

Untersuchungen zum t - J -Modell auf hyperkubischen Gittern und auf dem Dreiecksgitter

Vom Fachbereich Physik der Universität Hannover

zur Erlangung des Grades
Doktor der Naturwissenschaften
Dr. rer. nat.

genehmigte Dissertation

von

Dipl. Phys. Uwe Körner

geboren am 16.12.1969 in Celle

2001

Referent: Prof. Dr. H.-U. Everts
Korreferent: Prof. Dr. O. Lechtenfeld
Tag der Promotion: 13.02.2001

Kurzzusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird im Rahmen des t - J -Modells die Dynamik von Löchern in den geordneten Spinzuständen stark korrelierter Elektronensysteme untersucht. Dazu wird mittels geeignet gewählter kohärenter Lochzustände eine Pfadintegraldarstellung der Zustandssumme des t - J -Modells hergeleitet, in der die fermionischen Freiheitsgrade durch Grassmannvariablen und die Spinfreiheitsgrade durch $SU(2)$ -symmetrische Matrizen dargestellt werden. Um semiklassische Entwicklungen zu ermöglichen, wird das ursprünglich für $S = 1/2$ definierte Modell zunächst auf beliebigen Spin S verallgemeinert.

Im ersten Teil der Arbeit wird das Quasiteilchengewicht Z_k eines Lochs auf hyperkubischen Gittern in allgemeiner Dimension d für kleine Hüpfamplitude t berechnet. In einer Dimension verschwindet Z_k im Limes großer Systemlänge nach einem Potenzgesetz, $Z_k \sim L^{-2X}$. Der Exponent X wird in semiklassischer Näherung bis zur Ordnung S^{-2} bestimmt, die Resultate werden mit einem exakten Ergebnis und mit numerischen Ergebnissen verglichen. In niedrigster Ordnung $1/S$ ergibt sich für ein statisches Loch ($t = 0$) eine qualitativ gute Übereinstimmung mit dem exakten Resultat. Die numerischen Rechnungen zeigen, daß Z_k sehr stark mit der Hüpfamplitude t variiert. Die Ergebnisse lassen vermuten, daß der Punkt $t = 0$ ein singulärer Punkt in der t -Abhängigkeit von Z_k ist.

Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall bleibt Z_k in höheren Dimensionen, $d \geq 2$, im thermodynamischen Limes endlich: auf hyperkubischen Gittern hat das Loch für $d \geq 2$ Quasiteilcheneigenschaften.

Im zweiten Teil der Arbeit werden im Rahmen des t - J -Modells die Eigenschaften eines und mehrerer Löcher auf dem Dreiecksgitter mit analytischen und mit numerischen Methoden untersucht. Die analytischen Rechnungen basieren auf einem effektiven Hamiltonoperator H_Δ , der sich in niedrigster Ordnung der semiklassischen Entwicklung aus der Pfadintegraldarstellung des Modells ergibt. H_Δ spiegelt den Unterschied zwischen der Lochdynamik auf dem Dreiecksgitter und der Lochdynamik auf dem Quadratgitter wider: während in dem kollinear geordneten Spingrundzustand des Quadratgitters nur magnonunterstütztes Hüpfen möglich ist, läßt der nicht-kollinear geordnete Spingrundzustand des Dreiecksgitters magnonenunabhängiges Hüpfen des Lochs zu. Anhand des Hamiltonoperators H_Δ wird in selbstkonsistenter Bornscher Näherung die spektrale Dichte und die Energiedispersion eines Lochs berechnet. Es zeigt sich ein deutlicher Unterschied zwischen der Dynamik des Lochs für negative und positive Hüpfamplitude t . Für $t < 0$ wird das Loch durch ein tiefliegendes Quasiteilchenband mit hoher effektiver Masse beschrieben. Numerische Berechnungen der Lochdichteverteilung in klassischen Spinhintergründen und die numerisch exakte Berechnung der Spinkorrelationen in der Umgebung des Lochs ergeben, daß das Loch in diesem Parameterbereich die Spins in seiner Umgebung ferromagnetisch polarisiert: es bildet sich ein magnetisches Polaron. Die gleichen Rechnungen zeigen, daß das Loch für positive Hüpfamplitude, $t > 0$, die Spinstruktur in seiner Umgebung nur wenig beeinflusst. Dementsprechend weicht die effektive Masse des Lochs für $t > 0$ weit weniger von der freien Bandmasse ab als für $t < 0$.

Die Eigenschaften mehrerer Löcher in der geordneten 120° -Spinstruktur des Dreiecksgitters werden mittels numerisch exakter Diagonalisierung von Systemen mit 21 und 27 Plätzen eingehend untersucht. Die Ergebnisse, insbesondere die so ermittelten Lochkorrelationen, deuten darauf hin, daß für kleine Hüpfamplitude, $|t| \lesssim 0.15J$, im thermodynamischen Limes Phasenseparation auftritt.

Schlagworte: Korrelierte Elektronen; Quantenantiferromagnete; t - J -Modell

PACS: 71.27.+a; 75.50.Ee; 75.10.Lp

Abstract

In the present thesis the dynamics of holes in ordered spin states of strongly correlated electron systems is investigated in the framework of the $t - J$ model. By means of appropriately chosen coherent hole states the partition function of the $t - J$ model is transformed into a path integral in which the fermionic degrees of freedom are represented by Grassmannians and the spins are described by $SU(2)$ -symmetric matrices. To allow for semiclassical expansions the model, which has originally been defined for $S = 1/2$, is generalized to arbitrary spin S .

In the first part of the thesis the quasiparticle weight Z_k of one hole on hypercubic lattices of arbitrary dimension d is calculated for small hopping amplitude t . In one dimension Z_k vanishes with a power law for large system length L , $Z_k \sim L^{-2X}$. The exponent X is determined to the order S^{-2} of the semiclassical expansion. The result is compared with numerical calculations and with an exact result. For a static hole ($t = 0$) the lowest order approximation for the exponent, $X_1^{SC} \propto 1/S$, is in qualitative agreement with the exact result. The numerical results show a strong dependence of the exponent Z_k on the hopping amplitude t . These results suggest that the point $t = 0$ is a singular point in the functional dependence of Z_k on the hopping amplitude t .

Contrary to the one dimensional case, in higher dimensions $d \geq 2$ the quasiparticle weight Z_k remains finite in the thermodynamic limit: the hole exhibits quasiparticle properties on hypercubic lattices in $d \geq 2$.

In the second part of the thesis analytical and numerical investigations of the properties of holes in the $t - J$ model on the triangular lattice are presented. The analytical calculations are based on an effective Hamiltonian H_Δ which follows from the path integral formulation of the $t - J$ model in lowest order semiclassical approximation. H_Δ reflects the differences between the hole dynamics on the triangular and square lattices: while only magnon-assisted hole hopping is possible in the collinearly ordered spin groundstate of the square lattice, the non-collinear spin groundstate of the triangular lattice admits magnon-independent hopping as well. On the basis of H_Δ the spectral density and the energy dispersion of the one-hole state on the triangular lattice are computed in self-consistent Born approximation. In the hole dynamics significant differences between the cases of a positive and a negative hopping amplitude are observed. For $t < 0$ the hole is described by a low lying quasiparticle band with a large effective mass. In this case computations of the hole density in classical spin backgrounds and of spin correlations by exact diagonalisation reveal the existence of a magnetic polaron which is characterized by ferromagnetic polarisation of the spins in the vicinity of the hole. On the contrary the aforementioned computations show that for positive hopping amplitude the hole disturbs the structure of the spin background only marginally. Accordingly, in this parameter regime the effective mass of the hole deviates much less from the free band mass than for $t < 0$.

The properties of several holes in the ordered 120° spin structure of the triangular lattice are investigated by exact diagonalisation of small systems with 21 and 27 sites. The results, especially the computed hole correlations, indicate phase separation in the thermodynamic limit for small hopping amplitude in the parameter range $|t| \lesssim 0.15J$.

keywords: correlated electrons; antiferromagnetism; band and itinerant models

PACS: 71.27.+a; 75.50.Ee; 75.10.Lp

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	13
2	Kohärente Zustände für das t-J-Modell	17
2.1	Kohärente Zustände ohne Loch	17
2.2	Kohärente Zustände mit einem Loch	18
2.3	Zustandssumme in Pfadintegraldarstellung	20
3	Kontinuumsmodell auf hyperkubischen Gittern	23
3.1	Plaketteneinteilung auf hyperkubischen Gittern	23
3.2	Der Heisenbergterm	24
3.3	Der Hüpfterm	26
3.4	Die Zeitentwicklung	26
3.5	Ausintegration der Intraplakettenvariablen	27
4	Das Quasiteilchengewicht	31
4.1	Spektraldarstellung	32
4.1.1	Nichtentarteter Einlochgrundzustand	32
4.1.2	Entarteter Einlochgrundzustand	33
4.2	Kontinuumstheorie des t - J -Modells	33
4.2.1	Elimination des Lochfreiheitsgrades	34
4.2.2	t -Entwicklung der Greenschen Funktion	35
4.3	Semiklassische Entwicklung	35
4.3.1	Quasiteilchengewicht in $d=1$	38
4.3.2	Quasiteilchengewicht in $d \geq 2$	39
4.4	Numerische Ergebnisse in $d = 1$	40
4.5	Diskussion der Ergebnisse	44
5	Das t-J-Modell auf dem Dreiecksgitter	47
5.1	Effektiver Hamiltonoperator	49
5.1.1	Bornsche Näherung für die Selbstenergie	52
5.2	Exakte Diagonalisierung für ein Loch	55
5.2.1	Grundzustandsenergien für ein Loch	55
5.2.2	Energiedispersion für ein Loch	57
5.2.3	Spektrale Dichten für ein Loch	58

5.3	Lochwellenfunktion für klassische Spinhintergründe	58
5.4	Spinkorrelationen des t - J -Modells	62
5.5	Mehrere Löcher im t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter	66
5.5.1	Dispersion für mehrere Löcher	66
5.5.2	Bindungsenergien der Löcher	69
5.5.3	Lochkorrelationsfunktionen	71
5.5.4	Dreilochkorrelationen	73
5.5.5	Vierlochkorrelationen	76
5.5.6	Elektronische Impulsverteilung	76
6	Verdünnte magnetische Systeme	79
7	Zusammenfassung	85
A	Berechnung der Greenschen Funktion	89
B	Semiklassische Entwicklung	91
C	Exakte Diagonalisierung	95
C.1	Bestimmung von Energieeigenwerten	95
C.2	Eigenvektoren	96
C.3	Spektrale Dichte	96
C.4	Hashing der S_z -Basis	97
C.5	Hamiltonmatrix für mehrere Löcher	98
C.5.1	Parallelisierung der Matrixmultiplikation	99
D	Gitterzellen und Brillouinzonen	101
E	Energieeigenwerte für das Dreiecksgitter	105
	Literaturverzeichnis	109

Abbildungsverzeichnis

2.1	Zustandsraum der kohärenten Zustände mit einem Loch	19
2.2	Trotterzerlegung der Zustandssumme	21
3.1	Néelzustand für das Quadratgitter	23
3.2	Plaketteneinteilung für die hyperkubischen Gitter	24
4.1	Quasiteilchengewicht des linearen t - J -Modells für $t = 0$ als Funktion der Kettenlänge	41
4.2	Quasiteilchengewicht des linearen t - J -Modells für $L = 24$	43
4.3	Quasiteilchengewicht des eindimensionalen t - J -Modells für verschiedene System- größen	43
4.4	Krümmung des Quasiteilchengewichtes bei $t = 0$ für das lineare t - J -Modell	44
5.1	Das Dreiecksgitter und die 120° -Struktur	48
5.2	Zustandsdichte eines Elektrons auf dem Quadrat- und dem Dreiecksgitter	48
5.3	Spinwellenenergie des Dreiecksgitterantiferromagneten	51
5.4	Selbstenergiendiagramme	53
5.5	Die Brillouinzone für das Dreiecksgitter	53
5.6	Spektrale Dichten eines Loches aus SCBA für ein Loch für $N = 36 \times 36$	54
5.7	Einfluß des Gesamtspins auf die Locherzeugungsenergien	56
5.8	Einlochenergiedisersion auf dem Dreiecksgitter	57
5.9	Vergleich der spektralen Dichten für $N = 21$	59
5.10	Magnetische Polaronen auf dem Dreiecksgitter	60
5.11	Polarongröße als Funktion von t/J	61
5.12	Spinkorrelationen des Einlochgrundzustandes für $N = 27$	64
5.13	Spinkorrelationen für $N = 21$ als Funktion von t/J	65
5.14	Basiszustände für das Dreiecksgitter	65
5.15	Paarbindungsenergie $E_{0h+2h-2*1h}$ für das Dreiecksgitter- t - J -Modell	70
5.16	Mehrlochbindungsenergien für das Dreiecksgitter- t - J -Modell	70
5.17	Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ für das Dreiecksgitter- t - J -Modell	72
5.18	Lochkorrelationsfunktion $g(r)$ für $N = 27$	72
5.19	Mittlerer Abstand $\langle r \rangle$ zweier Löcher für das Dreiecksgitter- t - J -Modell	73
5.20	Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit für gleichseitige Dreilochkonfigurationen . . .	74
5.21	Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit für weitere Lochkonfigurationen	75
5.22	Summe der Lochdistanzen für drei und vier Löcher als Funktion von t/J	75
5.23	Elektronenimpulsverteilung für zwei Löcher	78

6.1	Grundzustandsenergien pro Spin für den verdünnten Dreiecksgitterantiferromagneten	81
6.2	Spinstrukturfaktoren $Y(\mathbf{k})$ des verdünnten Dreiecksgitterantiferromagneten für $N = 21$ und $N = 27$	82
6.3	Maximum des Spinstrukturfaktors des verdünnten Dreiecksgitterantiferromagneten	82
C.1	Zerlegung eines Basiszustandes in Loch- und Spinanteil	98
D.1	Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 9$	101
D.2	Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 12$	102
D.3	Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 21$	102
D.4	Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 24$	102
D.5	Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 27$	103

Tabellenverzeichnis

5.1	Grundzustandsenergien für ein Loch auf dem Dreiecksgitter	56
5.2	Grundzustandsenergien für $N = 27$ und $J = 0$	66
5.3	Grundzustandsenergien für $N = 21$ und $J = 0$	67
5.4	Grundzustandsimpulse für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter	68
5.5	Gewichtsfaktoren für die Dreilochkonfigurationen	74
C.1	Beispiel für die Lin-Kodierung	98
C.2	Dimensionen der Zustandsräume	99
E.1	Grundzustandsenergien für $n_h = 0$	105
E.2	Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 1$	105
E.3	Energieeigenwerte für $N = 27$ und $n_h = 1$	106
E.4	Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 2$	106
E.5	Energieeigenwerte für $N = 27$ und $n_h = 2$	107
E.6	Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 3$	107
E.7	Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 4$	108
E.8	Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 5$	108

Kapitel 1

Einleitung

In der vorliegenden Arbeit werden an Hand des t - J -Modells Teilaspekte der Physik stark korrelierter Elektronensysteme untersucht. Das t - J -Modell ergibt sich aus dem allgemeineren Hubbardmodell im Grenzfall sehr starker intraatomarer Coulombwechselwirkung. Es beschreibt die Bewegung von Elektronen auf diskreten Gittern in Form eines tight-binding- Modells (t ist die Hüpfamplitude). Der Annahme einer starken intraatomaren Wechselwirkung wird durch die Bedingung Rechnung getragen, daß jeder Gitterplatz mit höchstens einem Elektron besetzt sein kann. Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen wird durch eine antiferromagnetische Heisenbergkopplung der Elektronenspins beschrieben. ($J > 0$ ist die Austauschkonstante). Im ersten Teil der Arbeit wird das Modell auf hyperkubischen Gittern, insbesondere auf der linearen Kette und auf dem Quadratgitter, untersucht. Der zweite Teil befaßt sich mit dem t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter.

