Vielteilchenproblems kritisch diskutieren. Sie liefert nur eine obere Schranke für die wahre Grunzustandsenergie und vernachlässigt die eventuelle Bedeutung von Quantenfluktuationen. Da die Energiedifferenz von Vortex-Antivortex-Startkonfiguration und Doppelpolaron-Lösung sehr klein ist, beschäftige ich mich im nächsten Kapitel mit einer Mittleren-Feld-Näherung des Hubbard-Modells in der *slave-boson*-Darstellung, die über den Hartree-Fock-Ansatz hinausgeht.



## Kapitel 6

# Die slave-boson-Näherung für das Hubbard-Modell

In den beiden vorherigen Kapiteln stellte sich heraus, dass ein Vortex-Antivortex-Paar in der Hartree-Fock-Näherung sowohl für das Einband- als auch für das Dreiband-Hubbard-Modell kein Grundzustand bei  $T = 0$  ist. Seibold [26] findet aber mit einer Näherung für das Einband-Modell, die über den Hartree-Fock-Ansatz hinaus geht, einen Vortex-Antivortex-Grundzustand. Daher muß man davon ausgehen, dass die Hartree-Fock-Näherung für dieses Vielteilchen-Problem unzureichend ist.

In diesem Kapitel werde ich die Methode von Seibold für das Einband-Hubbard-Modell nachvollziehen und auf das Dreiband-Modell anwenden. Es wird sich zeigen, dass für die numerische Lösung ein Hartree-Fock-Ansatz als Startkonfiguration günstig ist und damit die in Kapitel 4 diskutierte HF-Methode eine notwendige Voraussetzung ist. Die zu diskutierende Näherungs-Methode für  $T = 0$  geht von der *slave-boson*-Darstellung des Hubbard-Modells aus, in der zusätzliche bosonische Freiheitsgrade eingeführt werden.

Zunächst stellen wir die Idee der slave-boson- bzw. Hilfsbosonen-Darstellung vor, leiten anschließend die Darstellungen des Einband- und Dreiband-Hamiltonians her und nähern die Ausdrücke im Fall  $T = 0$ . Die numerische Lösung konnte nicht mehr im zeitlichen Rahmen dieser Arbeit implementiert werden, so dass es bei einer Vorstellung des Verfahrens bleibt. Im letzten Abschnitt fasse ich die Ergebnisse meiner Diplomarbeit zusammen und schließe mit einem Ausblick.

### 6.1 Definition der Hilfsbosonen für atomare Zustände

Die Fermionen im Einband-Hubbard-Modell können in physikalisch sehr unterschiedlichen Zuständen an einem Gitterplatz vorkommen: als einfach, doppelt oder nicht besetztes Orbital. Ein einfach besetzter Platz ist durch einen Zustand *mit Spin*  $\uparrow$  bzw.  $\downarrow$  bzgl. einer Quantisierungsachse repräsentiert, während doppelt bzw. nicht besetzte Plätze *keinen Spin* tragen. Durch die Einführung von *Hilfsbosonen* bzw. *slave-bosons* und *Hilfsfermionen* kann das Hubbard-Modell so formuliert werden, dass die Zustände mit und ohne Spin separat behandelt werden.

Um die im Hubbard-Modell vorhandenen Spin- und Ladungsfreiheitsgrade gleichermaßen zu behandeln, führten Kotliar und Ruckenstein [93] für jeden der vier möglichen Zustände auf einem Gitterplatz ein Hilfsboson und für die einfach besetzten Zustände zusätzlich ein Spindublett von Fermi-Feldern ein. Damit wird die onsite Wechselwirkung  $U$  zwischen Fermionen mit unterschiedlichen Spin-Quantenzahlen linear. Auf der anderen Seite nimmt man einen komplizierteren Hopping-Term und weiterhin zusätzliche Nebenbedingungen in Kauf.

Wir stellen die vier möglichen atomaren Ladungskonfigurationen auf einem Gitterplatz durch Bosonen und Fermionen nach folgender Definition dar:

$$|0i\rangle = e_i^\dagger |\text{vac}\rangle \quad (6.1)$$

$$|\sigma i\rangle = \sum_{\sigma'} p_{i\sigma\sigma'}^\dagger f_{i\sigma'}^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow \quad (6.2)$$

$$|\uparrow\downarrow i\rangle = d_i^\dagger f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}^\dagger |\text{vac}\rangle. \quad (6.3)$$

Hier bedeuten  $|0i\rangle$ ,  $|\sigma i\rangle$  und  $|\uparrow\downarrow i\rangle$  die atomaren Einteilchen-Zustände für einen leeren, einen einfach besetzten und einen doppelt besetzten Gitterplatz  $i$ . Entsprechend sind  $e_i^\dagger$ ,  $p_{i\sigma\sigma'}^\dagger$  und  $d_i^\dagger$  *Bosonen-Operatoren*, die gemeinsam mit den Fermionen-Operatoren  $f_{i\sigma'}^\dagger$  einen leeren, einfach besetzten oder einen doppelt besetzten Zustand aus einem fiktiven Vakuumzustand<sup>1</sup> erzeugen. Die vorgenommene Erweiterung des Hilbertraumes muß durch geeignete Bedingungen wieder auf den physikalischen Zustandsraum eingeschränkt werden (s.u.). Insbesondere müssen bei der Abbildung die Antivertauschungsrelationen der Fermionen erhalten bleiben (s.u.).

Wir haben in (6.1) die *spinrotationsinvariante Darstellung* von Lie, Wölfle und Hirschfeld [94] verwendet. Da sowohl die  $|\sigma\rangle$ -Zustände als auch die  $f_{i\sigma'}^\dagger$ -Operatoren wie Spinoren transformieren, muß auch im Bosonenraum auf eine Spin-Quantisierungsachse verzichtet werden. Durch die zwei weiteren Freiheitsgrade werden die lokalen Bose-Felder für einfach besetzte Plätze durch  $2 \times 2$ -Matrizen  $\underline{p}_i$  mit den Matrixelementen  $p_{i\sigma\sigma'}$  dargestellt. Dies erlaubt uns die Untersuchung auch von nicht-kolinearen Spinstrukturen.

Das in diesen Zuständen auftretende Operatorenprodukt  $p^\dagger f^\dagger$  ist dabei so zu interpretieren, dass es ein zusammengesetztes Objekt mit Spin  $1/2$  erzeugt. Da das Fermion  $f^\dagger$  aber bereits einen Spin von  $1/2$  trägt, kann das  $p$ -Boson nur mit den möglichen Spins  $S = 0$  oder  $S = 1$  an  $f^\dagger$  koppeln. Entsprechend definieren wir für jeden Ort  $i$  ein skalares Feld  $p_0$  ( $S = 0$ ) und ein Vektorfeld  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$  ( $S = 1$ ), deren Komponenten die bosonischen Vertauschungsrelationen  $[p_{i\alpha}, p_{j\beta}^\dagger] = 1/2 \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}$  erfüllen. Damit hat die Matrix  $\underline{p}^\dagger$  die Darstellung (vgl. [98])

$$\underline{p}^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} p_0^\dagger + p_z^\dagger & p_x^\dagger - ip_y^\dagger \\ p_x^\dagger + ip_y^\dagger & p_0^\dagger - p_z^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^3 p_\mu^\dagger \underline{\tau}_\mu, \quad (6.4)$$

wobei im zweiten Schritt nach den Pauli-Matrizen  $\underline{\tau}$  und der Einheitsmatrix  $\underline{\tau}_0$  entwickelt wurde. Die hermitesch konjugierte Matrix ist  $\underline{p} = \frac{1}{2} \sum p_\mu \underline{\tau}_\mu$ .

<sup>1</sup>Der fermionische Zustand  $|0\rangle$  wird durch die Anwendung eines Bose-Operators auf einen *neuen* Vakuumzustand  $|\text{vac}\rangle$  erzeugt, so dass der *leere* Zustand  $|0\rangle$  in der neuen Darstellung erst aus einem "richtigen" Vakuum erzeugt werden muß.