Das t - J -Modell auf hyperkubischen Gittern ist in vielen Arbeiten mit unterschiedlichen Methoden intensiv untersucht worden ([1] und darin enthaltene Referenzen). Auf dem Quadratgitter dient das Modell als eine vereinfachte Beschreibung der Ladungsträgerdynamik in den Kupferoxidebenen der hochtemperatursupraleitenden Kuprate. Aus diesem Grunde hat dieses Modell besonders viel Aufmerksamkeit gefunden. In vielen, auch neueren Untersuchungen zum t - J -Modell steht die Frage im Vordergrund, ob das durch dieses Modell beschriebene Elektronensystem die Eigenschaften einer Fermiflüssigkeit im Sinne der Landauschen Fermiflüssigkeitstheorie besitzt oder ob es sich qualitativ anders verhält [2, 3, 4]. Für den Fall des Quadratgitters ist die Beantwortung dieser Frage insbesondere im Hinblick auf die Interpretation von ARPES-Experimenten (Angle Resolved Photoemission Spectroscopy) an den Kupraten [5, 6] von hohem Interesse.

In einer räumlichen Dimension konnte diese Frage am supersymmetrischen Punkt $J = 2t$ des t - J -Modells mit chemischem Potential $\mu = -J$ exakt beantwortet werden. Das Modell kann an diesem Punkt mittels des Bethe-Ansatzes gelöst werden, und man findet, daß sich das Elektronensystem wie eine Luttingerflüssigkeit verhält. Durch numerische Untersuchungen konnten Ogata et al. [7] ein entsprechendes Verhalten in einem weiten Parameterbereich des eindimensionalen t - J -Modells verifizieren.

Eine Luttingerflüssigkeit ist dadurch charakterisiert, daß die Besetzungszahl $n_{\mathbf{k}}$ der Impulszustände im Gegensatz zur normalen Fermiflüssigkeit am Fermiimpuls \mathbf{k}_f keine Unstetigkeit aufweist, sondern dort mit einem Potenzgesetz $n_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k}_f} + \text{sign}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_f)|\mathbf{k} - \mathbf{k}_f|^\alpha$ variiert. Das singuläre Verhalten an der Fermikante steht in unmittelbarem Zusammenhang mit dem Verschwinden des Quasiteilchengewichtes beim Fermiimpuls [8] und kann auf die sogenannte Orthogonalitätskatastrophe [9] zurückgeführt werden. Die numerischen Ergebnisse von Ogata et al. [7] konnten von Sorella und Parola [10] im Grenzfall verschwindender Hüpfamplitude durch analytische Rechnungen bestätigt werden. Sorella und Parola zeigen mittels Bosonisierung des Modells in einer Dimension, daß für $t = 0$ das

Quasiteilchengewicht eines Lochs im t - J -Modell im thermodynamischen Limes mit einer Potenz der Systemgröße verschwindet.

Für zwei und mehr Dimensionen ist die Frage nach den Eigenschaften des Elektronensystems des t - J -Modells, Fermiflüssigkeit oder Nicht-Fermiflüssigkeit, bis heute nicht schlüssig beantwortet. Sheng und Koautoren argumentieren, daß das Verschwinden des Quasiteilchengewichtes eines Lochs im t - J -Modell auf den sogenannten Phase-String-Effekt zurückzuführen und nicht auf eine Dimension beschränkt ist. Demnach sollte das Elektronensystem dieses Modells auch in zwei und mehr Dimensionen Nicht-Fermiflüssigkeitsverhalten zeigen. Des weiteren finden Putikka und Koautoren [3] mittels einer Hochtemperaturentwicklung, daß das Luttinger-Theorem [11] für das t - J -Modell auf dem Quadratgitter nicht erfüllt ist. Letzteres besagt, daß für eine Fermiflüssigkeit das Volumen, das von der Fermifläche eingeschlossen wird, bei Einschalten einer perturbativ behandelbaren zusätzlichen Wechselwirkung sich nicht ändert. Eine Verletzung dieses Theorems impliziert, daß die Wechselwirkung des t - J -Modells nicht perturbativ behandelbar ist, und läßt deshalb ebenfalls auf Nicht-Fermiflüssigkeitseigenschaften des Modells schließen. Im Gegensatz dazu kommen Chernyshev und Koautoren [4] durch Extrapolation von Resultaten, die mittels exakter Diagonalisierung von Systemen mit bis zu 32 Plätzen auf dem Quadratgitter gewonnen wurden, zu dem Schluß, daß das Quasiteilchengewicht eines Lochs auf dem Quadratgitter im thermodynamischen Limes endlich bleibt und mithin kein Hinweis auf Nicht-Fermiflüssigkeitsverhalten vorliegt.

Motiviert durch hier skizzierte offene Frage nach dem Fermiflüssigkeitsverhalten des Elektronensystems des t - J -Modells wird im ersten Teil der vorliegenden Arbeit ein neuer Zugang zur Beantwortung dieser Frage entwickelt. Es wird eine semiklassische Näherung zur Berechnung des Quasiteilchengewichtes eines Lochs vorgeschlagen. Das hier vorgestellte Verfahren ist im Gegensatz zu früheren Methoden [10] nicht auf eine Dimension beschränkt. Zunächst wird die Ein-Loch Green-sche Funktion mittels kohärenter Zustände, welche das Doppelbesetzungsverbot eines Gitterplatzes für beliebigen Spin S exakt implementieren, in eine Pfadintegraldarstellung überführt. Das Pfadintegral wird dann nach Potenzen der inversen Spinlänge $\frac{1}{S}$ und nach Potenzen der Hüpfamplitude t entwickelt. Die erhaltenen analytischen Ergebnisse werden mit Ergebnissen aus exakter Diagonalisierung verglichen.

Der zweite Teil der Arbeit beschäftigt sich mit dem t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter. Bei Halbfüllung, d.h. wenn sich auf jedem Platz genau ein Elektron aufhält, reduziert sich das t - J -Modell auf das antiferromagnetische Heisenbergmodell. Wie im Falle des Quadratgitters ist der Grundzustand auch auf dem Dreiecksgitter langreichweitig geordnet [12, 13]. Die Spinerwartungswerte auf benachbarten Plätzen des Dreiecksgitters schließen einen Winkel von 120° ein (120° -Struktur). Qualitative Überlegungen lassen aufgrund dieser nicht-kollinearen Spinstruktur ein anderes Verhalten der Lochdynamik erwarten als im Falle der kollinearen Ordnung auf hyperkubischen Gittern. Insbesondere ist zu vermuten, daß im Gegensatz zum Fall kollinearer Ordnung die Lochdynamik stark vom Vorzeichen der Hüpfamplitude abhängt.

Ausgehend von den im ersten Teil der Arbeit eingeführten kohärenten Zuständen wird zunächst ein effektiver Hamiltonoperator für ein Loch im t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter hergeleitet, der die Wechselwirkung der Magnonen der geordneten 120° Struktur mit dem Loch in führender Ordnung einer semiklassischen Entwicklung korrekt wiedergibt [14]. Ein ähnlicher Hamiltonoperator findet sich in einer Arbeit von Azzouz und Dombre [15] zum t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter. Der von diesen Autoren vorgeschlagene Hamiltonoperator verletzt jedoch die Rotationsinvarianz des ursprünglichen t - J -Modells, welches zu unphysikalischen Kopplungen zwischen den Goldstone-Moden des Spinsystems und dem Loch führt. Mit Hilfe des hier hergeleiteten effektiven Hamiltonoperators werden in selbstkonsistenter Bornscher Näherung (SCBA) die Energiedispersion und die spektrale Dichte des Lochs berechnet und mit Ergebnissen verglichen, die durch exakte Diagonalisierung kleiner Systeme

gewonnen wurden.

Auf dem Quadratgitter kann ein Loch im Rahmen des t - J -Modells als ein Spinpolaron beschrieben werden: das Loch erzeugt in seiner Umgebung eine ferromagnetische Polarisation des ansonsten antiferromagnetisch geordneten Grundzustandes [16]. Die Frage, ob sich ein solches Spinpolaron im t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter ausbildet, wird in Kap. 5.3 zunächst näherungsweise für einen klassischen Spinhintergrund und anschließend (Kap. 5.4) mittels numerischer Diagonalisierung kleiner Systeme exakt untersucht. Es zeigt sich, daß sich für negative Hüpfamplitude ($t < 0$) ein Spinpolaron ähnlich wie auf dem Quadratgitter ausbildet, für positive Hüpfamplitude ($t > 0$) hingegen nicht. Im Hinblick auf die Frage, ob es im Rahmen des t - J -Modells auf dem Dreiecksgitter zu einer Phasenseparation der Löcher kommt, werden die Korrelationen und andere Eigenschaften von zwei und mehr Löchern numerisch bestimmt. Abschließend werden numerische Ergebnisse zum Einfluß zufällig verteilter Löcher auf die Grundzustandsenergie und auf die magnetische Ordnung des antiferromagnetischen Heisenbergmodells auf dem Dreiecksgitter vorgestellt.

Kapitel 2

Kohärente Zustände für das t - J -Modell

In seiner ursprünglichen Form wird das t - J -Modell durch den Hamiltonoperator

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(P c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} P + h.c. \right) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) \quad (2.1)$$

beschrieben. Hier sind $c_{i\sigma}^\dagger$, $c_{i\sigma}$ die Erzeuger bzw. Vernichter eines Spin-1/2 Teilchens am Gitterplatz i mit Spinprojektion $\sigma = \pm 1/2$, und $n_i = \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ ist die Teilchendichte. Die Spindichte $\vec{S}_i = \sum_{\alpha, \beta} c_{i\alpha}^\dagger (\vec{\sigma})_{\alpha\beta} c_{i\beta}$ wird durch Pauli-Matrizen $\vec{\sigma}$ beschrieben. Der Projektor P projiziert auf Zustände ohne Doppelbesetzung irgendeines Gitterplatzes. In der vorliegenden Arbeit wird das Modell (2.1) auf Teilchen mit beliebigem Spin S verallgemeinert, um eine semiklassische Entwicklung der zu untersuchenden physikalischen Größen zu ermöglichen. Die Details dieser Verallgemeinerung werden weiter unten beschrieben. Mittels kohärenter Zustände wird das erhaltene Modell in ein Pfadintegral überführt. Wesentlich für das weitere Vorgehen ist die Beschreibung der Spinfreiheitsgrade des Modells durch $SU(2)$ -symmetrische Matrizen. Dadurch wird eine systematische Entwicklung auch des Hüpfers des t - J -Modells nach kleinen Abweichungen vom klassisch geordneten Spingrundzustand möglich. In der Beschreibung der Spinfreiheitsgrade durch den Vektor der Untergittermagnetisierung, wie sie z.B. dem nichtlinearen σ -Modell für den Heisenbergantiferromagneten zugrunde liegt, ist eine solche Entwicklung des Hüpfers nicht ohne weiteres möglich.

2.1 Kohärente Zustände ohne Loch

Es werden in diesem Abschnitt zuerst kohärente Zustände für einen Spin mit Länge S eingeführt [17]. Die $SU(2)$ -symmetrische Matrix

$$g = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

mit $a^* a + b^* b = 1$ beschreibt die Spinfreiheitsgrade. Die komplexen Einträge a und b werden als Koeffizienten für die kohärenten Zustände mit Spin S verwendet [18]

$$|\Omega\rangle_S = \frac{(ae^\dagger + bd^\dagger)^{2S}}{\sqrt{(2S)!}} |0\rangle_B. \quad (2.3)$$

Bei d^\dagger , e^\dagger handelt es sich um Erzeugungsoperatoren für Bosonen, erstmals eingeführt von Schwinger [19], die aus dem Vakuumzustand der Bosonen $|0\rangle_B$ einen Spin erzeugen. Die Spinoperatoren haben die folgende Darstellung $S^z = \frac{1}{2}(e^\dagger e - d^\dagger d)$, $S^+ = S^x + iS^y = e^\dagger d$ und $S^- = (S^+)^{\dagger}$ und

erfüllen die Kommutatorrelationen $[S^j, S^k] = i\epsilon_{jkl}S^l$. Die Gesamtzahl der Bosonen $d^\dagger d + e^\dagger e = 2S$ legt die Länge des betrachteten Spins fest. Die Koeffizienten a, b lassen sich durch die Eulerwinkel $(\theta, \phi, \psi) \in [0, \pi[\times [0, 2\pi[\times [0, 4\pi[$ parametrisieren mit

$$a = e^{-\frac{i}{2}(\psi+\phi)} \cos \frac{\theta}{2} \quad (2.4)$$

$$b = e^{-\frac{i}{2}(\psi-\phi)} \sin \frac{\theta}{2} \quad (2.5)$$

und

$$g = e^{-\frac{i}{2}\psi\sigma^z} e^{\frac{i}{2}\theta\sigma^y} e^{-\frac{i}{2}\phi\sigma^z}. \quad (2.6)$$

Es gilt dann

$$\begin{aligned} {}_s\langle \Omega | S^z | \Omega \rangle_s &= S \cos \theta \\ {}_s\langle \Omega | S^\pm | \Omega \rangle_s &= S e^{\pm i\phi} \sin \theta. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Die Winkel θ und ϕ charakterisieren die Richtung des Spins, während ψ die Phase des Zustandes festlegt. Die spezielle Wahl $g = \mathbf{1}$ für die kohärenten Zustände beschreibt einen maximal polarisierten Spin mit $S^z = S$. Im folgenden wird dieser Spinzustand in Nordpolrichtung durch $|\uparrow\rangle$ bezeichnet.

Der Überlapp zweier kohärenter Zustände ergibt sich zu

$${}_s\langle \Omega | \tilde{\Omega} \rangle_s = (a^* \tilde{a} + b^* \tilde{b})^{2S}, \quad (2.8)$$

und der Term der Wirkung, der die Zeitentwicklung eines einzelnen Spin S beschreibt, ist

$${}_s\langle \Omega | \partial_\tau \tilde{\Omega} \rangle_s = 2S(a^* \tilde{a} + b^* \tilde{b})^{2S-1} (a^* \partial_\tau \tilde{a} + b^* \partial_\tau \tilde{b}). \quad (2.9)$$

Die Zustände erlauben die Darstellung der Identität in dem $2S + 1$ -dimensionalen Zustandsraum als

$$\frac{2S+1}{16\pi^2} \int d\Omega |\Omega\rangle_{ss} \langle \Omega| = \frac{2S+1}{16\pi^2} \int_0^{4\pi} d\psi \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |\Omega\rangle_{ss} \langle \Omega| = \mathbf{1}_{2S+1}. \quad (2.10)$$

Aus (2.8) und (2.10) folgt, daß die Zustände normiert und zugleich übervollständig sind, d.h. sie sind insbesondere nicht orthogonal.

2.2 Kohärente Zustände mit einem Loch

Der Zustandsraum der Modelle, die in dieser Arbeit diskutiert werden, besteht an jedem Platz aus zwei separaten Unterräumen (vgl. [17]):

- kein Loch und ein Spin-S-Teilchen und
- ein Loch und ein Spin-($S - \frac{1}{2}$)-Teilchen.

An jedem Platz kann maximal ein Loch vorkommen, das durch einen spinlosen fermionischen Erzeuger f^\dagger aus dem fermionischen Vakuum $|0\rangle_F$, das kein Loch enthält, erzeugt wird. Die Lochoperatoren f^\dagger und f besitzen die folgenden Vertauschungsrelationen: $\{f, f^\dagger\} = 1$ und $\{f, f\} = 0$. Der Zustandsraum an jedem Ort ist in Abhängigkeit von der Lochanzahl $2S + 1$ bzw. $2S$ -dimensional.