Wir betrachten noch das Transformations-Verhalten von  $\underline{p}$  unter Zeitumkehr:  $\hat{T}p_0\hat{T}^{-1} = p_0$  und  $\hat{T}\underline{p}\hat{T}^{-1} = -\underline{p}$ . Wir führen deshalb das Feld  $\tilde{\underline{p}}$  mit zeitinvertiertem (umgekehrten) Spin ein,

$$\tilde{\underline{p}} = \hat{T}\underline{p}\hat{T}^{-1} = \frac{1}{2}(p_0\underline{\tau}_0 - \underline{p} \cdot \underline{\tau}). \quad (6.5)$$

Da der Hilbertraum durch die Einführung der bosonischen Freiheitsgrade künstlich erweitert wurde, müssen unphysikalische Zustände durch eine Einschränkung des Hilbertraums beseitigt werden. In diesem physikalischen Unterraum bleiben die Matrixelemente des ursprünglichen Hamiltonians unverändert. Da jedes Bose-Feld eingeführt wird, um einen atomaren Zustand darzustellen und da es nur *einen* Ladungszustand pro Platz gibt, genügen die Bosonen der *lokalen Vollständigkeitsbedingung*,

$$Q_i \equiv e_i^\dagger e_i + \sum_{\mu=0}^3 p_\mu^\dagger p_\mu + d_i^\dagger d_i - 1 = 0. \quad (6.6)$$

$$(6.7)$$

Eine weitere Bedingung verknüpft die Matrixelemente der Pseudo-Fermionen  $f_\sigma^\dagger f_{\sigma'}$  mit denen der Bosonen  $\underline{p}^\dagger \underline{p}$  und  $d^\dagger d$  derart, dass die Erwartungswerte gleich sind,

$$f_\sigma^\dagger f_{\sigma'} = 2 \sum_{\sigma_1} p_{\sigma_1 \sigma}^\dagger p_{\sigma' \sigma_1} + \delta_{\sigma \sigma'} d^\dagger d. \quad (6.8)$$

Ausgedrückt durch die  $p_\mu$  ergeben sich daraus die beiden lokalen Bedingungen

$$P_{i0} \equiv p_{i0}^\dagger p_{i0} + \underline{p}_i^\dagger \cdot \underline{p}_i + 2d_i^\dagger d_i - \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = 0 \quad (6.9)$$

$$\underline{P}_i \equiv p_{i0}^\dagger \underline{p}_i + \underline{p}_i^\dagger p_{i0} + i(\underline{p}_i^\dagger \times \underline{p}_i) - \sum_{\sigma \sigma'} f_{i\sigma}^\dagger \underline{\tau}_{\sigma \sigma'} f_{i\sigma'} = 0. \quad (6.10)$$

Sie stellen die *Ladungs-* und *Spin-Identität* von Bosonen und Pseudo-Fermionen dar.

Die Vernichtung eines Fermions entspricht in der neuen Darstellung entweder der Vernichtung eines doppelt besetzten Zustandes und der simultanen Erzeugung eines einfach besetzten Zustandes mit entgegengesetztem Spin *oder* der Vernichtung eines einfach besetzten Zustandes bei Erzeugung eines leeren Zustandes. Die ursprünglichen Fermionen lassen sich also in den neuen Feldern durch die Transformationen ausdrücken,

$$c_{i\sigma} = \sum_{\sigma'} f_{i\sigma'} z_{i\sigma'\sigma} \quad (6.11)$$

$$c_{i\sigma}^\dagger = \sum_{\sigma'} z_{i\sigma\sigma'}^\dagger f_{i\sigma'}^\dagger, \quad (6.12)$$

wobei zunächst  $\underline{z}_i = e_i^\dagger \underline{p}_i + \tilde{\underline{p}}_i^\dagger d_i$  mit dem in (6.5) eingeführten zeitinvertiertem Boson  $\tilde{\underline{p}}$  bedeutet.

Kotliar und Ruckenstein [93] haben darauf hingewiesen, dass die Darstellung eines Operators durch Hilfsfelder nicht eindeutig ist. Sie nutzen diese Freiheit durch die Einführung eines weiteren Operators aus, dessen Eigenwerte im physikalischen Unterraum gleich 1 sind

und damit die Matrixelemente nicht andert. Man kann das korrekte Verhalten der neuen Operatoren in einer Sattelpunktsnaherung im Grenzfall  $U \rightarrow 0$  erreichen, indem man die  $\underline{z}$  durch die folgenden Ausdrucke ersetzt,

$$\underline{z}_i = \underline{L}_i e_i^\dagger \underline{p}_i \underline{R}_i + \underline{L}_i \tilde{p}_i^\dagger d_i \underline{R}_i \quad (6.13)$$

$$\underline{z}_i^\dagger = \underline{R}_i^\dagger \underline{p}_i^\dagger e_i \underline{L}_i^\dagger + \underline{R}_i^\dagger d_i^\dagger \tilde{p}_i \underline{L}_i^\dagger. \quad (6.14)$$

Dabei sind die Matrizen  $\underline{L}$  und  $\underline{R}$  in der diagonalen Darstellung definiert durch

$$\underline{L}_i = \left[ (1 - d_i^\dagger d_i) \tau_0 - \underline{p}_i^\dagger \underline{p}_i \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (6.15)$$

$$\underline{R}_i = \left[ (1 - e_i^\dagger e_i) \tau_0 - \tilde{p}_i^\dagger \tilde{p}_i \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (6.16)$$

Damit ist die Hilfsbosonen-Theorie im Prinzip vollstandig definiert. In dem folgenden Abschnitt bilden wir das Hubbard-Modell auf die neue Darstellung ab. Fur die Berechnung physikalischer Groen vergleiche Ref. [98].

## 6.2 Hamiltonian in der slave-boson-Darstellung

Wir transformieren das Einband-Hubbard-Modell mit Hilfe von (6.11) auf den effektiven Hamiltonian

$$\mathcal{H}_{\text{SB}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} z_{i\sigma_1}^\dagger f_{i\sigma_1}^\dagger f_{j\sigma_2} z_{j\sigma_2} \sigma + U \sum_i d_i^\dagger d_i. \quad (6.17)$$

Die direkte Fermionen-Wechselwirkung  $U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$  von zwei Fermionen in unterschiedlichen Spin-zustanden ist durch die Dichte des Bosons  $d_i$  ersetzt worden, das die Doppelbesetzung eines Platzes  $i$  reprasentiert. Dafur enthalt der Hopping-Term nun eine Dynamik von Bosonen *und* Fermionen. Die Summe uber  $\langle i, j \rangle$  bedeutet, dass jeder Platz  $i$  mit seinen vier nachsten Nachbarn  $j$  auszuwerten ist.

Analog ersetzt man im Dreiband-Modell die Wechselwirkung der Cu-Fermionen durch Hilfsbosonen und -fermionen. Es gibt einen Term fur die Platzenergie  $\epsilon_d$  mit einer lokalen Kopplung von zwei bosonischen Matrizen  $\underline{z}$ . Im Hopping-Term zwischen Cu und O tritt im Unterschied zum Einband-Modell lediglich ein einzelnes  $\underline{z}$  auf. Es ergibt sich der transformierte Hamiltonian des Dreiband-Hubbard-Modells:

$$\mathcal{H}_{\text{SB}} = \epsilon_d \sum_{i, \sigma_1 \sigma_2} z_{i\sigma_1}^\dagger f_{i\sigma_1}^\dagger f_{i\sigma_2} z_{i\sigma_2} \sigma + \epsilon_p \sum_{l, \sigma, \alpha} c_{l\sigma\alpha}^\dagger c_{l\sigma\alpha} \quad (6.18)$$

$$+ t \sum_{\langle i,l \rangle, \sigma, \alpha} g_{il}^\alpha c_{l\sigma\alpha}^\dagger z_{i\sigma\sigma'} f_{i\sigma'} + U \sum_i d_i^\dagger d_i. \quad (6.19)$$

Das gekoppelte System von zwei Fermi-Feldern  $\{f_{i\uparrow}, f_{i\downarrow}\}$  und den sechs Bose-Feldern  $\{e, d, p_\mu\}$  sowieweitere Lagrange-Multiplikatoren fur die lokalen Nebenbedingungen hat zunachst eine komplexere Struktur als der ursprunglich rein fermionische Hubbard-Hamiltonian. In dieser Form ist der bosonisierte Ausdruck noch exakt. Der Vorteil der Vielzahl der Felder liegt in der Moglichkeit, auf dem Niveau einer Mittleren-Feld-Naherung uber mehr Variationsparameter als im einfachen Hartree-Fock-Ansatz zu verfugen.

### 6.3 Das Energiefunktional des Hilfsbosonen-Hamiltonians

Im Funktionalintegral-Formalismus ersetzt man die Fermi-Operatoren des effektiven Hamiltonians  $\mathcal{H}_{\text{SB}}$  durch antikommutierende Grassmann-Felder und die Bose-Operatoren durch kommutierende komplexe Variablen. In der Sattelpunktlösung fixiert man die Bose-Felder und integriert die zuvor linearisierten Fermionen aus. Da wir aber inhomogene Lösungen des lochdotierten Modells studieren möchten, können wir keine einfache Form des Sattelpunktes annehmen. Für die *numerische Lösung* des Problems folgen wir einer Näherungs-Methode auf dem Niveau des bosonisierten Hamiltonians, die von Seibold [26] bereits auf das Einband-Hubbard-Modell angewendet wurde.