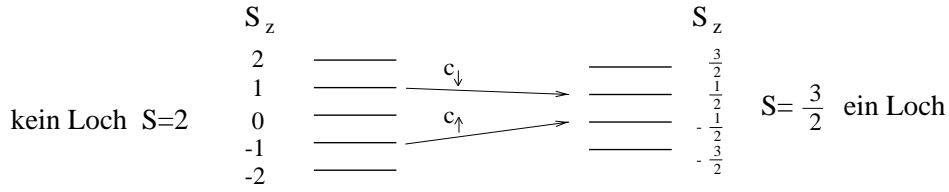


Abbildung 2.1: Zustandsraum der kohärenten Zustände mit einem Loch in der S^z -Basis am Beispiel $S = 2$

Im Spezialfall $S = \frac{1}{2}$ gibt es im halbgefüllten Zustand zwei Zustände mit Spin $S^z = \pm \frac{1}{2}$, während der Lochzustand durch einen einzigen Zustand beschrieben wird. Hier erkennt man deutlich eine Reduktion des Zustandsraumes im Vergleich mit dem Hubbard-Modell [20]. Dort kann der Zustandsraum an einem Ort durch vier Basiszustände $|0\rangle_H, c_{\uparrow}^{\dagger}|0\rangle_H, c_{\downarrow}^{\dagger}|0\rangle_H$ und $c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow}^{\dagger}|0\rangle_H$ beschrieben werden. Dabei erzeugt c_{σ}^{\dagger} ein Elektron mit Spin $\sigma = \uparrow$ bzw. $\sigma = \downarrow$ aus dem Vakuumzustand $|0\rangle_H$ ohne Elektronen. Im t - J -Modell ist dieses Produkt zweier Eielektronenzustände nicht möglich, da der Zustand mit zwei Elektronen verboten ist.

Der Spezialfall $S = \frac{1}{2}$ kann auf den $4S + 1$ -dimensionalen Zustandsraum verallgemeinert werden (siehe Abbildung 2.1). Die auf diesen Zustandsraum eingeschränkten physikalischen Operatoren sind

$$c_{\uparrow} = ef^{\dagger}, \quad c_{\downarrow} = df^{\dagger}, \quad \vec{S} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{\dagger}d + d^{\dagger}e \\ i(d^{\dagger}e - e^{\dagger}d) \\ e^{\dagger}e - d^{\dagger}d \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Dabei sind e^{\dagger} und d^{\dagger} die oben definierten Bose-Erzeuger, und f^{\dagger} ist ein Fermionenerzeuger. Der betrachtete Zustandsraum wird erhalten, wenn die Zwangsbedingung $d^{\dagger}d + e^{\dagger}e + f^{\dagger}f = 2S$ beachtet wird. Die Operatoren \vec{S} erfüllen Spin-Vertauschungsregeln und verlassen die jeweiligen Teilräume S und $S - \frac{1}{2}$ nicht. Die Operatoren $c_{\uparrow, \downarrow}^{\dagger}$ vermitteln zwischen den beiden Teilräumen, wie in Bild 2.1 gezeigt. c_{\downarrow}^{\dagger} erzeugt beispielsweise aus einem Zustand mit einem Loch und Spinprojektion S_z einen Zustand ohne Loch und mit $S_z - \frac{1}{2}$.

Bei $S = \frac{1}{2}$ erfüllen sie fermionische Vertauschungsregeln in dem *eingeschränkten* Zustandsraum $|0\rangle, c_{\uparrow}^{\dagger}|0\rangle, c_{\downarrow}^{\dagger}|0\rangle$.

Die kohärenten Zustände an jedem Platz j werden nun wie folgt definiert:

$$|\omega_j\rangle = \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2}\right) \left(|\Omega_j\rangle_s |0\rangle_F + \eta_j |\Omega_j\rangle_{s-\frac{1}{2}} f_j^{\dagger} |0\rangle_F\right). \quad (2.12)$$

Die η_j und η_j^* sind Grassmannvariablen. Für beliebige Grassmannvariablen η_1 und η_2 gilt $\eta_1 \eta_2 = -\eta_2 \eta_1$, $(\eta_1 \eta_2)^* = \eta_2^* \eta_1^*$ und $(\eta^*)^* = \eta$ [21].

Die kohärenten Zustände mit einem Loch sind normiert und übervollständig. Wie man aus dem Überlapp

$$\langle \omega_j | \tilde{\omega}_j \rangle = \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2}\right) \left(1 - \frac{\tilde{\eta}_j^* \tilde{\eta}_j}{2}\right) \left({}_s \langle \Omega_j | \tilde{\Omega}_j \rangle_s + \eta_j^* \tilde{\eta}_j \quad {}_{s-\frac{1}{2}} \langle \Omega_j | \tilde{\Omega}_j \rangle_{s-\frac{1}{2}}\right) \quad (2.13)$$

sieht, sind zwei unterschiedliche kohärente Zustände nicht orthogonal. Die Zustände an einem Ort werden unabhängig von der Lochanzahl durch die gleichen Winkel θ, ϕ und ψ beschrieben. Die Spinlänge ist dagegen von der Lochzahl abhängig. Mit dieser Darstellung wird eine getrennte Beschreibung der Ladungs- und Spinfreiheitsgrade erreicht.

Die Zustände erlauben die Darstellung der Identität in diesem $4S + 1$ -dimensionalen Zustandsraum

$$\int d\omega_j |\omega_j\rangle \langle \omega_j| = \frac{2S}{16\pi^2} \int d\Omega_j \int d\eta_j^* d\eta_j e^{-\frac{1}{2S} \eta_j^* \eta_j} |\omega_j\rangle \langle \omega_j| = \mathbf{1}_{(2S+1, 2S)}. \quad (2.14)$$

Die kohärenten Lochzustände für mehrere Plätze sind dann durch Produktzustände

$$|\omega\rangle = \prod_j |\omega_j\rangle \quad (2.15)$$

gegeben. Die Vollständigkeitsrelation verallgemeinert sich dann zu

$$\int d\omega |\omega\rangle \langle \omega| = \left(\prod_j d\omega_j \right) |\omega\rangle \langle \omega| = \mathbf{1}. \quad (2.16)$$

Die Elektronenerzeuger und -vernichter und die Spinoperatoren haben in den kohärenten Zuständen die folgenden Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle \omega | c_{j\uparrow} | \tilde{\omega} \rangle &= -\eta_j^* \left(1 - \frac{\tilde{\eta}_j^* \tilde{\eta}_j}{2} \right) \sqrt{2S} \tilde{a}_j \quad (a_j^* \tilde{a}_j + b_j^* \tilde{b}_j)^{2S-1} \\ \langle \omega | c_{j\downarrow} | \tilde{\omega} \rangle &= -\eta_j^* \left(1 - \frac{\tilde{\eta}_j^* \tilde{\eta}_j}{2} \right) \sqrt{2S} \tilde{b}_j \quad (a_j^* \tilde{a}_j + b_j^* \tilde{b}_j)^{2S-1} \\ \langle \omega | c_{j\uparrow}^\dagger | \tilde{\omega} \rangle &= -\tilde{\eta}_j \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2} \right) \sqrt{2S} a_j^* \quad (a_j^* \tilde{a}_j + b_j^* \tilde{b}_j)^{2S-1} \\ \langle \omega | c_{j\downarrow}^\dagger | \tilde{\omega} \rangle &= -\tilde{\eta}_j \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2} \right) \sqrt{2S} b_j^* \quad (a_j^* \tilde{a}_j + b_j^* \tilde{b}_j)^{2S-1}. \quad (2.17) \\ \langle \omega | S_j^z | \omega \rangle &= \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2S} \right) S \cos \theta_j \\ \langle \omega | S_j^+ | \omega \rangle &= \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2S} \right) S e^{i\phi_j} \sin \theta_j \\ \langle \omega | S_j^- | \omega \rangle &= \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2S} \right) S e^{-i\phi_j} \sin \theta_j. \quad (2.18) \end{aligned}$$

Der Einheitsvektor $\vec{n}_{3,j}$ in Richtung des Spinerwartungswertes kann direkt durch die SU(2)-Matrizen g ausgedrückt werden

$$\langle \omega | \vec{S}_j | \omega \rangle = \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2S} \right) S \vec{n}_{3,j} = \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2S} \right) \frac{S}{2} \text{Sp}(\vec{\sigma} g_j^{-1} \vec{\sigma}^T g_j). \quad (2.19)$$

Eine Multiplikation von g_j mit $g' \in \text{SU}(2)$ von rechts bewirkt eine Drehung von $\vec{n}_{3,j}$.

2.3 Zustandssumme in Pfadintegraldarstellung

Für die Darstellung der Zustandssumme eines quantenmechanischen Systems bei einer Temperatur T , gegeben durch $Z = \text{tr} e^{-\beta H}$ mit $\beta = \frac{1}{T}$, wird eine imaginäre Zeitachse in Richtung der inversen Temperatur β eingeführt und eine Trotterzerlegung der Zustandssumme vorgenommen. Dazu wird die imaginäre Zeitachse in M Intervalle $[\tau, \tau + \Delta\tau[$ der identischen Zeitdauer $\Delta\tau = \frac{\beta}{M}$ (s. Abb. 2.3) eingeteilt und die Exponentialfunktion in M Faktoren $e^{-\Delta\tau H}$ aufgespalten. Zwischen die Faktoren wird die Vollständigkeitsrelation (2.16) des Zustandsraumes zu den Zeitpunkten τ eingefügt. Die



Abbildung 2.2: Einteilung der imaginären Zeitachse von 0 bis β in M Intervalle der Länge $\Delta\tau$ für die Trotterzerlegung

entstehenden Matrixelemente $\langle \omega_\tau | e^{-\Delta\tau H} | \omega_{\tau+1} \rangle$ können nun im Grenzfalle $M \rightarrow \infty$ nach $\Delta\tau$ entwickelt werden. Auf diese Weise erhält man eine Pfadintegraldarstellung der Zustandssumme

$$Z = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\prod_{\tau=0}^{\tau=M-1} \int d\omega_\tau \right) \prod_{\tau=0}^{\tau=M-1} \langle \omega_\tau | e^{-\Delta\tau H} | \omega_{\tau+1} \rangle = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{\tau=0}^{\tau=M-1} \left(\int d\omega_\tau e^{\Delta\tau(\omega_\tau \partial_\tau - H|\omega_\tau)} \right). \quad (2.20)$$

Der Zustand $|\omega_M\rangle$ muß so mit $|\omega_0\rangle$ identifiziert werden, daß bei bosonischen Variablen periodische Randbedingungen und bei fermionischen antiperiodische Randbedingungen verwendet werden.

Der Zeitentwicklungsterm $\langle \omega | \partial_\tau \tilde{\omega} \rangle = \frac{\langle \omega | \tilde{\omega} \rangle - \langle \omega | \omega \rangle}{\Delta\tau}$ hat bis zur Ordnung $(\Delta\tau)^0$ unter der Annahme glatter Pfade in Zeitrichtung im Pfadintegral die folgende Darstellung mit der Bezeichnung $\tilde{\eta}_j = \eta_j(\tau + \Delta\tau)$:

$$\langle \omega | \partial_\tau \tilde{\omega} \rangle \Big|_{\omega \rightarrow \tilde{\omega}} = \sum_j \left[\frac{1}{\Delta\tau} \eta_j^* (\tilde{\eta}_j - \eta_j) - \frac{1}{2\Delta\tau} (\tilde{\eta}_j^* \tilde{\eta}_j - \eta_j^* \eta_j) + (2S - \eta_j^* \eta_j) (a_j^* \partial_\tau a_j + b_j^* \partial_\tau b_j) \right] \Big|_{\omega \rightarrow \tilde{\omega}}. \quad (2.21)$$

Der erste Term enthält den kinetischen Term eines Loches, während der zweite Term eine totale zeitliche Ableitung ist und daher verschwindet. Der letzte Beitrag in (2.21) bestimmt die Zeitentwicklung der Spinfreiheitsgrade, die um die Spinlänge korrigiert sind. Dieser kann in der folgenden Weise durch die $SU(2)$ -Matrizen g_j dargestellt werden:

$$a_j^* \partial_\tau a_j + b_j^* \partial_\tau b_j = \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma^z (\partial_\tau g_j) g_j^{-1}) \equiv iA_{\tau,j}^z. \quad (2.22)$$

Der Integrand in (2.20) läßt sich in ein Polynom der Variablen η und η^* entwickeln. Zur Zustandssumme trägt nur das Polynom bei, das jede Grassmannvariable genau einmal enthält. Stammt die Grassmannvariable zu einem Ort j und der Zeitscheibe τ aus dem Integrationsmaß $d\omega_\tau$ (2.16), $2S e^{-\frac{1}{2S} \eta_{j,\tau}^* \eta_{j,\tau}} = 2S - \eta_{j,\tau}^* \eta_{j,\tau}$, oder aus der Zeitableitung der Grassmannvariable in (2.21), $e^{-\eta_{j,\tau}^* \eta_{j,\tau}}$, so können aus $\Delta\tau L(\tau) = \langle \omega_\tau | \Delta\tau \partial_\tau + \sum_j \eta_{j,\tau}^* \eta_{j,\tau} - \Delta\tau H | \omega_\tau \rangle$ nur Terme ohne Grassmannvariablen in der Zustandssumme enthalten sein. Dieses entspricht einem vorhandenen Spin S an diesem Ort. Ein Loch wird dagegen durch die Terme in $e^{\Delta\tau L(\tau)}$, die $\eta_{j,\tau}^*$ oder $\eta_{j,\tau}$ aufweisen, beschrieben. Das Integrationsmaß liefert dann keine Beiträge in den Grassmannvariablen. Da die zu betrachtenden Hamiltonoperatoren die Lochanzahl erhalten, ermöglichen die obigen Zusammenhänge eine Zerlegung der Zustandssumme in Summanden zu fixierter Lochanzahl

$$Z = Z^{0-hole} + Z^{1-hole} + Z^{2-hole} + \dots, \quad (2.23)$$

aus denen die effektiven Lagrangefunktionen zu fester Lochanzahl abgelesen werden können. Diese Zerlegung spiegelt die Erhaltung der Lochanzahl im t - J -Modell wieder. Der Einlochanteil eines Modells mit N Plätzen zu einer Zeit τ setzt sich zum Beispiel aus $N - 1$ Beiträgen für die Grassmannvariablen aus dem Integrationsmaß und dem fehlenden Term am Ort des Loches aus $L(\tau)$ zusammen.

Für den Hamiltonoperator des t - J -Modells (2.1) ergibt sich bis zur Ordnung $(\Delta\tau)^0$ durch die Einsetzung der Erwartungswerte der Operatoren (2.17) und (2.18) zu

$$\langle \omega_\tau | H | \omega_\tau \rangle = 2tS \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\eta_j^* \eta_i (g_j g_i^{-1})_{\uparrow\uparrow} + \eta_i^* \eta_j (g_i g_j^{-1})_{\uparrow\uparrow} \right] \quad (2.24)$$

$$+ \frac{JS^2}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \frac{\eta_i^* \eta_i}{2S} \right) \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2S} \right) \left[\text{Sp}(\vec{\sigma} g_i^{-1} \sigma^z g_i) \cdot \text{Sp}(\vec{\sigma} g_j^{-1} \sigma^z g_j) - 4 \right]. \quad (2.25)$$

Dabei stellt $\vec{n}_i \equiv \frac{1}{2} \text{Sp}(\vec{\sigma} g_i^{-1} \sigma^z g_i)$ einen Einheitsvektor in die Richtung der Winkel θ und ϕ dar. Der Faktor $1 - \frac{\eta_i^* \eta_i}{2S}$ bewirkt im Hamiltonoperator ein Reskalieren der Spinlänge um $1 - \frac{1}{2S}$ für Zustände mit einem Loch am Platz i . Der Heisenbergterm favorisiert für die Austauschkonstante $J > 0$ die antiparallele Ausrichtung benachbarter Spins. Die Summation im t - J -Modell bedeutet eine Summe über nächste Nachbarplätze i und j , die durch den zugrundeliegenden Gittertyp vorgegeben sind.

Das obere linke Matrixelement der $SU(2)$ -Matrix $g_j g_i^{-1}$ ist durch $(g_j g_i^{-1})_{\uparrow\uparrow}$ bezeichnet. Die $SU(2)$ -Matrix g_j dreht an dem Ort j , auf den das Loch hüpfert, den Spinerwartungswert zurück in Nordpolrichtung, während g_i^{-1} am Ausgangsort der Lochbewegung i den Spin in die Richtung rotiert, die durch die Winkel in g_i vorgegeben ist. Das Hüpfmatrixelement hat also den größten Betrag, wenn die Spineinstellungen parallel sind. Spinflipprozesse, bei denen Ausgangs- und Zielspin unterschiedliche Richtungen aufweisen, werden durch das Matrixelement $(g_j g_i^{-1})_{\uparrow\uparrow}$ in ihrem Gewicht in der Zustandssumme unterdrückt. Der Hüpferterm strebt danach, die durch den Heisenbergterm verursachte antiferromagnetische Ordnung in eine ferromagnetische Ordnung umzuwandeln.

In den Winkelvariablen θ , ϕ und ψ hat der Hamiltonoperator die folgende Darstellung:

$$\begin{aligned} \langle \omega_\tau | H | \omega_\tau \rangle = & 2tS \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\eta_j^* \eta_i e^{\frac{i}{2}(\psi_i - \psi_j)} \left(\cos\left(\frac{\phi_i - \phi_j}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_i - \theta_j}{2}\right) \right. \right. \\ & \left. \left. + i \sin\left(\frac{\phi_i - \phi_j}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_i + \theta_j}{2}\right) \right) + (i \leftrightarrow j) \right] \\ & + JS^2 \sum_{\langle i,j \rangle} h_i h_j [\cos(\phi_i - \phi_j) \sin\theta_i \sin\theta_j + \cos\theta_i \cos\theta_j - 1]. \quad (2.26) \end{aligned}$$

Hierbei wird die Abkürzung h_i für $1 - \frac{\eta_i^* \eta_i}{2S}$ verwendet. Der letzte Term der letzten Zeile von (2.26) reduziert sich für das t - J -Modell ohne bzw. mit einem Loch jeweils auf eine konstante Energie, die das physikalische Verhalten nicht beeinflusst. Daher wird dieser Term in den folgenden Kapiteln, die sich mit einem Loch im t - J -Modell befassen, weggelassen.

Die Formeln (2.20) zusammen mit (2.21) und (2.26) beschreiben die Pfadintegraldarstellung der Zustandssumme.

Kapitel 3

Kontinuumsmodell auf hyperkubischen Gittern

3.1 Plaketteneinteilung auf hyperkubischen Gittern

Hyperkubische Gitter in d räumlichen Dimensionen sind bipartite Gitter mit Koordinationszahl $2d$. Der klassische Grundzustand des Heisenbergantiferromagneten ohne Loch ist ein langreichweitig geordneter Néel-Grundzustand mit antiparallel ausgerichteten Nachbarspins (s. Figur 3.1). Die Spins einer Richtung definieren jeweils eines der beiden Untergitter A bzw. B, und der Grundzustand besitzt eine globale Drehsymmetrie $O(3)$.

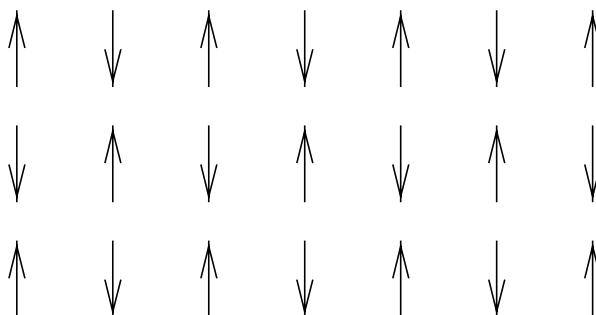


Abbildung 3.1: Die Spinanordnung des klassischen Grundzustandes für das t - J -Modell auf dem Quadratgitter

Für die Beschreibung des t - J Modells bei tiefen Temperaturen wird im folgenden angenommen, daß in der Zustandssumme die antiferromagnetischen Korrelationen für benachbarte Plätze dominieren. Das Gitter wird in Plaketten mit zwei benachbarten Plätzen eingeteilt, wie in Skizze 3.2 für $d = 2$ gezeigt. Die durchgezogenen Linien zeigen die Bindungen innerhalb der Plaketten, die unterbrochenen die Bindungen zwischen verschiedenen Plaketten. In der Zeichnung sind die nächsten Nachbarn des B-Spins der Plakette j und die zugehörigen Abstandsvektoren \vec{d}_l ($l = 0, \dots, 2d - 1$) der Länge einer Gitterkonstanten a_L eingezeichnet. Der Index $l = 0$ repräsentiert immer den Vektor zum A-Spin auf der gleichen Plakette j ; stets gilt $\vec{d}_1 = -\vec{d}_0$. Die Orientierung der Plaketten kann in d -Richtungen für das gesamte Gitter einmal frei gewählt werden.

Für jede Plakette j werden Intraplakettenvariablen

$$M_j \equiv g_{j,B} g_{j+d_0,A}^{-1} \quad (3.1)$$

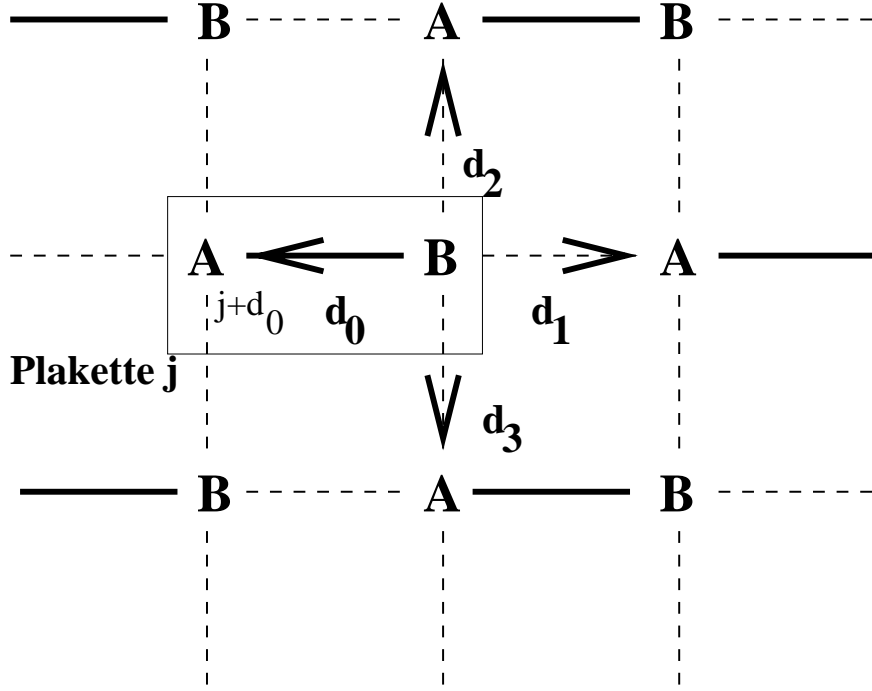


Abbildung 3.2: Einteilung des hyperkubischen Gitters in Plaketten am Beispiel des Quadratgitters

und $2d$ Kombinationen

$$N_{l,j} \equiv g_{j+d_l,A} g_{j+d_0,A}^{-1}, \quad l \in \{0, \dots, 2d-1\} \quad (3.2)$$

zwischen den nächsten Nachbarn des B-Spins eingeführt. Es gibt pro Plakette zwei g -Matrizen, d.h. sechs unabhängige Variablen: drei Elemente von M_j und drei von $g_{j+d_0,A}$.

3.2 Der Heisenbergterm

Die isotrope Heisenbergwechselwirkung der beiden Spins einer Plakette vereinfacht sich durch die folgende Relation für $g_{j,A}, g_{j,B} \in SU(2)$:

$$\begin{aligned} \vec{n}_{j,A} \cdot \vec{n}_{j,B} &= \frac{1}{4} \text{Sp}(\vec{\sigma} g_{j,A}^{-1} \sigma^z g_{j,A}) \cdot \text{Sp}(\vec{\sigma} g_{j,B}^{-1} \sigma^z g_{j,B}) \\ &= \frac{1}{2} \text{Sp}(g_{j,A}^{-1} \sigma^z g_{j,A} g_{j,B}^{-1} \sigma^z g_{j,B}) = \frac{1}{2} \text{Sp}(M_j^{-1} \sigma^z M_j \sigma^z). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Die Wechselwirkungen des Spins auf dem B-Untergitter mit seinen nächsten Nachbarn auf dem A-Untergitter außerhalb der Plakette kann in analoger Weise in Intra- und Interplakettenvariablen aufgespalten werden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \text{Sp}(\vec{\sigma} g_{j+d_l,A}^{-1} \sigma^z g_{j+d_l,A}) \cdot \text{Sp}(\vec{\sigma} g_{j,B}^{-1} \sigma^z g_{j,B}) &= \frac{1}{2} \text{Sp}(g_{j+d_l,A}^{-1} \sigma^z g_{j+d_l,A} g_{j,B}^{-1} \sigma^z g_{j,B}) \\ &= \frac{1}{2} \text{Sp}(N_{l,j} M_j^{-1} \sigma^z M_j N_{l,j}^{-1} \sigma^z) = \frac{1}{4} \text{Sp}(\vec{\sigma} M_j^{-1} \sigma^z M_j) \cdot \text{Sp}(\vec{\sigma} N_{l,j}^{-1} \sigma^z N_{l,j}). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Die Relation (3.3) ist ein Spezialfall von (3.4) mit $N_{0,j} = \mathbf{1}$.

Für die Darstellung der antiferromagnetischen und ferromagnetischen Korrelationen werden die $SU(2)$ -Matrizen M und N_l jeder Plakette j durch reelle Koeffizienten parametrisiert:

$$\begin{aligned} M_j &:= \tilde{u}_j^0 \mathbf{1} + i\tilde{u}_j^z \vec{\sigma} \\ N_{l,j} &:= \tilde{\beta}_{l,j}^0 \mathbf{1} + i\tilde{\beta}_{l,j}^z \vec{\sigma}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

wobei aufgrund der besonderen Koordinatenwahl $\tilde{\beta}_{0,j}^0 = 1$ und $\tilde{\beta}_{0,j}^z = 0$ ($N_{0,j} = \mathbf{1}$). Wegen $M_j \in SU(2)$ bzw. $N_{l,j} \in SU(2)$ gilt für die vier reellen Größen $\tilde{u}_j^0, \tilde{u}_j^z$ bzw. $\tilde{\beta}_j^0, \tilde{\beta}_j^z$ an jedem Ort die Zwangsbedingung $(\tilde{u}_j^0)^2 + \tilde{u}_j^z{}^2 = 1$ bzw. $(\tilde{\beta}_j^0)^2 + \tilde{\beta}_j^z{}^2 = 1$. Eine Minimierung des Skalarproduktes (3.3) bezüglich der Intraplakettenvariablen ergibt $\tilde{u}_j^0 = \tilde{u}_j^z \equiv 0$ und $(\tilde{u}_j^x)^2 + (\tilde{u}_j^y)^2 = 1$. Für eine ausgeprägte antiferromagnetische Korrelation innerhalb der Plakette sind \tilde{u}^0 und \tilde{u}^z kleine Größen, während für eine ferromagnetische Ausrichtung innerhalb des A-Untergitters $\tilde{\beta}_{l,j}^x = 0$ und $\tilde{\beta}_{l,j}^y = 0$ sind. Für kleine Abweichungen aus dieser Anordnung sind diese Größen dem Betrage nach klein. Im nächsten Schritt wird von kleinen Abweichungen aus dem magnetisch geordneten Zustand die Phase abgespalten und die Zwangsbedingung bis in zweite Ordnung in den Abweichungen u^\pm und β_l^\pm aus dem Néel-Zustand entwickelt

$$\begin{aligned} (\tilde{u}^0 \pm i\tilde{u}^z) &= u^\pm e^{\pm i(\gamma_{j+d_0,A} - \gamma_{j,B})} \\ (\tilde{u}^x \pm i\tilde{u}^y) &= \sqrt{1 - u^+ u^-} e^{\mp i(\gamma_{j+d_0,A} - \gamma_{j,B})} \approx e^{\mp i(\gamma_{j+d_0,A} - \gamma_{j,B})} \\ (\tilde{\beta}_l^x \pm i\tilde{\beta}_l^y) &= \beta_l^\pm e^{\pm i(\gamma_{j+d_0,A} - \gamma_{j+d_l,A})} \\ (\tilde{\beta}_l^0 \pm i\tilde{\beta}_l^z) &= \sqrt{1 - \beta^+ \beta^-} e^{\mp i(\gamma_{j+d_0,A} - \gamma_{j+d_l,A})} \approx e^{\mp i(\gamma_{j+d_0,A} - \gamma_{j+d_l,A})}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Dabei werden für jede Plakette zwei Phasen $\gamma_{j+d_0,A}$ und $\gamma_{j,B}$ eingeführt. Der Plakettenindex j wird im folgenden unterdrückt. In dieser Parametrisierung gilt

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma^x M^{-1} \sigma^z M) &= 2(\tilde{u}^0 \tilde{u}^y + \tilde{u}^z \tilde{u}^x) \approx i(u^- - u^+) \\ \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma^y M^{-1} \sigma^z M) &= 2(\tilde{u}^z \tilde{u}^y - \tilde{u}^0 \tilde{u}^x) \approx -(u^+ + u^-) \\ \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma^z M^{-1} \sigma^z M) &= -1 + 2\left((\tilde{u}^0)^2 + (\tilde{u}^z)^2\right) = -1 + 2u^+ u^- \\ \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma^x N_l^{-1} \sigma^z N_l) &= 2(\tilde{\beta}_l^0 \tilde{\beta}_l^y + \tilde{\beta}_l^z \tilde{\beta}_l^x) \approx i(\beta_l^- - \beta_l^+) \\ \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma^y N_l^{-1} \sigma^z N_l) &= 2(\tilde{\beta}_l^z \tilde{\beta}_l^y - \tilde{\beta}_l^0 \tilde{\beta}_l^x) \approx -(\beta_l^+ + \beta_l^-) \\ \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma^z N_l^{-1} \sigma^z N_l) &= 1 - 2\left((\tilde{\beta}_l^x)^2 + (\tilde{\beta}_l^y)^2\right) = 1 - 2\beta_l^+ \beta_l^-. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Das Verschwinden der Phasen in diesen Ausdrücken ist aus der Invarianz der Spinerwartungswerte bei Multiplikation von g_j mit einer Matrix $g' = e^{i\gamma_j \sigma^z}$ von links herleitbar (siehe (2.19)).

Diese Entwicklung setzt lediglich voraus, daß direkte Nachbarn stark antiferromagnetisch korreliert sind, d.h. die Spinkorrelationslänge sollte größer als eine Gitterkonstante a_L sein. Das Verfahren läßt sich auf magnetische Heisenbergwechselwirkungen und auf Hüpfsterme verallgemeinern, die zwischen weiter entfernten Plätzen wirken, sofern die Korrelationslänge nicht überschritten wird. Dieses wird im Rahmen dieser Arbeit nicht weiterverfolgt.