Für die Behandlung der Fermi-Felder transformieren wir die Fermi-Operatoren in das System der Eigenzustände  $a_n$ ,

$$f_{i\sigma} = \sum_n \Phi_n(i, \sigma) a_n. \quad (6.20)$$

Die Entwicklungskoeffizienten  $\Phi_n(i, \sigma)$  stellen im Ortsraum die *Einteilchen-Wellenfunktionen* bzw. *elektronischen Amplituden* dar. Damit diese Transformation den Unterraum der besetzten Zustände diagonalisiert, müssen wir als zusätzliche Nebenbedingung die Unitarität der Transformation fordern,

$$\sum_{i, \sigma} \Phi_n^*(i, \sigma) \Phi_m(i, \sigma) = \delta_{nm}. \quad (6.21)$$

Ersetzen wir die Fermionen  $a_n$  durch Grassmann-Felder und beschränken uns auf den Grenzfall  $T = 0$ , so sind nur die untersten  $N_e$  Fermionen-Eigenzustände besetzt und die fermionischen Besetzungszahlen werden trivialerweise 1 bzw. 0. Die elektronischen Amplituden  $\Phi_n(i, \sigma)$  dienen als (komplexe) Entwicklungsparameter für die Minimierung der Grundzustandsenergie. Die Variation der Energie nach den  $\Phi_n(i, \sigma)$  unter der Nebenbedingung der Orthogonalität (6.21) sichert die Diagonalität im Unterraum der *besetzten Zustände*.<sup>2</sup> Die Bose-Operatoren werden in dieser Näherung zu *fixierten*, komplexen Feldern, die ebenfalls als Entwicklungsparameter in die Variation eingehen. Durch dieses Vorgehen erhalten wir ein *genährtes* Funktional der Grundzustandsenergie für  $T = 0$  für das Einband-Hubbard-Modell,

$$E_{\text{tot}} = -t \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{\sigma, \sigma_1, \sigma_2} z_{i\sigma\sigma_1}^\dagger z_{j\sigma_2\sigma} \sum_{n=1}^{N_e} \Phi_n^*(i, \sigma_1) \Phi_n(j, \sigma_2) + U \sum_i |d_i|^2. \quad (6.24)$$

Der Ausdruck ist nach den (zunächst komplexen) Feldern  $\{\Phi_n(i, \sigma), e_i, p_{i, \sigma' \sigma}, d_i\}$  zu minimieren, wobei die Nebenbedingungen (6.6), (6.9) und (6.21) erfüllt sein müssen. Die Summe

<sup>2</sup>Als Beispiel diene ein "tight-binding"-Modell mit der Energie  $E = \sum_{ij, n} t_{ij} \Phi_n^*(i, \sigma) \Phi_n(j, \sigma)$ . Die Variation mit der Berücksichtigung der Nebenbedingung *Orthogonalität* durch die Lagrange-Parameter  $\epsilon_n$  lautet

$$\delta \left( E - \sum_n \epsilon_n \{ \Phi_n^*(i\sigma) \Phi_n(i, \sigma) - 1 \} \right) \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.22)$$

Die Ausführung der Variation nach  $\Phi_n^*(i, \sigma)$  ergibt

$$\sum_j t_{ij} \Phi_n(j, \sigma) = \epsilon_n \Phi_n(i, \sigma), \quad (6.23)$$

d.h. die Eigenwertgleichung für die Wellenfunktionen  $\Phi_n(i, \sigma)$  der  $N_e$  besetzten Zustände.

uber die nachsten Nachbarn  $\langle i, j \rangle$  berucktigt in diesem Fall jede Bindung doppelt. Der entsprechende Ausdruck fur das Dreiband-Hubbard-Modell ergibt sich aus (6.18) zu

$$E_{\text{tot}} = \epsilon_d \sum_{n,i,\sigma\sigma_1\sigma_2} z_{i\sigma\sigma_1}^\dagger z_{i\sigma_2\sigma} \Phi_n^*(i, \sigma_1) \Phi_n(i, \sigma_2) \quad (6.25)$$

$$+ \epsilon_p \sum_{n,l,\sigma,\alpha} \Phi_n^*(l, \sigma, \alpha) \Phi_n(l, \sigma, \alpha) + U_d \sum_i |d_i|^2 \quad (6.26)$$

$$- t_{pd} \sum_{\langle il \rangle, n, \sigma, \sigma', \alpha} g_{il}^\alpha \left( \Phi_n^*(l, \sigma, \alpha) z_{i\sigma\sigma'} \Phi_n(i, \sigma') + \Phi_n^*(i, \sigma) z_{i\sigma\sigma'}^\dagger \Phi_n(l, \sigma', \alpha) \right). \quad (6.27)$$

Fur jeden Cu-Platz  $i$  sind die *vier* nachsten O-Zustande zu beruckichtigen. Der Ortsindex  $i$  bezeichnet elektronische  $d_{x^2-y^2}$ -Zustande und der Index  $l$  die zwei  $p$ -Orbitale der Sauerstoff-Elektronen ( $\alpha = p_x, p_y$ ). Als weitere Parameter kommen im Dreiband-Modell die Sauerstoff-Wellenfunktionen hinzu.

Da die lokalen Bedingungen (6.6) und (6.9) mit dem Hamiltonian vertauschen, sind sie Erhaltungsgroen, die mit einer Symmetrietransformation des Systems in Verbindung stehen. Die Bose-Felder besitzen daher eine *lokale Eichinvarianz* als zusatzliche Freiheitsgrade [96]:

$$e_i \rightarrow e^{-i\theta_i} e_i \quad (6.28)$$

$$\underline{p}_i \rightarrow e^{-i\chi_i} \underline{p}_i \quad (6.29)$$

$$d_i \rightarrow e^{i(\theta_i - 2\chi_{i0})} d_i \quad (6.30)$$

wobei  $\theta_i$  und  $\underline{\chi}_i = \chi_{i0} \underline{\tau}_0 + \chi_i \mathbf{n}_i \cdot \underline{\boldsymbol{\tau}}$  ( $\mathbf{n}_i^2 = 1$ ) die Phasen der Felder  $e_i$  und  $\underline{p}_i$  darstellen, die deshalb als *reelle* Felder gewahlt werden konnen (*radiale Eichung*). Das Boson  $d_i$  kann allerdings nicht mehr zusatzlich reell gewahlt werden [97]. In dieser Eichung ist die weitere Bedingung  $\mathbf{p}^\dagger \times \mathbf{p} = 0$  automatisch erfullt [99].

Die Matrizen  $\underline{L}$  und  $\underline{R}$  (siehe (6.15)) werten wir aufgrund der Quadratwurzel und des Kehrwertes in der Diagonaldarstellung aus. Dazu diagonalisieren wir die Matrix  $\underline{p}$  (6.4) durch die ortsabhangige Transformationsmatrix

$$\underline{\chi}_i^\dagger = \begin{pmatrix} \alpha_{i1} & \beta_{i1} \\ \alpha_{i2} & \beta_{i2} \end{pmatrix} \quad (6.31)$$

deren Spalten aus den normierten Eigenvektoren  $\alpha_i$  und  $\beta_i$  bestehen. Die reellen Eigenwerte der hermiteschen Matrix lauten

$$\lambda_i^\pm = \frac{1}{2} (p_0 \pm \sqrt{\mathbf{p}^2}), \quad (6.32)$$

wobei  $\mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ . Die Eigenvektoren sind

$$\alpha_i = \left( \frac{N_i^- (p_{ix} - ip_{iy})}{2\lambda_i^- - (p_{i0} + p_{iz})}, N_i^- \right)^T \quad (6.33)$$

$$\beta_i = \left( \frac{N_i^+ (p_{ix} - ip_{iy})}{2\lambda_i^+ - (p_{i0} + p_{iz})}, N_i^+ \right)^T, \quad (6.34)$$

mit den Normierungsfaktoren

$$N_i^\pm = \sqrt{\frac{(2\lambda_i^\pm - (p_{i0} + p_{iz}))^2}{(p_{ix}^2 + p_{iy}^2) + (2\lambda_i^\pm - (p_{i0} + p_{iz}))^2}}. \quad (6.35)$$

Die diagonale Darstellung der Matrix  $\underline{p}$  ergibt sich zu

$$T(\underline{p}_i) = \underline{\chi}_i \underline{p}_i \underline{\chi}_i^\dagger = \begin{pmatrix} \lambda_i^- & 0 \\ 0 & \lambda_i^+ \end{pmatrix}. \quad (6.36)$$