Im folgenden wird nun eine Entwicklung bis zur zweiten Ordnung in den Abweichungen durchgeführt, und es werden die Intraplakettenvariablen u_j^\pm ausintegriert. Die entstehenden Ausdrücke enthalten alle Ordnungen der semiklassischen Entwicklung.

3.3 Der Hüpfterm

Analog zur Behandlung des Heisenbergtermes in 3.2 können die Hüpfmatrixelemente mittels (3.6) bis in zweite Ordnung in den Abweichungen u^\pm und β_l^\pm vom klassischen Néelzustand entwickelt werden:

$$\begin{aligned}
(g_{j+d_l,A}g_{j,B}^{-1})_{\uparrow\uparrow} &= (N_{l,j}M_j^{-1})_{\uparrow\uparrow} \\
&= (\tilde{\beta}_{l,j}^0 + i\tilde{\beta}_{l,j}^z)(\tilde{u}_j^0 - i\tilde{u}_j^z) + (\tilde{\beta}_{l,j}^x - i\tilde{\beta}_{l,j}^y)(\tilde{u}_j^x + i\tilde{u}_j^y) \\
&\approx \exp(i(\gamma_{j+d_l,A} - \gamma_{j,B})) (u_j^- + \beta_{l,j}^-).
\end{aligned} \tag{3.8}$$

3.4 Die Zeitentwicklung

Die Zeitentwicklung der Spinfreiheitsgrade in (2.21) läßt sich ebenfalls mit (3.1) in den neuen Variablen ausdrücken:

$$\begin{aligned}
A_{\tau,jA}^z &= \frac{1}{2i} \text{Sp} \left(\sigma^z (\partial_\tau g_{j+d_0A}) g_{j+d_0A}^{-1} \right) \\
A_{\tau,jA}^x &= \frac{1}{2i} \text{Sp} \left(\sigma^x (\partial_\tau g_{j+d_0A}) g_{j+d_0A}^{-1} \right) \\
A_{\tau,jA}^y &= \frac{1}{2i} \text{Sp} \left(\sigma^y (\partial_\tau g_{j+d_0A}) g_{j+d_0A}^{-1} \right) \\
A_{\tau,jA}^\pm &\equiv A_{\tau,jA}^x \pm iA_{\tau,jA}^y \\
A_{\tau,jB}^z &= \frac{1}{2} \vec{A}_{\tau,jA} \cdot \text{Sp} \left(\vec{\sigma} M_j^{-1} \sigma^z M_j \right) + \frac{1}{2} \text{Sp} \left(\sigma^z (\partial_\tau M_j) M_j^{-1} \right).
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Für den Zeitentwicklungsterm ergibt dann sich gemäß (3.6) die folgende Entwicklung bis zur Größenordnung wie $(u^\pm)^2$ zu

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \text{Sp} \left(\vec{\sigma} M_j^{-1} \sigma^z M_j \right) \cdot \vec{A}_{\tau,jA} &\approx (-1 + 2u_j^+ u_j^-) A_{\tau,jA}^z \\
&\quad + i(u_j^- A_{\tau,jA}^+ - u_j^+ A_{\tau,jA}^-)
\end{aligned} \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \text{Sp} \left(\sigma^z (\partial_\tau M_j) M_j^{-1} \right) &\approx \partial_\tau (\gamma_{j+d_0A} - \gamma_{j,B}) \\
&\quad + u_j^+ \partial_\tau u_j^- - u_j^- \partial_\tau u_j^+.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Die letzten beiden Terme in (3.11) und der Term $2iu_j^+ u_j^- A_{\tau,jA}^z$ ergeben durch die Zeitableitungen in der weiter unten durchgeführten Entwicklung Gradiententerme von dritter Ordnung und werden schon hier vernachlässigt. Insgesamt ergibt die Entwicklung für den Zeitentwicklungsterm (2.21) für

die Spin- und die Grassmannvariablen:

$$\begin{aligned}
& \eta_{j+d_0,A}^* \partial_\tau \eta_{j+d_0,A} + \eta_{j,B}^* \partial_\tau \eta_{j,B} \\
& + i(2S - \eta_{j+d_0,A}^* \eta_{j+d_0,A}) A_{\tau,jA}^z + i(2S - \eta_{j,B}^* \eta_{j,B}) A_{\tau,jB}^z \\
& \approx + \eta_{j+d_0,A}^* \partial_\tau \eta_{j+d_0,A} + \eta_{j,B}^* \partial_\tau \eta_{j,B} \\
& + i(\eta_{j,B}^* \eta_{j,B} - \eta_{j+d_0,A}^* \eta_{j+d_0,A}) A_{\tau,jA}^z \\
& + i(2S - \eta_{j,B}^* \eta_{j,B}) \left\{ i(u_j^- A_{\tau,jA}^+ - u_j^+ A_{\tau,jA}^-) + \partial_\tau (\gamma_{j+d_0,A} - \gamma_{j,B}) \right\}. \tag{3.12}
\end{aligned}$$

Nur die Zeitableitungen $A_{\tau,jA}^\pm$ koppeln an die Intraplakettenvariablen in der Lagrangefunktion. Die Berry-Phase der beiden Spins einer Plakette heben sich bei Halbfüllung einander nahezu auf, während die Löcher auf dem A- bzw. B-Untergitter mit unterschiedlichen Vorzeichen an die Berry-Phase $A_{\tau,jA}^z$ ankoppeln. Anders als in [22] ist der Kopplungsfaktor zwischen der Lochdichte und der Berry Phase vom Betrag Eins anstatt S .

3.5 Ausintegration der Intraplakettenvariablen

Aus der im vorigen Abschnitt dargestellten Entwicklung ergibt sich die folgende Zustandssumme $Z = \int D\omega \exp\left(-\int_0^\beta L d\tau\right)$ mit der Lagrangedichte, die bis auf totale zeitliche Ableitungen wie folgt lautet (die Summanden werden dabei nach Potenzen von u^\pm sortiert):

$$\begin{aligned}
L = \sum_j \left\{ -\eta_{j+d_0,A}^* (\partial_\tau - iA_{\tau,jA}^z + i\partial_\tau \gamma_{j+d_0,A}) \eta_{j+d_0,A} \right. \\
\left. - \eta_{j,B}^* (\partial_\tau + iA_{\tau,jA}^z + i\partial_\tau \gamma_{j,B}) \eta_{j,B} \right. \tag{3.13}
\end{aligned}$$

$$- JS^2 h_{jB} \sum_{l=0}^{2d-1} h_{j+d_l,A} (1 - 2\beta_{l,j}^+ \beta_{l,j}^-) \tag{3.14}$$

$$+ 2tS \sum_{l=0}^{2d-1} \left(e^{i(\gamma_{j,B} - \gamma_{j+d_l,A})} \eta_{j,B}^* \eta_{j+d_l,A} \beta_{l,j}^+ + e^{i(\gamma_{j+d_l,A} - \gamma_{j,B})} \eta_{j+d_l,A}^* \eta_{j,B} \beta_{l,j}^- \right) \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}
+ u_j^+ \left(-2Sh_{jB} A_{\tau,jA}^- + 2JS^2 h_{jB} \sum_{l=0}^{2d-1} h_{j+d_l,A} \beta_{l,j}^- \right. \\
\left. + 2tS \sum_{l=0}^{2d-1} e^{i(\gamma_{j,B} - \gamma_{j+d_l,A})} \eta_{j,B}^* \eta_{j+d_l,A} \right) \tag{3.16}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
+ u_j^- \left(2Sh_{jB} A_{\tau,jA}^+ + 2JS^2 h_{jB} \sum_{l=0}^{2d-1} h_{j+d_l,A} \beta_{l,j}^+ \right. \\
\left. + 2tS \sum_{l=0}^{2d-1} e^{i(\gamma_{j+d_l,A} - \gamma_{j,B})} \eta_{j+d_l,A}^* \eta_{j,B} \right) \left. \right\} \tag{3.17}
\end{aligned}$$

$$+ u_j^+ \left\{ 2JS^2 h_{jB} F - i2Sh_{jB} A_{\tau,jA}^z + \overrightarrow{\partial}_\tau - \overleftarrow{\partial}_\tau \right\} u_j^-. \tag{3.18}$$

Dabei wurde die Abkürzung $F \equiv \sum_{l=0}^{2d-1} h_{j+d_l,A}$ eingeführt. Der Term $A_{\tau,j,A}^z$ stellt die Berry-Phase eines Spins auf dem A-Untergitter dar (vgl. [22]). Das Koppeln der Berry-Phase an die Grassmannvariablen in (3.13) wird durch den geringeren Gesamtspin auf einem Platz mit einem Loch verursacht, da bei Halbfüllung sich die Berry-Phasen bis auf Terme erster Ordnung, die in (3.16) und (3.17) enthalten sind, aufheben. Die $SU(2)$ -Freiheitsgrade $\gamma_{j+d_0,A}$ und $\gamma_{j,B}$ können auf hyperkubischen Gittern in einer Redefinition der Grassmannvariablen absorbiert werden:

$$\eta_{j+d_0,A} \rightarrow \eta_{j+d_0,A} e^{i\gamma_{j+d_0,A}} \quad \eta_{j,B} \rightarrow \eta_{j,B} e^{i\gamma_{j,B}}. \quad (3.19)$$

Für starke antiferromagnetische Kopplung J wird eine Gaußsche Approximation in den Variablen u^\pm durchgeführt, und die Integration für den Real- und Imaginärteil der komplexen Variable $u^+ = (u^-)^*$ von $[-1, 1]$ auf $-\infty, \infty$ erweitert.

Der Grundzustandsimpuls eines einzelnen Loches liegt für endliche Hüpfamplitude t in $d = 1$ bei $k_0 = \pm \frac{\pi}{2aL}$ und in $d \geq 2$ bei $\vec{k}_0 = \frac{\pi}{2aL}(\pm 1, \dots, \pm 1)$ [1, 23, 24, 25]. Für Löcher, deren Impuls \vec{k} in einer Umgebung des Grundzustandsimpulses \vec{k}_0 liegt, reduziert sich der Faktor $\sum_{l=0}^{2d-1} \eta_{j+d_l,A}^* \eta_{j,B}$ in (3.17) (und analog in (3.16)) in niedrigster Ordnung auf einen Gradiententerm in den Grassmannvariablen.

Bei der Ausintegration der Intraplakettenvariablen entstehen durch Multiplikation der Vorfaktoren von u^\pm in (3.16) bzw. (3.17) zusätzliche Terme, die linear in der Gradientenentwicklung sind. Daher werden in (3.18) nur Terme nullter Ordnung in den Gradienten berücksichtigt, und man erhält die effektive Lagrangedichte

$$L = \sum_j \left\{ - \left[\eta_{j+d_0,A}^* (\partial_\tau - iA_{\tau,j,A}^z) \eta_{j+d_0,A} + \eta_{j,B}^* (\partial_\tau + iA_{\tau,j,A}^z) \eta_{j,B} \right] \right. \quad (3.20)$$

$$\left. - JS^2 h_{jB} F + \frac{JS^2 h_{jB}}{F} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} h_{j+d_l,A} h_{j+d_{l'},A} (\beta_{l,j}^+ - \beta_{l',j}^+) (\beta_{l,j}^- - \beta_{l',j}^-) \right\} \quad (3.21)$$

$$+ \frac{2h_{jB}}{JF} A_{\tau,j,A}^+ A_{\tau,j,A}^- \quad (3.22)$$

$$+ \frac{2Sh_{jB}}{F} \sum_{l=0}^{2d-1} h_{j+d_l,A} \left(A_{\tau,j,A}^+ \beta_{l,j}^- - A_{\tau,j,A}^- \beta_{l,j}^+ \right) \quad (3.23)$$

$$+ \frac{2tS}{F} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} h_{j+d_l,A} \left[\eta_{j,B}^* \eta_{j+d_{l'},A} (\beta_{l,j}^+ - \beta_{l',j}^+) + \eta_{j+d_l,A}^* \eta_{j,B} (\beta_{l,j}^- - \beta_{l',j}^-) \right] \quad (3.24)$$

$$- \frac{2t}{JF} \sum_{l=0}^{2d-1} \left(\eta_{j,B}^* \eta_{j+d_l,A} A_{\tau,j,A}^+ - \eta_{j+d_l,A}^* \eta_{j,B} A_{\tau,j,A}^- \right) \quad (3.25)$$

$$+ \left. \frac{2t^2}{JF} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} \eta_{j+d_l,A}^* \eta_{j+d_{l'},A} \eta_{j,B}^* \eta_{j,B} \right\}. \quad (3.26)$$

Das Maß des Pfadintegrals ändert sich für jede Plakette j durch die Ausintegration von u_j^\pm um den Faktor $\pi/(2JS^2 h_{jB} F)$.

Die Terme in (3.20) enthalten die Zeitentwicklung der Grassmannvariablen auf A- und B-Plätzen zusammen mit deren Ankopplung an die Berry-Phase mit Ladung ± 1 . In (3.21) wird das Aufbrechen von magnetischen Bindungen durch ein Loch beschrieben. Aus der unterschiedlichen Zeitentwicklung der benachbarten Spins einer Plakette, die durch die Berry-Phase beschrieben wird, entsteht der

sogenannte topologische Term (3.23). Zusätzlich ergeben sich Hüpfsterme, die an die zeitlichen und räumlichen Variationen der Spins koppeln ((3.25) bzw. (3.24)). Aus dem Term (3.22) ist für große Spinlängen S erkennbar, daß die zeitlichen Fluktuationen eines Spins vermindert werden, falls auf dem Nachbarplatz ein Loch vorhanden ist, während die räumlichen Fluktuationen in der analogen Situation verstärkt werden (3.21).

Bei Halbfüllung, d.h. im t - J -Modell ohne Loch, ergibt sich die folgende Lagrangedichte:

$$L_0 = \sum_j \left[-2dJS^2 + \frac{JS^2}{2d} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} (\beta_{l,j}^+ - \beta_{l',j}^+) (\beta_{l,j}^- - \beta_{l',j}^-) + \frac{1}{Jd} A_{\tau,jA}^+ A_{\tau,jA}^- \right. \\ \left. + \frac{S}{d} \sum_{l=0}^{2d-1} \left(A_{\tau,jA}^+ \beta_{l,j}^- - A_{\tau,jA}^- \beta_{l,j}^+ \right) \right]. \quad (3.27)$$

Der zweite Term der Summe in (3.27) beinhaltet die Spinwellendispersion

$$\frac{1}{4} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} (\vec{n}_{j+d_l} - \vec{n}_{j+d_{l'}})^2 \approx \sum_{l,l'=0}^{2d-1} (\beta_{l,j}^+ - \beta_{l',j}^+) (\beta_{l,j}^- - \beta_{l',j}^-) \approx 2da_L^2 (\nabla \vec{n}_{j+d_0,3})^2. \quad (3.28)$$

Während (3.28) einen räumlichen Gradiententerm darstellt, enthält der dritte Term in (3.27) ein Quadrat des zeitlichen Gradienten

$$A_{\tau,jA}^+ A_{\tau,jA}^- = \frac{1}{4} (\partial_\tau \vec{n}_j)^2. \quad (3.29)$$

Damit stimmt L_0 mit dem aus der Literatur bekannten nichtlinearen σ -Modell (NL σ M)[26]

$$L_{NL\sigma M} = \frac{\rho_S^0}{2} \sum_j \left[\sum_{m=0}^{d-1} (\vec{n}_{j+d_{2m+1}} - \vec{n}_{j+d_{2m}})^2 + \frac{1}{c^2} (\partial_\tau \vec{n}_j)^2 \right] \quad (3.30)$$

bei großen Wellenlängen überein. Die Spinwellengeschwindigkeit für große Wellenlängen beträgt $c = 2\sqrt{d}JSa_L$ und die Spinsteifigkeit $\rho_S^0 = JS^2 a_L^{2-d}$. Aus (3.21) und (3.22) folgt, wenn man eine gleichmäßige Verteilung der Löcher auf N Gitterplätze annimmt, daß in erster Näherung eine Skalierung der Spinwellengeschwindigkeit um den Faktor $\left(1 - \frac{\delta}{2S}\right)$ erfolgt, während die Spinsteifigkeit ρ_S , wie zu erwarten, um den Faktor $\left(1 - \frac{\delta}{2S}\right)^2$ vermindert wird. Dabei ist $\delta = n_h/N$ die durchschnittliche Lochkonzentration.