Die Transformation der Matrix  $\underline{z} = \underline{L}(e\underline{p} + \underline{\tilde{p}}^\dagger d)\underline{R}$ ,

$$T(\underline{z}) = T(\underline{L}) (e T(\underline{p}) + T(\underline{\tilde{p}}^\dagger) d) T(\underline{R}), \quad (6.37)$$

ergibt sich aus dem Produkt der folgenden Matrizen, die durch die Diagonalität von  $T(\underline{p})$  die einfache Form haben:

$$T(\underline{\tilde{p}}_i) = \begin{pmatrix} \lambda_i^+ & 0 \\ 0 & \lambda_i^- \end{pmatrix} \quad (6.38)$$

$$T(\underline{L}_i) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-|d_i|^2-(\lambda_i^-)^2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{1-|d_i|^2-(\lambda_i^+)^2}} \end{pmatrix} \quad (6.39)$$

$$T(\underline{R}_i) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-e_i^2-(\lambda_i^+)^2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{1-e_i^2-(\lambda_i^-)^2}} \end{pmatrix}. \quad (6.40)$$

Damit können wir die Terme in  $E_{\text{tot}}$  behandeln, indem wir die Matrizen in der Form  $\underline{z}_i = \underline{\chi}_i^\dagger T(\underline{z}_i) \underline{\chi}_i$  schreiben. Explizit lautet die Matrix

$$T(\underline{z}_i) = \begin{pmatrix} \frac{e_i \lambda_i^- + d_i \lambda_i^+}{\sqrt{1-|d_i|^2-(\lambda_i^-)^2} \sqrt{1-e_i^2-(\lambda_i^+)^2}} & 0 \\ 0 & \frac{e_i \lambda_i^+ + d_i \lambda_i^-}{\sqrt{1-|d_i|^2-(\lambda_i^+)^2} \sqrt{1-e_i^2-(\lambda_i^-)^2}} \end{pmatrix}. \quad (6.41)$$

Da die Matrixelemente  $p_\mu$  und die  $e_i$  durch die radiale Eichung reell gewählt wurden, gilt  $\underline{p}^\dagger = \underline{p}$  und daher  $\underline{L}^\dagger = \underline{L}$  etc.

## 6.4 Numerische Minimierung des Energiefunktional

Das Energiefunktional (6.24) bzw. (6.25) ist simultan mit den geforderten Nebenbedingungen (6.6), (6.9) und (6.21) zu minimieren. Die Berücksichtigung der lokalen Nebenbedingungen erfordert weitere  $N^2$  Lagrange-Parameter für ein  $N \times N$  Gitter. Als alternative Methode addieren wir die quadrierten Bedingungen zu  $E_{\text{tot}}$  und multiplizieren sie jeweils mit einem *großen* Faktor ( $\sim 10^5$ ), um Abweichungen mit einem großen Gradienten zu versehen (vgl. [95]). Die Genauigkeit kann man am Ende überprüfen, indem man die Summe der lokalen Bedingungen auswertet. Um nicht in einem Nebenminimum zu landen, starten wir mit einem

*Hartree-Fock-Ansatz* für die Einteilchen-Wellenfunktionen  $\Phi_n$ . Für das Einband- als auch für das Dreiband-Modell ist das Gesamtfunktional

$$E\{\Phi_n(i, \sigma), e_i, p_{i, \sigma' \sigma}, d_i\} = E_{\text{tot}} + E_{C1} + E_{C2} + E_{C3} + E_{C4} \quad (6.42)$$

mit den folgenden Termen in der radialen Eichung (6.28) zu minimieren:<sup>3</sup>

$$E_{C1} = \lambda_1 \sum_i \left( e_i^2 + p_{i0}^2 + \mathbf{p}_i^2 + |d_i|^2 - 1 \right)^2 \quad (6.43)$$

$$E_{C2} = \lambda_2 \sum_i \left( p_{i0}^2 + \mathbf{p}_i^2 + 2|d_i|^2 - \sum_{n, \sigma} |\Phi_n(i, \sigma)|^2 \right)^2 \quad (6.44)$$

$$E_{C3} = \lambda_3 \sum_i \left( 2p_{i0} \mathbf{p}_i - \sum_{n, \sigma \sigma'} \Phi_n^*(i, \sigma) \tau_{\sigma \sigma'} \Phi_n(i, \sigma') \right)^2 \quad (6.45)$$

$$E_{C4} = \lambda_4 \sum_{nm} \left( \sum_{i, \sigma} \Phi_n^*(i, \sigma) \Phi_m(i, \sigma) - \delta_{nm} \right)^2 \quad (6.46)$$

Das Funktional ist *reell*, da zu jedem Hüpfprozeß  $i \rightarrow j$  ebenso der konjugiert komplexe Term  $j \rightarrow i$  auftritt.

Auf einem  $N \times N$  Gitter haben wir ohne Dotierung im Einband-Modell über  $N^2$  Einteilchen-Funktionen mit je  $2N^2$  komplexen Komponenten (im Dreiband-Modell  $6N^2$ ) zu minimieren. Hinzu kommen pro Platz die Bose-Felder  $\{e, d, p\}$ , die durch 5 reelle und einen komplexen Parameter dargestellt werden. Insgesamt ist also über  $4N^4 + 7N^2$  *reelle Variablen* ( $12N^4 + 7N^2$ ) zu minimieren. Für die Minimierung ist ein *konjugierte Gradienten-Verfahren* geeignet, da der Hartree-Fock-Ansatz bereits dicht beim zu erwartenden Grundzustand liegt und der Algorithmus nur noch in das Minimum "hineinzulaufen" braucht. Die Gradienten müssen dazu analytisch berechnet werden, da eine numerische Berechnung zu ungenau ist. Weiterhin muß eine Routine verwendet werden, deren Speicherbedarf lediglich linear in  $N$  wächst, da bereits für Gittergrößen  $N \sim 10$  eine Anzahl von ca.  $10^9$  Variationsparametern auftritt. Der *Fletcher-Reeves-Polak-Ribiere-Algorithmus* erfüllt diese Bedingung (siehe [100]).

## 6.5 Zusammenfassung und Ausblick

Das Phasendiagramm der lochdotierten Hochtemperatur-Supraleiter ist bis heute nicht verstanden. Experimentell wurden zahlreiche Anomalien in diesen Materialien nachgewiesen wie z.B. das Nicht-Fermiflüssigkeitsverhalten, das Auftreten eines Pseudogaps, die temperaturunabhängige magnetische Kohärenzlänge, die Streifenbildung sowie die  $d$ -Wellen-Supraleitung. Ein Zugang für das Verständnis besteht darin, die Dotierung des Antiferromagneten mit Löchern zu untersuchen. Seit kurzem kann die Dotierungskonzentration – alternativ zur chemischen Dotierung – über einen Feldeffekt-Transistor-Aufbau durch Anlegen einer gate-Spannung geregelt werden [29].

Im Rahmen einer makroskopischen Theorie können Timm und Bennemann [25] die dotierungsabhängige Néel-Temperatur  $T_N(x)$  erklären, indem sie, wie bereits vorher Berciu und

<sup>3</sup>Die Summen über  $n$  bzw.  $m$  laufen bis  $N_e$ .

John [79] oder Marino [27], von der Idee ausgehen, dass dotierte Löcher sich mit Vortex-Spinstrukturen umgeben. Das Ziel meiner Arbeit war, eine mikroskopische Rechtfertigung für diesen Mechanismus zu geben. Das zugrundeliegende Modell ist das zweidimensionale Dreiband-Hubbard-Modell, das die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen der Kuprate beschreibt. Die zentrale Fragestellung galt der Untersuchung eines Vortex-Antivortex-Paares als möglichen Grundzustand in einem mit zwei Löchern dotierten Systems.

In einem ersten Schritt habe ich, basierend auf dem Spin-Fermion-Modell, ein Heisenberg-artiges Spin-Modell mit expliziter Berücksichtigung der Dzyaloshinskii-Moriya-Anisotropie in einer Monte-Carlo-Simulation untersucht. Dieser methodische Ansatz stellte sich für die Fragestellung als unzureichend heraus. Es konnte aber der zu erwartende Einfluß der Anisotropie auf den Antiferromagneten bestätigt und ebenfalls für einen Vortex gezeigt werden. Weiterhin wurde sowohl die logarithmische Energie-Divergenz eines einzelnen Vortex als auch die vom Kernabstand abhängige, attraktive Wechselwirkung von Vortex-Antivortex-Paaren nachgewiesen.

In einem weiteren Schritt habe ich eine statische, inhomogene, generalisierte Hartree-Fock-Näherung bei  $T = 0$  benutzt, die eine lokale Betrachtung von Ladungs- und Spinfreiheitsgraden erlaubt. Mit dieser Methode habe ich das Einband-Hubbard-Modell bei Lochdotierung untersucht. Die aus der Literatur bekannten selbstkonsistenten Lösungen des antiferromagnetischen Isolators, des Polarons und eines platzzentrierten Vortex wurden quantitativ reproduziert. Eine sorgfältige Untersuchung ergab aber keinen Vortex-Antivortex-Grundzustand, obwohl Vortex-Lösungen als metastabile Zustände auftraten. Der quantitative Vergleich zeigt, dass das Polaron energetisch günstiger als der Vortex ist. Die logarithmische Abhängigkeit eines Vortex von der Systemgröße konnte auch im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung gezeigt werden.

Im dritten Schritt habe die Hartree-Fock-Näherung auf das Dreiband-Hubbard-Modell, das explizit die Sauerstoff-Freiheitsgrade berücksichtigt, angewandt. Als Hauptergebnis dieser Arbeit wurde gezeigt, dass auch im Dreiband-Modell das Vortex-Antivortex-Paar kein stabiler Grundzustand im Rahmen der Hartree-Fock-Methode ist. Vielmehr zeigten sich – entgegen der Erwartung – keine qualitativen Unterschiede zwischen den Lösungen des Einband- und des Dreiband-Hubbard-Modells. Diese Beobachtung ist konsistent mit der Existenz des Zhang-Rice-Singulett im Hartree-Fock-genäherten Dreiband-Modell, das die vereinfachte Einband-Beschreibung rechtfertigt. Die metastabile Vortex-Lösung hängt kritisch von der on-site Cu-Wechselwirkung ab und existiert lediglich für Werte  $U_d/t_{pd} \lesssim 7$ .

Die Existenz von platzzentrierten Vortizes im Einband- und Dreiband-Hubbard-Modell, bei denen die Ladung eines Loches im Vortex-Kern konzentriert ist, spielt wahrscheinlich auch in den realen Materialien eine Rolle: im Fall  $T \neq 0$  erwartet man Vortizes aufgrund der thermischen Anregungen. Diese könnten mit den vorhandenen Löchern zusammengesetzte Objekte analog zu den theoretischen Lösungen bilden. Interessant ist dabei die beobachtete kritische Abhängigkeit der Stabilität von Vortex-Lösungen von der Wechselwirkungsstärke  $U$ .

Die lediglich kleinen Energiedifferenzen zwischen Vortex-Antivortex-Startkonfigurationen und selbstkonsistenten Doppelpolaron-Lösungen legen die Frage nach der Zuverlässigkeit des einfachen Einteilchen-Bildes der Hartree-Fock-Näherung nahe. Da in einer Arbeit [26] be-

reits die Stabilität eines Vortex-Antivortex-Paares im Rahmen eines slave-boson-Ansatzes im Einband-Hubbard-Modell gefunden wurde, habe ich diese Methode nachvollzogen und auf den Dreiband-Fall erweitert. Die numerische Lösung erfordert den Hartree-Fock-Ansatz als Startkonfiguration, die Implementierung wird aber lediglich prinzipiell diskutiert.

Im Rahmen dieser Arbeit habe ich mit verschiedenen methodischen Ansätzen das für die Theorie der Hochtemperatur-Supraleiter relevante Problem der Lochdotierung von Mott-Isolatoren untersucht. Eine einfache Hartree-Fock-Näherung stellte sich als unzureichend für das Problem der Stabilität eines Vortex-Antivortex-Grundzustandes heraus. Mit der Lösung des Dreiband-Modells im Rahmen des vorgestellten slave-boson-Ansatzes könnte dieses Frage (vermutlich) endgültig und befriedigend geklärt werden.

# Anhang A

## Topologische Defekte im $XY$ -Modell

Die *topologischen Defekte* bilden eine Klasse von Störungen des Grundzustandes eines Systems mit gebrochener kontinuierlicher Symmetrie, die man *nicht* durch Entwicklung wie z.B. die Gaußschen Fluktuationen erhalten kann. Sie können z.B. durch Randbedingungen, externe Felder oder thermische Fluktuationen angeregt werden. Ein *topologischer Defekt* ist dadurch charakterisiert, dass er sich *nicht* durch eine kontinuierliche Verformung des Ordnungsparameter- (OP-) Feldes beseitigen läßt.

In diesem Abschnitt wollen wir *Vortizes* als topologische Defekte des  $XY$ -Modells in zwei Dimensionen beschreiben und ihre Konfigurationsenergie berechnen, vgl. [106, 105]. Wir beschränken uns dabei auf das *statische* Verhalten von Vortizes.

### A.1 Das $XY$ -Modell

Die  $U(1)$ - bzw.  $O(2)$ -Symmetrie beschreibt Drehungen in der Ebene. Ein einfaches Modell mit dieser Symmetrie ist das  $XY$ -Modell auf einem Gitter. Die Spins

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = S(\cos \theta(\mathbf{r}), \sin \theta(\mathbf{r})) \quad (\text{A.1})$$

der Länge  $S$  sind dabei auf jedem Gitterplatz  $\mathbf{r} = a(i_x, i_y)$  definiert und wechselwirken mit ihren nächsten Nachbarn über Austauschkopplung,

$$\mathcal{H}_{XY} = -JS^2 \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta(\mathbf{r}_i) - \theta(\mathbf{r}_j)). \quad (\text{A.2})$$

Der Grundzustand ist durch die Ausrichtung aller Spins entlang einer Richtung gegeben. Wir wollen Konfigurationen mit *kleinen* Winkeldifferenzen betrachten, so dass man den Kosinus entwickeln kann. Approximiert man die Summe durch ein Integral, ergibt sich die Konfigurationsenergie durch den Gradiententerm

$$E = \frac{1}{2} \int d^2r \rho_s (\nabla \theta(\mathbf{r}))^2. \quad (\text{A.3})$$

Die *Steifigkeit*  $\rho_s = JS^2$  beschreibt die Energie, die eine Verformung des Winkels  $\theta$  kostet.

Das zweidimensionale XY-Modell besitzt *keine langreichweitige Ordnung* für  $T \neq 0$ , da eine kontinuierliche Symmetrie nicht spontan gebrochen werden kann. Das ist die Aussage des *Mermin-Wagner-Theorems* [102]. Das XY-Modell zeigt aber einen *Kosterlitz-Thouless-Übergang* bei einer endlichen Temperatur  $T_c$  von einer Hochtemperatur-Phase (mit einem exponentiellen Abfall der Korrelationsfunktion) zu einer Niedrigtemperatur-Phase mit “quasi-langreichweitiger Ordnung”, die durch einen algebraischen Abfall der Korrelationsfunktion charakterisiert ist [103, 104, 105]. Für den Phasenübergang des zweidimensionalen XY-Modells spielen *Vortizes* als *topologische Punktdefekte* die entscheidende Rolle.

## A.2 Vortizes als topologische Defekte im XY-Modell

Wählt man den zweikomponentigen OP  $\langle \theta(\mathbf{r}) \rangle$  eindeutig, so ist die Phase bei einem geschlossenen Weg auf dem Gitter bis auf ein Vielfaches von  $2\pi$  bestimmt. Wir betrachten dazu die speziellen Konfigurationen,