Der Anteil der Lagrangedichte für ein einzelnes Loch L_1 ist der in den Grassmannvariablen bilineare Teil von L

$$L_1 = \sum_j \left\{ - \left[\eta_{j+d_0,A}^* (\partial_\tau - iA_{\tau,jA}^z) \eta_{j+d_0,A} + \eta_{j,B}^* (\partial_\tau + iA_{\tau,jA}^z) \eta_{j,B} \right] \right. \\ \left. + dJS (\eta_{j+d_0,A}^* \eta_{j+d_0,A} + \eta_{j,B}^* \eta_{j,B}) \right. \\ \left. - \frac{JS}{4d} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} (\beta_{l,j}^+ - \beta_{l',j}^+) (\beta_{l,j}^- - \beta_{l',j}^-) \left(\eta_{j+d_l,A}^* \eta_{j+d_l,A} + \eta_{j+d_{l'},A}^* \eta_{j+d_{l'},A} \right. \right. \\ \left. \left. + \eta_{j,B}^* \eta_{j,B} - \frac{1}{2d} \sum_{l''=0}^{2d-1} \eta_{j+d_{l'},A}^* \eta_{j+d_{l''},A} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{2JSd} \left(-\eta_{j,B}^* \eta_{j,B} + \frac{1}{2d} \sum_{l=0}^{2d-1} \eta_{j+d_l,A}^* \eta_{j+d_l,A} \right) A_{\tau,jA}^+ A_{\tau,jA}^- \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2d} \sum_{l=0}^{2d-1} \left(\frac{1}{2d} \sum_{l'=0}^{2d-1} (\eta_{j+d_{l',A}}^* \eta_{j+d_{l',A}} - \eta_{j+d_{l,A}}^* \eta_{j+d_{l,A}}) - \eta_{j,B}^* \eta_{j,B} \right) (A_{\tau,jA}^+ \beta_{l,j}^- - A_{\tau,jA}^- \beta_{l,j}^+) \\
& + \frac{tS}{d} \sum_{l=0}^{2d-1} \left(\eta_{j,B}^* \eta_{j+d_{l,A}} \left[-\frac{1}{JS} A_{\tau,jA}^+ + \sum_{l'=0}^{2d-1} (\beta_{l',j}^+ - \beta_{l,j}^+) \right] \right. \\
& \quad \left. + \eta_{j+d_{l,A}}^* \eta_{j,B} \left[\frac{1}{JS} A_{\tau,jA}^- + \sum_{l'=0}^{2d-1} (\beta_{l',j}^- - \beta_{l,j}^-) \right] \right) \Bigg\}. \tag{3.31}
\end{aligned}$$

L_0 und L_1 stellen das Kontinuumsmodell für das $t - J$ Modell für ein Loch auf hyperkubischen Gittern dar.

Kapitel 4

Quasiteilchengewicht für ein Loch im $t - J$ Modell

In diesem Kapitel soll mittels einer semiklassischen Näherung und durch numerische Diagonalisierung kleiner Systeme untersucht werden, ob der Grundzustand $|0\rangle_{Heis}$ des t - J -Modells bei Halbfüllung, in dem ein Loch erzeugt wird, mit dem Grundzustand $|1\rangle_{tJ}$ des t - J -Modells mit einem Loch im thermodynamischen Limes einen nichtverschwindenden Überlapp aufweist, oder ob die beiden Grundzustände orthogonal sind. Solch eine Frage wurde erstmals im Zusammenhang für ein freies Elektrogas mit einem schwachen Streupotential von Anderson [9] untersucht und in [2] zum ersten Mal für das t - J -Modell auf hyperkubischen Gittern behandelt. Dort wurde mit Hilfe des “Phase-String-Effektes” hergeleitet, daß in der Greenschen Funktion eines Loches das Quasiteilchengewicht im thermodynamischen Limes verschwindet.

Das Verschwinden des Quasiteilchengewichtes ist z.B. in ARPES-Experimenten (Angle resolved photoemission spectroscopy) beobachtbar, weil bei tiefen Temperaturen die Absorption von Photonen, die der Energiedifferenz der beiden Grundzustände entsprechen, unterdrückt ist.

In Referenz [10] wurde für eine Dimension mittels Bosonisierung gezeigt, daß das Quasiteilchengewicht $Z_{\vec{k}}$ für den Grundzustand mit einem Loch bei $t = 0$ im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ mit einem Potenzgesetz

$$Z_{\vec{k}} = |{}_{tJ}\langle 1|c_{\vec{k}\sigma}^\dagger|0\rangle_{Heis}|^2 \propto L^{-2X_0} \quad (4.1)$$

mit Exponenten $X_0 = \frac{3}{16}$ verschwindet. Dabei ist \vec{k} die Impulsdifferenz der beiden Grundzustände. Die Platzanzahl $L^d = 2N$ im t - J -Modell sei im Hinblick auf spätere Verwendung bereits auf d räumliche Dimensionen verallgemeinert. Das Verschwinden von $Z_{\vec{k}}$ zumindest für einige Impulsvektoren an der Fermikante im thermodynamischen Limes bedeutet, daß Löcher im t - J -Modell keine Fermiflüssigkeit bilden, da der Sprung in der Besetzungszahl $c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}}$ an der Fermikante bei verschwindender Temperatur proportional zum Quasiteilchengewicht ist [8]. In einer räumlichen Dimension ist für große Hüpfamplitude t im t - J -Modell ein Luttingerflüssigkeitsverhalten etabliert [27], während in mehr räumlichen Dimensionen die Frage, ob eine Fermiflüssigkeit vorliegt, widersprüchlich beantwortet wird. Insbesondere in $d = 2$ sagen Sheng und Mitautoren [2] ein Verschwinden von $Z_{\vec{k}}$ für den Einlochgrundzustand voraus. Putikka und Mitautoren [3] stellen im Rahmen einer Hochtemperaturentwicklung eine Verletzung des Luttinger-Theorems für das t - J -Modell fest. Das Luttinger-Theorem besagt, daß für eine Fermiflüssigkeit bei Einschalten einer perturbativ behandelbaren Störwechselwirkung das von der Fermioberfläche eingeschlossene Volumen konstant bleibt. Dagegen behauptet [4] nach exakter Diagonalisierung kleiner Systeme mit bis zu 32 Plätzen, ein endliches Quasiteilchengewicht im thermodynamischen Limes für einzelne Werte der Hüpfamplitude t gefunden zu haben.

Das Quasiteilchengewicht $Z_{\mathbf{k}}$ erhält man aus der Greenschen Funktion. Da die Greensche Funktion für das t - J -Modell sich im thermodynamischen Limes nicht exakt berechnen läßt, wird im folgenden mittels Näherungen bzw. exakter Diagonalisierung kleiner Systeme versucht, Aussagen über das Quasiteilchengewicht im thermodynamischen Limes zu gewinnen.

4.1 Die Einteilchen-Greensche-Funktion in Spektraldarstellung

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie das Quasiteilchengewicht als Grenzwert aus dem Diagonalelement einer gegebenen Einelektronen-Greenschen Funktion

$$G_{\sigma\sigma jj}(\tau) = -\langle c_{j\sigma}^\dagger(\tau)c_{j\sigma}(0) \rangle \quad \text{mit } 0 \leq \tau \leq \beta \quad (4.2)$$

ermittelbar ist. Der Erwartungswert $\langle \dots \rangle$ wird über alle Energieeigenzustände $|\lambda\rangle$ mit Energie E_λ des Heisenbergmodells ohne Loch gebildet. Mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation im Zustandsraum mit den Energieeigenzuständen $|\mu\rangle$ des t - J -Modells mit einem Loch zur Energie E_μ erhält man die Spektraldarstellung

$$G_{\sigma\sigma jj} = -\frac{1}{Z} \sum_{\lambda, \mu} e^{-(\beta-\tau)E_\lambda - \tau E_\mu} \langle \lambda | c_{j\sigma}^\dagger | \mu \rangle \langle \mu | c_{j\sigma} | \lambda \rangle. \quad (4.3)$$

$Z = \sum_\lambda \exp(-\beta E_\lambda)$ ist dabei die Zustandssumme. Der Grundzustand des Heisenbergmodells wird dann durch den Grenzübergang $\beta \rightarrow \infty$ herausprojiziert. Dabei wird angenommen, daß der Grundzustand des Spinsystems ohne Loch ein Singulettzustand der Gesamtmagnetisierung ist. Diese Annahme ist für die behandelten physikalischen Systeme mit gerader Platzanzahl durch exakte Diagonalisierung bestätigt. Die Einlochgrundzustände des t - J -Modells besitzen dann $S_z = \pm \frac{1}{2}$, die durch $c_{j\sigma}^\dagger$ jeweils aus dem Grundzustand des Heisenbergmodells mit $S_z = 0$ erzeugt werden. Der Überlapp und die Energien sind unabhängig von der gewählten Spinprojektion σ . Aufgrund der Translationsinvarianz des betrachteten Modells mit einem Loch sind die Einlocheigenzustände $|\mu\rangle$ durch einen eindeutigen Impuls \mathbf{q} und weitere Quantenzahlen m charakterisierbar. $m = 0$ bezeichne den Grundzustand für den jeweiligen Impuls. Damit ergibt sich bei verschwindender Temperatur mit $c_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}r_j} c_{\mathbf{k}\sigma}$:

$$G_{\sigma\sigma jj}(\tau) = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}, m} e^{-\tau(E_{\mathbf{k}, m}^{tJ} - E_0^{Heis})} |_{tJ} \langle \mathbf{k}, m | c_{\mathbf{k}\sigma} | 0 \rangle_{Heis}|^2. \quad (4.4)$$

Für den Grenzübergang $\tau \rightarrow \infty$ werden nun zwei Fälle unterschieden: a) Es gibt nur einen Einlochgrundzustand mit einem eindeutigen Impuls, oder b) der Grundzustand ist entartet.

4.1.1 Nichtentarteter Einlochgrundzustand

Im Grenzübergang $\tau \rightarrow \infty$ erhält man für den Fall eines nichtentarteten Einlochgrundzustandes mit Impuls \mathbf{k} aufgrund der Gewichtung durch den Exponentialfaktor in der Spektraldarstellung (4.4) das Quasiteilchengewicht $Z_{\mathbf{k}}$ für den Einlochgrundzustand

$$G_{\sigma\sigma jj}(\tau) \stackrel{\tau \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{2N} e^{-\tau(E_{\mathbf{k}}^{tJ} - E_0^{Heis})} \underbrace{|_{tJ} \langle \mathbf{k}, 0 | c_{\mathbf{k}\sigma} | 0 \rangle_{Heis}|^2}_{Z_{\mathbf{k}}}. \quad (4.5)$$

4.1.2 Entarteter Einlochgrundzustand

Sind beispielsweise wie im t - J -Modell bei $t = 0$ die Grundzustandsenergien für Löcher zu unterschiedlichen Impulsen entartet ($E_{\mathbf{k}}^{tJ} = E_0^{tJ}$) und die Quasiteilchengewichte $Z_{\mathbf{k}}^{t=0}$ der Einlochgrundzustände identisch, dann liefert der Grenzübergang $\tau \rightarrow \infty$

$$G_{\sigma\sigma jj}(\tau) \stackrel{\tau \rightarrow \infty}{\approx} - e^{-\tau(E_0^{tJ} - E_0^{H\text{eis}})} \underbrace{\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} |{}_{H\text{eis}}\langle 0 | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | \mathbf{k}, 0 \rangle_{tJ}|^2}_{Z_{\mathbf{q}}^{t=0}} \quad (4.6)$$

für beliebiges \mathbf{q} .

Für infinitesimale Hüpfamplitude t spalten sich die Grundzustandsenergie und der erste angeregte Zustand des t - J -Modells in Bänder mit Breite proportional zu t auf, die sich aber nicht überlappen. Dann werden für sehr große τ die Zustände des Grundzustandsbandes dominieren. Die infinitesimal unterschiedlichen Locherzeugungsenergien innerhalb des Bandes liefern im Rahmen einer Entwicklung nach t einen zu τ proportionalen Term und gehen daher nicht in die Quasiteilchengewichte ein. Sind außerdem die Quasiteilchengewichte $Z_{\mathbf{q}}$ nach der Hüpfamplitude entwickelbar, so ergibt sich der Grenzwert der Greenschen Funktion bis zur Ordnung t^2 bei verschwindender Temperatur zu

$$G_{\sigma\sigma jj}(\tau) \stackrel{\tau \rightarrow \infty}{\approx} - e^{-\tau(E_0^{tJ} - E_0^{H\text{eis}})} \left(Z_{\mathbf{q}}^{t=0} + \frac{t^2}{4N} \sum_{\mathbf{q}} \partial_t^2 Z_{\mathbf{q}}^{(t)} \Big|_{t=0} \right). \quad (4.7)$$

Der lineare Term in der t -Entwicklung verschwindet bei Mittelung über die Brillouinzone, weil das t - J -Modell auf hyperkubischen Gittern aufgrund der Teilchen-Loch-Symmetrie invariant unter der Ersetzung $t \rightarrow -t$ ist.

4.2 Kontinuumstheorie des t - J -Modells

Dieser Abschnitt enthält zunächst eine formale Berechnung der Greenschen Funktion, bei der die Bewegung des Loches in einem vorgegebenen Spinhintergrund betrachtet wird. Danach muß für die Greensche Funktion über alle Spinhintergründe gemittelt werden. Die Auswertung ist aber nicht durchführbar. Deshalb wird eine Entwicklung der Greenschen Funktion für kleine Hüpfamplitude t vorgenommen. Die Abhängigkeit der t -Entwicklung von der Systemgröße in einer Umgebung von $t = 0$ wird später untersucht und eine semiklassische Entwicklung durchgeführt.

Zunächst wird in analoger Weise wie in (2.3) die Greensche Funktion mit kohärenten Zuständen (2.15) in die Pfadintegraldarstellung mit der Lagrangefunktion $L = -\langle \omega | \partial_\tau - H | \omega \rangle$ für das t - J -Modell überführt

$$G_{\sigma\sigma jj}(\tau) = - \frac{\prod_{l\tau'} (\int d\omega_{l\tau'}) [g_j(\tau)]_{\uparrow\sigma}^* [g_j(0)]_{\sigma\uparrow} \eta_j(\tau) \eta_j^*(0) e^{-\int_0^\beta d\tau' L}}{\prod_{l\tau'} (\int d\omega_{l\tau'}) e^{-\int_0^\beta d\tau' L}}. \quad (4.8)$$

Diese Formel gilt für $\beta > \tau > 0$. Die Greensche Funktion ist antiperiodisch in der Variablen τ , d.h. es gilt

$$G_{\sigma\sigma jj}(\beta) = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^-} G_{\sigma\sigma jj}(\varepsilon) \quad (4.9)$$

Aufgrund der Invarianz bei räumlichen homogenen Rotationen der Spinvektoren läßt sich im Pfadintegral das Produkt $[g_j(\tau)]_{\uparrow\sigma}^* [g_j(0)]_{\sigma\uparrow}$ durch $\frac{1}{2} [g_j^*(\tau) g_j(0)]_{\uparrow\uparrow}$ ersetzen.