$$\theta(\mathbf{r}) = k\phi + \theta_0, \quad (\text{A.4})$$

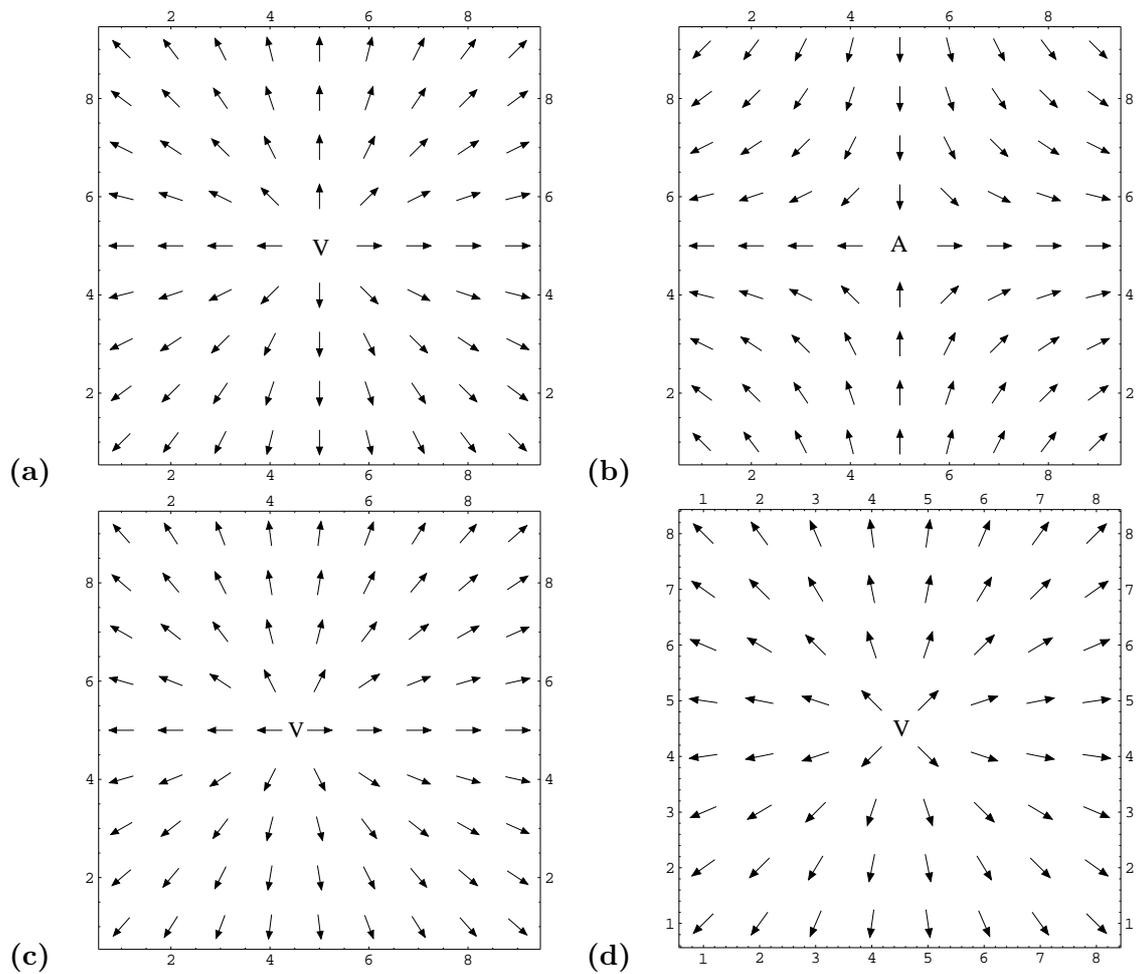
mit der Polardarstellung  $\mathbf{r} = (r, \phi)$  und einer Konstanten  $\theta_0$ . Am Ursprung  $\mathbf{r} = 0$  ist  $\phi$  nicht definiert. Diese Singularität kann vermieden werden, indem der OP im Ursprung gegen Null geht, da  $\theta$  in diesem Fall nicht mehr definiert ist. Der Bereich, in dem der OP wesentlich unterdrückt wird, heißt *Vortex-Kern* (core). Die ganze Zahl  $k$  heißt *Windungszahl* oder *Vortizität* oder allgemeiner *topologische Invariante*. Die globale Phase  $\theta_0$  ist nicht entscheidend. Die Konfigurationen erfüllen die geforderte Bedingung für einen geschlossenen Weg um den Kern,

$$\oint d\theta = 2\pi k, \quad k = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{A.5})$$

Der Vortex ist allein durch seine Windungszahl charakterisiert, da Konfigurationen mit derselben Windungszahl durch eine stetige Verformung des OP ineinander umgewandelt werden können. Beispiele für mögliche Vortex-Konfigurationen mit  $k = \pm 1$  auf einem Gitter sind in der Abb. A.1 dargestellt.

Ein Vortex ( $k \neq 0$ ) kann *nicht* durch eine stetige Verformung zum Verschwinden gebracht werden. Man sagt, er sei *topologisch stabil*. Allgemein kann man die Windungszahl  $k$  nicht durch eine stetige Verformung ändern, was in der *Homotopie-Theorie* bewiesen wird, vgl. [105]. Diese Art von Stabilität ist auch physikalisch zu verstehen: Versucht man den OP entlang einer Achse auszurichten, so sind dazu Spin-Flips vom Winkel  $\pi$  notwendig. Dazu ist eine (Anisotropie-) Energie von der Größenordnung  $JL$  notwendig, d.h. die Energie wächst linear mit der Systemgröße  $L$ . Die Zerstörung des Vortex durch Übergang in die ungeordnete Phase und zurück in einen homogen geordneten Zustand kostet sogar die Energie  $\sim L^2$ . Die Energie eines Vortex geht dagegen nur mit  $\sim \ln L$  (s.u.). In einem unendlichen System wird das “Abwickeln” eines Vortex also durch eine *unendliche Energiebarriere* verhindert.

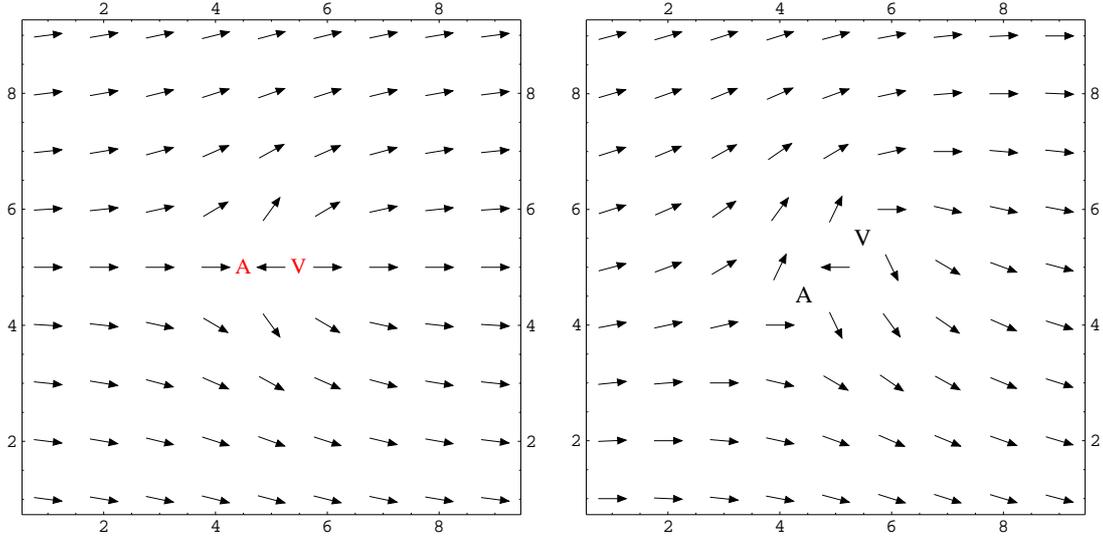
Ein *Meron* ist ein Defekt, der z.B. in einem Ferromagneten mit einer *leichten Ebene* auftritt. Der Defekt ist dadurch charakterisiert, dass der OP außerhalb des Kerns einen Vortex in der leichten Ebene bildet und dass die Magnetisierung im Kern aus der leichten Ebene herausdreht. Diese Konfiguration existiert, weil es typischerweise für die Magnetisierung günstiger



**Abbildung A.1:** Mögliche Vortex-Konfigurationen mit  $\theta_0 = 0$  und  $k \pm 1$  auf einem  $9 \times 9$ -Gitter. Dargestellt ist die Magnetisierung eines Ferromagneten bzw. der Ordnungsparameter eines Antiferromagneten. **(a)** *Vortex* mit  $k = 1$ . Der Vortex-Kern ist auf dem Platz  $(5, 5)$  lokalisiert (durch  $V$  gekennzeichnet). Man spricht deshalb von einem *platzzentrierten Vortex*. **(b)** Vortex mit  $k = -1$ , den man auch *Antivortex* nennt. **(c)** Ein *bindungszentrierter Vortex* mit dem Kern auf der Bindung  $(5, 4)$ – $(5, 5)$ . **(d)** Bei dem *plaquettenzentrierten Vortex* liegt der Kern in der Mitte der Gitterorte  $(4, 4)$ ,  $(4, 5)$ ,  $(5, 4)$  und  $(5, 5)$ .

ist, sich im Kern aus der Ebene herauszudrehen, anstatt des OP auf Null zu reduzieren. *Meronen gehören zu derselben Homotopie-Klasse wie Vortizes im zweidimensionalen XY-Modell.* Um den OP überall aus der leichten Ebene zu drehen, müßte man die Energie  $\sim L^2$  aufwenden. Ein Meron kann also in einem unendlichen System ebenso wenig abgewickelt werden wie ein Vortex.

Ein System mit einem Vortex ( $k = 1$ ) und einem Antivortex ( $k = -1$ ) hat die Gesamtwindungszahl Null und kann daher durch stetige Verformung in den homogenen Grundzustand überführt werden: die Defekte können annihilieren. Umgekehrt kann ein *Vortex-Antivortex-Paar* aus dem Grundzustand gebildet werden, z.B. durch *Fluktuationen*. In der Abb. A.2 sind zwei Paar-Konfigurationen auf einem Gitter dargestellt.



**Abbildung A.2:** Ordnungparameter-Feld auf einem  $9 \times 9$ -Gitter mit einem Vortex ( $k = 1$ ) und einem Antivortex ( $k = -1$ ). Die Vortex-Kerne sind durch  $V$  bzw.  $A$  gekennzeichnet und haben jeweils den minimalen Abstand von einer Gitterkonstanten. **(links)** Die Zentren liegen auf den Bindungen, so dass man von einem *bindungszentrierten Vortex-Antivortex-Paar* spricht. **(rechts)** *Plaquettenzentriertes Paar*.

### A.3 Vortex-Energie

Die Energie eines Vortex besteht aus zwei Anteilen: (1) einem Beitrag  $E_c$  vom reduzierten OP im Kern und (2) einem Beitrag  $E_{el}$  vom Gradiententerm (elastische Energie) außerhalb des Kerns. Eine detaillierte Berechnung von  $E_c$  erfordert ein mikroskopisches Modell für den Ordnungsmechanismus. Sie hängt ab von der Ausdehnung des Kerns (Radius  $r_c$ ) und der damit verlorenen Kondensationsenergie(dichte)  $e_{con}$ , so dass man bis auf eine numerische Konstante  $A$  die Kern-Energie  $E_c$  abschätzen kann,

$$E_c = A r_c^2 e_{con}. \quad (\text{A.6})$$

Die elastische Energie berechnet sich für die Konfiguration  $\theta = k\phi + \theta_0$  und mit  $\nabla\theta = \frac{k}{r}e_\phi$  zu

$$E_{el} = \frac{\rho_s}{2} \int d^2x \nabla\theta \cdot \nabla\theta = \frac{1}{2} \rho_s k^2 2\pi \int_{r_c}^R \frac{r dr}{r^2} \quad (\text{A.7})$$

$$= \pi k^2 \rho_s \ln \frac{R}{r_c}. \quad (\text{A.8})$$

Dabei geht die Systemgröße in die Radiuslänge  $R$  ein. Damit ergibt sich die *Energie eines Vortex* zu

$$E_{\text{vortex}} = E_c + E_{el} = A r_c^2 e_{con} + \pi k^2 \rho_s \ln \frac{R}{r_c}. \quad (\text{A.9})$$

Die Energie eines Vortex wächst also *logarithmisch mit der Systemgröße  $R$* . Die logarithmische Divergenz mit  $R$  kommt dadurch zustande, dass ein Vortex das OP-Feld  $\langle \mathbf{S} \rangle$  im *gesamten* System stört.

Die Energie zweier Vortizes mit Windungszahlen  $k_1$  und  $k_2$  läßt sich analog berechnen. Eine explizite Realisierung der Spinkonfiguration ist (vgl. Abb. A.2)

$$\theta = k_1 \arctan \frac{y - y_1}{x - x_1} + k_2 \arctan \frac{y - y_2}{x - x_2} + \theta_0, \quad (\text{A.10})$$

wobei  $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$  die Orte der Vortexkerne sind. Die Energie mit dem Abstand  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  der beiden Kerne ist [105]:

$$E_{k_1, k_2} = E_c(k_1) + E_c(k_2) + \pi \rho_s (k_1 + k_2)^2 \ln \frac{R}{r_c} - 2\pi \rho_s k_1 k_2 \ln \frac{r}{r_c}. \quad (\text{A.11})$$

Die  $\ln R$ -Divergenz kann durch die Wahl  $k_1 = -k_2$  eliminiert werden. Verallgemeinert für ein System mit vielen Vortizes muß entsprechend  $\sum_i k_i = 0$  erfüllt sein. Speziell für ein *Vortex-Antivortex-Paar* mit  $k_1 = 1$  und  $k_2 = -1$  ergibt sich

$$E_{\text{paar}} = 2E_c(k = 1) + 2\pi \rho_s \ln \frac{r}{r_c}. \quad (\text{A.12})$$

Die Energie ist in diesem Fall *endlich*, auch in einem unendlichen System  $R \rightarrow \infty$ . Die *Vortex-Antivortex-Wechselwirkung ist anziehend* und wird minimal für den kleinsten Abstand der Vortexkerne. Auf einem Gitter ist der kleinste Abstand durch eine Gitterkonstante gegeben.

Die Vortizes des XY-Modells können auf das *Coulomb-Gas-Modell in zwei Dimensionen*, das die Coulomb-Wechselwirkung geladener Teilchen beschreibt, abgebildet werden [101, 107]. Fourier-Transformation in zwei Dimensionen des  $1/k^2$ -Potentials aus der Poisson-Gleichung  $\nabla^2 V(\mathbf{r}) = -2\pi \delta(\mathbf{r})$  in den Ortsraum ergibt das Coulomb-Potential  $V \sim \ln(\mathbf{r})$ . Die logarithmische Vortex-Wechselwirkung kann daher auch als ein *Effekt der Coulomb-Wechselwirkung in zwei Dimensionen* interpretiert werden.



# Literaturverzeichnis

- [1] J. G. Bednorz und K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [2] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [3] G. M. Luke *et al.*, *Phys. Rev. B* **42**, 7981 (1990).
- [4] A. G. Loeser *et al.*, *Science* **273**, 325 (1996).
- [5] H. Ding *et al.*, *Nature* **382**, 51 (1996).
- [6] P. J. White, Z.-X. Shen *et al.*, *Phys. Rev. B* **54**, 15669 (1996).
- [7] S. Martin *et al.*, *Phys. Rev. B* **41**, 486 (1990).
- [8] T. A. Friedmann *et al.*, *Phys. Rev. B* **42**, 6217 (1990).
- [9] N. W. Ashcroft und N. D. Mermin, *Solid state physics*, Saunders College Publishing (1976).
- [10] N. P. Ong, in *Physical Properties in High Temperature Superconductors II*, ed. durch D. M. Ginsberg, World Scientific Press (1990).
- [11] D. B. Tanner und T. Timusk, in *Physical Properties in High Temperature Superconductors III*, ed. durch D. M. Ginsberg, World Scientific Press (1992).
- [12] S. Uchida *et al.*, *Phys. Rev. B* **43**, 7942 (1991).
- [13] M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane und Y. Endoh, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 897 (1998).
- [14] Z. X. Shen *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1553 (1993).
- [15] R. J. Kelley *et al.*, *Phys. Rev. B* **50**, 590 (1994).
- [16] H. Ding *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2784 (1995).
- [17] Y. J. Uemura *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2317 (1989).
- [18] V. J. Emery und S. A. Kivelson, *Nature* **374**, 434 (1995).
- [19] T. Timusk und B. W. Statt, *Rep. Prog. Phys.* **62**, 61 (1999).

- 
- [20] S.-W. Cheong *et al.*, Phys. Rev. Lett. **67**, 1791 (1991).
- [21] T. E. Mason, G. Aeppli und H. A. Mook, Phys. Rev. Lett. **68**, 1414 (1992).
- [22] J. Tranquada *et al.*, Nature **375**, 561 (1995).
- [23] J. Orenstein und A. J. Millis, Science **288**, 468 (2000).
- [24] J. Bardeen, L. N. Cooper und J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [25] C. Timm und K. H. Bennemann, Phys. Rev. Lett. **84**, 4994 (2000).
- [26] G. Seibold, Phys. Rev. B **58**, 15520 (1998).
- [27] E. C. Marino, Phys. Lett. A **263**, 446 (1999).
- [28] A. Aharony, R. J. Birgeneau, A. Coniglio, M. A. Kastner und H. E. Stanley, Phys. Rev. Lett. **60**, 1330 (1988).
- [29] J. H. Schön, M. Dorgetr, F. C. Beuran *et. al.*, Nature **414**, 434 (2001).
- [30] R. J. Gooding, Phys. Rev. Lett. **66**, 2266 (1991).
- [31] P. B. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **60**, 821 (1988).
- [32] T. Morinari, cond-mat/0010199 (2000).
- [33] S. Haas, F. C. Zhang, F. Mila und T. M. Rice, Phys. Rev. Lett. **77**, 3021 (1996)
- [34] B. I. Shraiman und E. D. Siggia, Phys. Rev. Lett. **61**, 467 (1988).
- [35] E. Pellegrin, N. Nücker, J. Fink, S. L. Molodtsov, A. Gutiérrez, E. Navas, O. Strebel, Z. Hu, M. Domke, G. Kaindl *et. al.*, Phys. Rev. B **47**, 3354 (1993).
- [36] W. E. Pickett, Rev. Mod. Phys. **61**, 433 (1989).
- [37] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [38] V. J. Emery, Phys. Rev. Lett **58**, 2794 (1987).
- [39] V. J. Emery, G. Reiter, Phys. Rev. B **38**, 4547 (1988).
- [40] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A 276**, 238 (1963).
- [41] P. W. Anderson und J. R. Schrieffer, Phys. Today **44**, 55 (1991).
- [42] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [43] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag (1994).
- [44] Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).