4.2.1 Elimination des Lochfreiheitsgrades

In analoger Weise wie in Abschnitt 3.5 können die Intraplakettenvariablen ausintegriert werden und man erhält die Lagrangefunktion für den Fall eines Loches $L = L_0 + L_1 \equiv L_0 - \sum_{j,j'} \eta_j^* (\partial_\tau \delta_{j,j'} - H_{j,j'}^{1Loch}) \eta_{j'}$. $H_{j,j'}^{1Loch}$ ist dabei der Hamiltonoperator für ein Loch in Matrixdarstellung, der parametrisch von der Spineinstellung abhängt. Der Einlochanteil dieser Lagrangefunktion wird als Matrix mit Zeit- und Ortsindizes (τ, j) für die Zeilen- bzw. Spaltenindizierung geschrieben.

Die Darstellung des Zählers und des Nenners der Greenschen Funktion (4.8) kann analog wie in (2.23) in Summanden zu unterschiedlicher Lochanzahl zerlegt werden. Da die Erzeugung von Löchern für starke Heisenbergwechselwirkung sehr viel Energie kostet, dominiert im Nenner von (4.8) der Term Z^{0-Loch} im Grenzübergang $\beta \rightarrow \infty$. Dann ist es möglich, die Grassmannvariablen bei vorgegebenen Einstellungen der Spinfreiheitsgrade auszuintegrieren, und es ergibt sich die folgende Darstellung der Greenschen Funktion für ein Loch im Grenzfall sehr tiefer Temperaturen $T = 1/\beta$ (siehe Anhang A):

$$G_{\sigma\sigma jj}(\tau) = -\frac{1}{2} \frac{\prod_{l\tau} (\int dg_l(\tau')) (g_j^{-1}(\tau) g_j(0))_{\uparrow\uparrow} G_{jj}^{Loch}(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau' L_0}}{\prod_{l\tau} (\int dg_l(\tau')) e^{-\int_0^\beta d\tau' L_0}}. \quad (4.10)$$

Hier ist $G_{jj}^{Loch}(\tau)$, der Propagator des spinlosen Loches, gegeben durch

$$G_{jj}^{Loch}(\tau) = [U(\tau)]_{j,j'} \quad (4.11)$$

für $0 < \tau \leq \beta$ mit dem zeitgeordneten Produkt des Einlochhamiltonoperators

$$U_{j,j'}(\tau) = \left[T \left\{ \exp \left(- \int_0^\tau d\tau' H^{1Loch} \right) \right\} \right]_{j,j'}. \quad (4.12)$$

Im Grenzübergang $\beta \rightarrow \infty$ verschwindet $U(\beta)$, weil das Aufbrechen von antiferromagnetischen Heisenbergbindungen durch ein Loch für große J die Energie dJS kostet.

Die Einträge der Einlochhamiltonfunktion $H_{j,j'}^{1Loch}$ ergeben sich aus L_1 (3.31) zu

$$\begin{aligned} H_{j+d_0A,j+d_0A}^{1Loch} &= iA_{\tau,jA}^z + dJS \\ &- \frac{JS}{4d} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} \left\{ 2(\beta_{l,j+d_0-d_l}^+ - \beta_{l',j+d_0-d_l}^+) (\beta_{l,j+d_0-d_l}^- - \beta_{l',j+d_0-d_l}^-) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2d} \sum_{l''=0}^{2d-1} (\beta_{l,j+d_0-d_{l''}}^+ - \beta_{l',j+d_0-d_{l''}}^+) (\beta_{l,j+d_0-d_{l''}}^- - \beta_{l',j+d_0-d_{l''}}^-) \right\} \\ &+ \frac{1}{4JSd^2} \sum_{l=0}^{2d-1} A_{\tau,j-d_lA}^+ A_{\tau,j-d_lA}^- \\ &- \frac{1}{4d^2} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} (A_{\tau,j-d_l+d_0A}^+ \beta_{l,j-d_l+d_0}^- - A_{\tau,j-d_l+d_0A}^- \beta_{l,j-d_l+d_0}^+) \\ &+ \frac{1}{4d^2} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} (A_{\tau,j-d_{l'}+d_0A}^+ \beta_{l,j-d_{l'}+d_0}^- - A_{\tau,j-d_{l'}+d_0A}^- \beta_{l,j-d_{l'}+d_0}^+) \\ H_{jB,jB}^{1Loch} &= -iA_{\tau,jA}^z + dJS - \frac{JS}{4d} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} (\beta_{l,j}^+ - \beta_{l',j}^+) (\beta_{l,j}^- - \beta_{l',j}^-) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2JSd}A_{\tau,jA}^+A_{\tau,jA}^- - \frac{1}{2d}\sum_{l=0}^{2d-1}(A_{\tau,jA}^+\beta_{l,j}^- - A_{\tau,jA}^-\beta_{l,j}^+) \\
H_{j+d_lA,jB}^{1Loch} &= \frac{tS}{d}\left\{\frac{1}{JS}A_{\tau,jA}^- + \sum_{l'=0}^{2d-1}(\beta_{l',j}^- - \beta_{l,j}^-)\right\} \\
H_{jB,j+d_lA}^{1Loch} &= \frac{tS}{d}\left\{-\frac{1}{JS}A_{\tau,jA}^+ + \sum_{l'=0}^{2d-1}(\beta_{l',j}^+ - \beta_{l,j}^+)\right\}. \tag{4.13}
\end{aligned}$$

In der Wirkung $S = \int_0^\infty d\tau' L_0$ werden die Beiträge der Spins an jedem Ort bei Halbfüllung summiert, und S ist damit von der Ordnung $2N$ (Systemgröße). Dabei sind konstante Terme vernachlässigt worden.

4.2.2 t-Entwicklung der Greenschen Funktion

Die Greensche Funktion G^{Loch} am Platz jA wird für $|t| \ll J$ bis zur Ordnung t^2 entwickelt. Die erste Ordnung verschwindet, weil das Loch zum Ursprungsort zurückkehren muß. Die Entwicklung in zweiter Ordnung entspricht dem Transport des Loches vom Platz jA auf einen benachbarten Platz $j-d_lB$ und dessen anschließende Rückkehr zum Ursprungsort. Man erhält

$$\begin{aligned}
G_{jA,jA}^{Loch} &= \left(T \left\{ e^{-\int_0^\tau d\tau' H_{jA,jA}^{1Loch}(\tau')} \right\} + \sum_{l=0}^{2d-1} \int_0^\tau d\tau_2 T \left\{ e^{-\int_{\tau_2}^\tau d\tau' H_{jA,jA}^{1Loch}(\tau')} \right\} H_{jA,j-d_lB}^{1Loch}(\tau_2) \cdot \right. \\
&\quad \cdot \left. \int_0^{\tau_2-0} d\tau_1 T \left\{ e^{-\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau' H_{j-d_lB,j-d_lB}^{1Loch}(\tau')} \right\} H_{j-d_lB,jA}^{1Loch}(\tau_1) T \left\{ e^{-\int_0^{\tau_1} d\tau' H_{jA,jA}^{1Loch}(\tau')} \right\} \right) \\
&= e^{-\int_0^\tau d\tau' H_{jA,jA}^{1Loch}(\tau')} \left\{ 1 + \frac{t^2 S^2}{d^2} \sum_{l=0}^{2d-1} \int_0^\tau d\tau_2 \int_0^{\tau_2-0} d\tau_1 e^{\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau' (H_{jA,jA}^{1Loch}(\tau') - H_{j-d_lB,j-d_lB}^{1Loch}(\tau'))} \right. \\
&\quad \cdot \left\{ \frac{1}{JS} A_{\tau,j+d_0-d_lA}^- (\tau_2) + \sum_{l''=0}^{2d-1} \left(\beta_{l,j+d_0-d_l}^- (\tau_2) - \beta_{l'',j+d_0-d_l}^- (\tau_2) \right) \right\} \cdot \\
&\quad \left. \left\{ -\frac{1}{JS} A_{\tau,j+d_0-d_lA}^+ (\tau_1) + \sum_{l''=0}^{2d-1} \left(\beta_{l,j+d_0-d_l}^+ (\tau_1) - \beta_{l'',j+d_0-d_l}^+ (\tau_1) \right) \right\} \right\}. \tag{4.14}
\end{aligned}$$

4.3 Semiklassische Entwicklung

Für die Tieftemperatureigenschaften sind insbesondere die niederenergetischen langwelligen Spinanregungen wichtig. Daher wird die Greensche Funktion $G_{\sigma\sigma jj}$ (4.8) in einer semiklassischen Entwicklung bis in Ordnung $O(S^{-2})$ in den Fluktuationen berechnet. Dafür wird ein langreichweitig in Richtung der S^z -Achse geordneter Spinzustand mit Windungszahl 0 angenommen. Dann lassen sich die kleinen Abweichungen aus dem klassischen Grundzustand durch $g_j = e^{i\vec{\epsilon}\vec{\sigma}}$ mit den kleinen Parametern $\vec{\epsilon} = (\epsilon_x, \epsilon_y, 0)$ darstellen. Dabei ist der Faktor $e^{iV_{j+d_0A}\sigma^z}$, der mit den Nullmoden des geordneten Spinzustandes auf hyperkubischen Gittern korrespondiert, bereits abgespalten und ausintegriert. Die verbleibenden $SU(2)$ -Matrizen können dann in $\epsilon^\pm = \epsilon_x \pm i\epsilon_y$ entwickelt werden.

In (4.10) muß man nun dg , $g^{-1}g$, G^{Loch} und L_0 bis zur vierten Ordnung in ε^\pm entwickeln. Die Ableitungen $A_{\tau,jA}^\pm$ und $\beta_{l,j}^\pm$ können bis in die vierte Ordnung in den Spinwellen ε entwickelt werden, und es ergibt sich

$$dg \propto d\varepsilon_x d\varepsilon_y \left(1 - \frac{2\varepsilon^+ \varepsilon^-}{3} \right) \quad (4.15)$$

und

$$\begin{aligned} g^{-1}g' &\approx \mathbf{1} \left(1 - \frac{(\vec{\varepsilon} - \vec{\varepsilon}')^2}{2} + \frac{((\vec{\varepsilon} - \vec{\varepsilon}')^2)^2}{24} + \frac{(\vec{\varepsilon}^2)(\vec{\varepsilon}'^2) - (\vec{\varepsilon} \cdot \vec{\varepsilon}')^2}{6} \right) \\ &+ i\vec{\sigma} \left[(\vec{\varepsilon}' - \vec{\varepsilon}) \left(1 - \frac{\vec{\varepsilon}^2 + \vec{\varepsilon}'^2}{6} \right) + \frac{\vec{\varepsilon}}{3} \vec{\varepsilon}'^2 - \frac{\vec{\varepsilon}'}{3} \vec{\varepsilon}^2 \right] \\ &+ i\sigma^z \left(1 - \frac{\vec{\varepsilon}'^2 + \vec{\varepsilon}^2}{6} \right) (\vec{\varepsilon} \times \vec{\varepsilon}')_z. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Die Formel (4.15) erhält man, indem man in der Darstellung von $\vec{n}^z = \frac{1}{2}\text{Sp}(\sigma^z g^{-1} \sigma_z g)$ den Eulerwinkel durch die Relation $\theta = 2\sqrt{\varepsilon^+ \varepsilon^-}$ ausdrückt und mit dem Maßfaktor in (2.10) vergleicht. Als zeitliche und räumliche Ableitungen erhält man

$$\begin{aligned} A_{\tau,jA}^z &= \frac{1}{2i} \text{Sp} \left\{ \sigma^z (\partial_\tau g_{j+d_0A}) g_{j+d_0A}^{-1} \right\} \approx \left(1 - \frac{\varepsilon_{j+d_0}^+ \varepsilon_{j+d_0}^-}{3} \right) i (\varepsilon_{j+d_0}^+ \partial_\tau \varepsilon_{j+d_0}^- - \varepsilon_{j+d_0}^- \partial_\tau \varepsilon_{j+d_0}^+) \\ A_{\tau,jA}^\pm &= \frac{1}{2i} \text{Sp} \left\{ \sigma^\pm (\partial_\tau g_{j+d_0A}) g_{j+d_0A}^{-1} \right\} \approx \partial_\tau \varepsilon_{j+d_0}^\pm \left(1 - 2 \frac{\varepsilon_{j+d_0}^+ \varepsilon_{j+d_0}^-}{3} \right) + \frac{2\varepsilon_{j+d_0}^\pm}{3} (\vec{\varepsilon}_{j+d_0} \partial_\tau \vec{\varepsilon}_{j+d_0}) \\ \beta_{l,j}^\pm &= \frac{1}{2i} \text{Sp} (\sigma^\pm g_{j+d_lA} g_{j+d_0A}^{-1}) = (\varepsilon_{j+d_l}^\pm - \varepsilon_{j+d_0}^\pm) \left(1 - \frac{\varepsilon_{j+d_0}^+ \varepsilon_{j+d_0}^- + \varepsilon_{j+d_l}^+ \varepsilon_{j+d_l}^-}{6} \right) \\ &+ \frac{\varepsilon_{j+d_0}^\pm}{3} (\varepsilon_{j+d_l}^+ \varepsilon_{j+d_l}^-) - \frac{\varepsilon_{j+d_l}^\pm}{3} (\varepsilon_{j+d_0}^+ \varepsilon_{j+d_0}^-). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Der Erwartungswert wird in der semiklassischen Entwicklung bis in die zweite Ordnung in den Fluktuationen mit der Lagrangefunktion

$$L_0 = \sum_j \left(-2dJS^2 + \frac{JS^2}{2d} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} (\vec{\varepsilon}_{j+d_l} - \vec{\varepsilon}_{j+d_{l'}}) (\vec{\varepsilon}_{j+d_l} - \vec{\varepsilon}_{j+d_{l'}}) + \frac{1}{Jd} (\partial_\tau \vec{\varepsilon}_{j+d_0}) (\partial_\tau \vec{\varepsilon}_{j+d_0}) \right) \quad (4.18)$$

$$+ \frac{S}{d} \sum_{l=0}^{2d-1} \left\{ (\varepsilon_{j+d_l}^- - \varepsilon_{j+d_0}^-) \partial_\tau \varepsilon_{j+d_0}^+ - (\varepsilon_{j+d_l}^+ - \varepsilon_{j+d_0}^+) \partial_\tau \varepsilon_{j+d_0}^- \right\} \quad (4.19)$$

ermittelt. Diese Lagrangefunktion enthält die Spinwellen des Heisenbergmodells ohne Loch. Die anharmonischen Terme höherer Ordnung der semiklassischen Entwicklung von L_0 (hier angegeben bis zur Ordnung $O(\varepsilon^4)$)

$$L_0^4 = - \sum_j \left\{ \frac{2}{3Jd} \left[(\vec{\varepsilon}_{j+d_0} \partial_\tau \vec{\varepsilon}_{j+d_0})^2 - (\partial_\tau \vec{\varepsilon}_{j+d_0})^2 \varepsilon_{j+d_0}^2 \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{JS^2}{6d} \sum_{l,l'=0}^{2d-1} (\vec{\epsilon}_{j+d_l} - \vec{\epsilon}_{j+d_{l'}}) \left[\vec{\epsilon}_{j+d_l} (\vec{\epsilon}_{j+d_l}^2 + 3\vec{\epsilon}_{j+d_0}^2) \right. \\
& \left. - \vec{\epsilon}_{j+d_{l'}} (\vec{\epsilon}_{j+d_{l'}}^2 + 3\vec{\epsilon}_{j+d_0}^2) + 3\vec{\epsilon}_{j+d_0} (\vec{\epsilon}_{j+d_{l'}}^2 - \vec{\epsilon}_{j+d_l}^2) \right] \Big\} \quad (4.20)
\end{aligned}$$

werden aus der Exponentialfunktion der Darstellung (4.10) entwickelt, und es heben sich die Beiträge der Vakuumdiagramme von Zähler und Nenner auf.