- [45] M. S. Hybertsen, E. B. Stechel, M. Schlüter und D. R. Jennison, Phys. Rev. B **41**, 11068 (1990).
- [46] G. Dopf, A. Muramatsu und W. Hanke, Phys. Rev. Lett. **68**, 353 (1992).
- [47] A. K. McMahan, J. F. Annett und R. M. Martin, Phys. Rev. B **42**, 6268 (1990).
- [48] J. Zaanen, G. A. Sawatzky und J. W. Allen, Phys. Rev. Lett. **55**, 418 (1985).
- [49] A. Fujimori, E. Takayama-Muromachi, Y. Uchida und B. Okai, Phys. Rev. B **35**, 8814 (1987).
- [50] J. M. Tranquada, S. M. Heald, A. Moodenbaugh und M. Suenaga, Phys. Rev. B **35**, 7187 (1987).
- [51] N. Nücker, F. Fink, J. C. Fuggle, P. J. Durham und W. M. Temmermann, Phys. Rev. B **37**, 5158 (1988).
- [52] W. Brenig, Phys. Rep. **251**, 153 (1995).
- [53] F. C. Zhang und T. M. Rice, Phys. Rev. B **41**, 7243 (1990).
- [54] V. J. Emery, G. Reiter, Phys. Rev. B **41**, 7247 (1990).
- [55] J. Zaanen und A. M. Oles, Phys. Rev. B **37**, 9423 (1988).
- [56] A. Muramatsu, R. Zeyher und D. Schmeltzer, Europhys. Lett. **7**, 473 (1988).
- [57] P. Prelovsek, Phys. Lett. **A** 126, 287 (1988).
- [58] J. Hubbard, Phys. Rev. Lett. **3** (1954) 77.
- [59] R. L. Stratonovic, Dokl. Akad. Nauk. SSSR **115**, 1097 (1957) [Sov. Phys. Solid State **2**, 1824 (1958)].
- [60] H. J. Schulz, Phys. Rev. Lett. **65**, 2462 (1990).
- [61] F. Krüger und S. Scheidl, cond-mat/0110061 (2001).
- [62] I. Dzyaloshinskii, J. Phys. Chem. Solids **4**, 241 (1958).
- [63] T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
- [64] D. Coffey, T. M. Rice, F. C. Zhang, Phys. Rev. B **44**, 10112 (1991).
- [65] D. Coffey, K. S. Bedell, S. A. Trugman, Phys. Rev. B **42**, 6509 (1990).
- [66] P. W. Anderson, Phys. Rev. **115**, 2 (1959).
- [67] W. Koshibae, Y. Ohta, S. Maekawa, Phys. Rev. B **47**, 3391 (1993) .
- [68] T. Thio *et al.*, Phys. Rev. B **38**, 905 (1988).

- [69] S.-W. Cheong, J. D. Thompson und Z. Fisk, Phys. Rev. B **39**, 4395 (1989).
- [70] J. D. Jorgensen, B. Dabrowski, Shiyu Pei, D. G. Hinks, L. Soderholm, B. Morosin, J. E. Schirber, E. L. Venturini und D. S. Ginley, Phys. Rev. B **38**, 11337 (1988).
- [71] Y. Endoh, K. Yamada, R. J. Birgeneau, D. R. Gabbe, H. P. Jenssen, M. A. Kastner, C. J. Peters, P. J. Picone, T. R. Thurston, J. M. Tranquada and G. Shirane, Y. Hidaka, M. Oda, Y. Enomoto, M. Suzuki, und T. Murakami, Phys. Rev. B **37**, 7443 (1988).
- [72] F. C. Zhang und T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).
- [73] C. Timm, *unpublished*.
- [74] K. Binder und D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction*, Solid State Sciences Number **80**, Springer (1992).
- [75] J. A. Vergés, E. Louis, P. S. Lomdahl, F. Guinea und A. R. Bishop, Phys. Rev. B **43**, 6099 (1991).
- [76] F. Guinea, E. Louis und J. A. Vergés, Phys. Rev. B **45**, 4752 (1992).
- [77] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **31**, 4403 (1985).
- [78] P. G. J. van Dongen, Phys. Rev. B **54**, 1584 (1996).
- [79] M. Berciu und S. John, Phys. Rev. B **59**, 15143 (1999).
- [80] M. Berciu und S. John, Phys. Rev. B **61**, 16454 (2000).
- [81] K. Yonemitsu und A. R. Bishop, Phys. Rev. B **48**, 6680 (1993).
- [82] W. P. Su und X. Y. Chen, Phys. Rev. B **38**, 8879 (1988).
- [83] J. R. Schrieffer, X. G. Wen und S. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **60**, 944 (1988).
- [84] M. P. López Sancho, J. Rubio, M. C. Refolio und J. M. López Sancho, Phys. Rev. B **46**, 11110 (1992).
- [85] J. A. Vergés, F. Guinea und E. Louis, Phys. Rev. B **46**, 3562 (1992).
- [86] D. Poilblanc und T. M. Rice, Phys. Rev. B **39**, 9749 (1989).
- [87] J. Zaanen und O. Gunnarsson, Phys. Rev. B **40**, 7391 (1989).
- [88] M. S. Hybertsen, M. Schlüter und N. E. Christensen, Phys. Rev. B **39**, 9028 (1989).
- [89] J. Wagner, W. Hanke und D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **43**, 10517 (1991).
- [90] H. Eskes, M. B. J Meinders und G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **67**, 1035 (1991).
- [91] D. Vankin, S. K. Sinha, D. E. Moncton, D.C. Johnston *et al.*, Phys. Rev. Lett. **58**, 2802 (1987).

- [92] J. W. Allen, C. G. Olson, M. B. Maple, J. S. Kang, L. Z. Liu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **64**, 595 (1990).
- [93] G. Kotliar und A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).
- [94] T. Li, P. Wölfle und P. J. Hirschfeld, Phys. Rev. B. **40**, 6817 (1989).
- [95] G. Seibold, E. Sigmund und V. Hizhnyakov, Phys. Rev. B **57**, 6837 (1998).
- [96] J. Schmalian, Doktorarbeit FU Berlin (1993).
- [97] Th. Jolicoeur und J. C. Le Gouillou, Phys. Rev. B **44**, 2403 (1991).
- [98] R. Fresard und P. Wölfle, Int. J. Mod. Phys. B **6**, 685 (1992).
- [99] R. Fresard und P. Wölfle, Erratum zu Int. J. Mod. Phys. B **6**, 685 (1992).
- [100] W. H. Press, W. T. Vetterling, S. A. Teukolsky und B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, second edition, Cambridge University Press.
- [101] P. Minnhagen, Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987).
- [102] N. D. Mermin und H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [103] V. L. Berezinskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz **61**, 1144 (1971), [Sov. Phys. JETP **34**, 610 (1972)].
- [104] J. M. Kosterlitz und D. J. Thouless, J. Phys. C **5**, L 124 (1972), J. M. Kosterlitz und D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973)
- [105] P. M. Chaikin und T. C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge University Press (1995).
- [106] C. Timm, *Skript zur Vorlesung "Phasenübergänge und kritische Phänomene*, FU Berlin (2000).
- [107] R. Savit, Phys. Rev. B **17**, 1340 (1978).



# Danksagung

Auf diesem Wege möchte ich mich bei allen Menschen bedanken, die auf irgendeine Weise zu dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein Dank gilt an erster Stelle Dr. Carsten Timm für die Anregung zu der Fragestellung. Die ausgezeichnete Betreuung und Zusammenarbeit haben mir über viele kleinere und größere Probleme hinweggeholfen.

Ebenfalls geht mein Dank an Prof. Felix von Oppen für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe. Jenny, Sven und Fabian danke ich für ihre Unterstützung und die gemeinsame Zeit, nicht nur bei einem Café in unserer Bäckerei.

Mein herzlichster Dank bleibt meinen Eltern vorbehalten, die mir neben der finanziellen vor allem ihre persönliche Unterstützung während meiner gesamten Studienzeit zukommen ließen.

Ebenfalls für die finanzielle Unterstützung, aber auch für die alternativen intellektuellen Einflüsse während meiner Förderung danke ich dem *Evangelischen Studienwerk Villigst e.V.* und allen daran beteiligten Menschen.