Die Exponentialfaktoren in (4.14), in denen die Diagonalterme von $H_{j,j'}^{1Loch}$ vorkommen, modifizieren den Beitrag von L_0 so, daß die Beiträge, die einen Spin an diesem Ort jA bzw. $j-d_lB$ beschreiben, aus der Wirkung entfernt werden. Diese Entfernung eines einzigen Spins im Einlochfall führt effektiv zu einem Korrekturfaktor $1 - O\left(\frac{1}{2N}\right)$ der Spinwellenfrequenzen. Für den Propagator führt dieses zu einem Faktor $1 + O\left(\frac{1}{2N}\right)$ in der semiklassischen Entwicklung und ist daher in führender Ordnung der Systemgrößenabhängigkeit $2N$ für das Quasiteilchengewicht ohne Bedeutung. Darüberhinaus verursachen diese Diagonalterme nur Korrekturen der Ordnung $O(S^0)$ zu den Spinwellenfrequenzen. Der Maßterm kompensiert Divergenzen aus dem anharmonischen Beitrag aus L_0^4 (4.20), die bei dessen Kombinationen mit G^{Loch} und $g_j^{-1}(\tau)g_j(0)$ auftreten. Die Mischterme der Ordnung $O(\epsilon^4)$ aus (4.15) und (4.16) sind nicht von der Hüpfamplitude abhängig und liefern (s. u.) einen Beitrag der Ordnung $O(S^{-2})$.

Zur konkreten Durchführung der Entwicklung werden periodische Randbedingungen für das Volumen $V = a_L^d 2N = a_L^d L^d$ angenommen, und die Spinwellenmoden ϵ^x und ϵ^y werden in eine Fourierreihe entwickelt:

$$\epsilon_{j+d_0}^{x,y}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta N}} \sum_{\omega, \vec{k}} e^{i(\omega\tau + \vec{k} \cdot \vec{r}_{j+d_0})} \epsilon_{\vec{k}}^{x,y}(\omega) \quad \text{für } i \in \{x, y\}. \quad (4.21)$$

Dabei ist in einer räumlichen Dimension $\omega = \frac{2\pi}{\beta}n$ mit $n \in \mathbf{Z}$, und der Impuls lautet $k = \frac{2\pi}{La_L}n_1$ mit $n_1 = 0, \dots, \frac{L}{2} - 1$. Für $d \geq 2$ ist \vec{k} aus dem reziproken Gitter des zugehörigen Gitters, das man durch Entfernen des B-Untergitters erhält. Weil die Variablen $\epsilon^{x,y}$ reell sind, gilt $\vec{\epsilon}_{\vec{k}}^*(\omega) = \vec{\epsilon}_{-\vec{k}}(-\omega)$. Damit ergibt sich in niedrigster nichttrivialer Ordnung

$$\int_0^\beta L_0 d\tau = -2dJS^2 N\beta + \frac{1}{Jd} \sum_{\vec{k}} \sum_{\omega} \left(\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2 \right) \left(\epsilon_{\vec{k}}^x(\omega) \epsilon_{-\vec{k}}^x(-\omega) + \epsilon_{\vec{k}}^y(\omega) \epsilon_{-\vec{k}}^y(-\omega) \right) \quad (4.22)$$

mit $\omega_{\vec{k}} = 2dJS\sqrt{1 - \gamma_{\vec{k}}^2}$ und $\gamma_{\vec{k}} = \frac{1}{d} \sum_{l=1}^d \cos(k_l a_L)$. Der topologische Term (4.19) trägt in semiklassischer Näherung nichts bei, weil die beiden Summanden sich bis auf eine totale zeitliche Ableitung kompensieren. Desweiteren entfallen alle Erwartungswerte, die von einer Größe ϵ^x bzw. ϵ^y eine ungerade Anzahl aufweisen. Der zu ermittelnde Erwartungswert kann mit Hilfe des Wickschen Theorems berechnet werden. Dabei tritt der folgende Propagator im Impulsraum auf:

$$\langle \epsilon_{\vec{k}}^x(\omega) \epsilon_{-\vec{k}'}^x(-\omega') \rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\omega, \omega'} \frac{Jd}{2(\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2)}. \quad (4.23)$$

Die Frequenzsumme über den Propagator ist unabhängig von der Heisenbergkopplung J und proportional zu $\frac{1}{S}$. Ein Produkt mit n Propagatoren in einem Erwartungswert entspricht daher der Ordnung $\left(\frac{1}{S}\right)^n$ in der semiklassischen Entwicklung. Jede zusätzliche Integration über τ von 0 bis β ergibt einen weiteren Faktor S .

Insgesamt ergibt sich in der semiklassischen Entwicklung die folgende Entwicklung der Greenschen Funktion nach Potenzen von $\frac{1}{S}$:

$$-2G_{\sigma\sigma jj}(\tau) = 1 - \tau^2 A_1 + \frac{1}{S} c_1(t, J, L, \tau) + \frac{1}{S^2} c_2(t, J, L, \tau) + O\left(\frac{1}{S^3}\right). \quad (4.24)$$

Der Koeffizient $t^2 A_1$ von τ wird der Energiedifferenz der beiden Grundzustände in dem Faktor $e^{-\tau(E_0^{tJ} - E_0^{Heis})}$ zugeordnet und wird daher nicht weiter betrachtet. Die Berechnung der Koeffizienten c_1 und c_2 findet sich im Anhang B. Zum Quasiteilchengewicht tragen nur die Terme der Ordnung $O(\tau^0)$ bei, und die Dämpfungsfaktoren $e^{-\omega_{\mathbf{k}}\tau}$ verschwinden im Grenzübergang $\tau \rightarrow \infty$. Das Ergebnis ist in diesem Grenzfall $\tau \rightarrow \infty$

$$c_1(t, J, L) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{JdS}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left(1 + \frac{4t^2}{J^2 d}\right) \quad (4.25)$$

$$c_2(t, J, L) = \frac{1}{4N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{(JdS)^2}{2\omega_{\mathbf{k}} 2\omega_{\mathbf{k}'}} \left\{ -1 - 4 \left(1 + \frac{3t^2}{2dJ^2}\right) \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2 + \omega_{\mathbf{k}'}^2 - \omega_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}^2}{\omega_{\mathbf{k}}^2} \right. \\ \left. + \frac{t^2}{dJ^2} \left[4 + \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}^2 - (2dJS)^2 \frac{(1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2 - \gamma_{\mathbf{k}'}^2 + \gamma_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}'}\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'})}{\omega_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}'}} \right] \right. \\ \left. - 2dJS \frac{\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}'}}{\omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}'}} \left(\frac{\gamma_{\mathbf{k}}^2 - \gamma_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}'}\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}}{\omega_{\mathbf{k}'}} - \frac{\gamma_{\mathbf{k}'}^2 - \gamma_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}'}\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}}{\omega_{\mathbf{k}}} \right) \right\}. \quad (4.26)$$

Die semiklassische Entwicklung läßt sich dann als Entwicklung einer Exponentialfunktion auffassen und die Abhängigkeit von der linearen Systemgröße L bis in die Ordnungen $\frac{1}{S^2}$ und t^2 durch die folgende Formel extrahieren

$$-2G_{\sigma\sigma jj}(\tau) \stackrel{\tau \rightarrow \infty}{\sim} e^{\frac{c_1}{S} + \frac{c_2 - c_1^2/2}{S^2} + O\left(\frac{1}{S^3}\right)} \\ \approx \left(\frac{1}{L}\right)^{-\frac{1}{\ln(L)} \left(\frac{c_1}{S} + \frac{c_2 - c_1^2/2}{S^2} + O\left(\frac{1}{S^3}\right)\right)} \propto L^{-2X^{SC}(S)}. \quad (4.27)$$

Aus dieser Formel erhält man den Exponenten $X^{SC}(S) = \frac{1}{S} X_1^{SC} + \frac{1}{S^2} X_2^{SC} + \dots$ in einer $\frac{1}{S}$ -Entwicklung bis zur Ordnung t^2 . Die Beiträge zum Exponenten sind in der ersten Ordnung in $\frac{1}{S}$ durch $X_1^{SC} = -\frac{c_1}{2\ln L}$ und in der zweiten Ordnung zu $X_2^{SC} = -\frac{c_2 - c_1^2}{4\ln L}$ gegeben. In der durchgeführten Näherung wird der Exponent bis einschließlich der Ordnung S^{-2} berechnet.

4.3.1 Quasiteilchengewicht in $d=1$

In einer räumlichen Dimension lassen sich die Summen in Integrale mit unterer Grenze $\frac{2\pi}{L}$ überführen und für große L exakt auswerten. Es ergibt sich dann für den Exponenten des Quasiteilchengewichtes aus (4.25) in führender Ordnung $\frac{1}{S}$ und bis zur Ordnung t^2 die folgende Abhängigkeit von der als groß angenommenen Systemgröße L

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} G_{\sigma\sigma jj}(\tau) \stackrel{\tau \rightarrow \infty}{\propto} \tan\left(\frac{\pi}{L}\right)^{\frac{1}{2\pi S} \left(1 + \frac{4t^2}{J^2}\right)} \propto \left(\frac{1}{L}\right)^{\frac{1}{2\pi S} \left(1 + \frac{4t^2}{J^2}\right)} \propto L^{-\frac{2}{S} X_1^{SC}}. \quad (4.28)$$

Für $t=0$ ergibt sich der Exponent $\frac{1}{S} X_1^{SC}$ zu $\frac{1}{4\pi S}$. Für klassische Spins verschwindet also der Exponent, und dann konvergiert das Quasiteilchengewicht im thermodynamischen Limes nicht gegen 0. Ein

Vergleich von $2X_1^{SC} = \frac{1}{2\pi}$ bei $t = 0$ für $S = \frac{1}{2}$ mit dem Ergebnis der Bosonisierung des t - J -Modells $X_0 = \frac{3}{16}$ [10] zeigt im Rahmen der durchgeführten Näherungen eine gute qualitative Übereinstimmung des Exponenten. Für kleine t ergibt sich in dieser Ordnung der semiklassischen Näherung ein größerer Exponent, d.h. das gemittelte Quasiteilchengewicht verringert sich mit zunehmender Systemgröße stärker als bei $t = 0$.

Der Anteil der Ordnung $\frac{1}{S^2}$ der semiklassischen Entwicklung des Exponenten ergibt sich zu (siehe 4.27)

$$\begin{aligned}
c_2 - \frac{c_1^2}{2} &= -\frac{1}{\pi^2} \ln\left(\tan\left(\frac{\pi}{L}\right)\right) \left\{ -\frac{1}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{L}\right) + \frac{3}{16} \ln\left(\tan\left(\frac{\pi}{L}\right)\right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{t^2}{J^2} \left[\frac{7}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{L}\right) - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{L} + \frac{1}{4} \ln\left(\tan\left(\frac{\pi}{L}\right)\right) \right] \right\} \\
&\quad + \frac{t^2}{\pi^2 J^2} \left\{ \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{L}\right) \left[5 \cos\left(\frac{2\pi}{L}\right) - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{L} \right] + \frac{\cos^2\left(\frac{2\pi}{L}\right)}{2} \right. \\
&\quad \left. + 2 \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right) \ln \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right) \right\} \tag{4.29} \\
&\approx \frac{1}{\pi^2} \left[-\frac{3}{16} \ln^2 L + \left(\frac{3}{8} \ln \pi - \frac{1}{2}\right) \ln L - \frac{3}{16} \ln^2 \pi + \frac{\ln \pi}{2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{t^2}{J^2} \left(\frac{\ln^2 L}{4} + \ln L \left(\frac{5 \ln \pi}{2} + \frac{\pi}{4} - \frac{7}{2} \right) + \frac{\ln^2 \pi}{4} + \left(\frac{7}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \ln \pi + \frac{5\pi}{4} - \frac{\pi^2}{16} + \frac{1}{2} \right) \right].
\end{aligned}$$

Die logarithmische Abhängigkeit der Exponenten von der Systemgröße zeigt, daß die Exponenten des Quasiteilchengewichtes im thermodynamischen Limes einer Renormierungsgruppenuntersuchung unterzogen werden müssen. Eine Verbindung zu den Renormierungsgleichungen des $NL\sigma$ -Modells läßt sich nicht ohne weiteres herstellen, da die betrachtete Greensche Funktion nicht allein von den Feldern \vec{n} des $NL\sigma$ -Modells abhängt, sondern darüberhinaus auch die $SU(2)$ -Matrix g und zusätzliche Grassmannvariablen η für die Lochfreiheitsgrade enthält. In [10] wird von Sorella und Parola dargelegt, daß der Hüpfsterm im thermodynamischen Limes ein relevanter Term bei Anwendung der Renormierungsgruppe ist.

4.3.2 Quasiteilchengewicht in $d \geq 2$

Für mehr als eine räumliche Dimension kann die Magnonenfrequenz $\omega_{\vec{k}}$ für kleine Impulse \vec{k} durch $\omega_{\vec{k}} \approx 2\sqrt{d}JS|\vec{k}|$ genähert werden, und es ergibt sich in Ordnung $\frac{1}{S}$ ein endlicher Wert für das Quasiteilchengewicht im thermodynamischen Limes

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \lim_{\beta \rightarrow \infty} G_{\sigma\sigma jj}(\tau) \stackrel{\tau \rightarrow \infty}{\sim} \exp\left(-\frac{A(d-1)}{S}(1-BL^{1-d})\left[1 + \frac{4t^2}{dJ^2}\right]\right) \tag{4.30}$$

mit positiven Größen A und B .

Zur Untersuchung des Konvergenzverhaltens der semiklassischen Entwicklung werden die Korrekturterme bis zur Ordnung $O(S^{-2})$ der semiklassischen Näherung berechnet.

In mehr als einer räumlichen Dimensionen liefert die semiklassische Entwicklung zu (4.26) einen endlichen Beitrag in der Ordnung $\frac{1}{S^2}$ mit den positiven Größen A'', B'', C, D

$$c_2 \sim \frac{d}{(d-1)^2} \left[C - DL^{1-d} + \frac{t^2}{J^2} \left(\frac{1}{d} A'' (1 - B'' L^{1-d})^2 \right) + O(L^{2-2d}) \right]. \tag{4.31}$$

Damit ist auch für kleine endliche t das Quasiteilchengewicht bis in diese Ordnung von $\frac{1}{5}$ im thermodynamischen Limes endlich. Die Rechnung zeigt also in mehr als einer räumlichen Dimension, daß keine Orthogonalitätskatastrophe auftritt.

4.4 Numerische Ergebnisse in $d = 1$

Für den Vergleich der semiklassischen Ergebnisse mit numerisch exakten Daten für kleine Systeme mit $S = \frac{1}{2}$ -Spins wurden in einer Dimension die Quasiteilchengewichte für das t - J -Modell auf einer Kette mit L Plätzen und periodischen Randbedingungen mittels exakter Diagonalisierung bestimmt. Die Längen L der Ketten seien Vielfache von 4, und die Plätze seien von $0, \dots, L-1$ fortlaufend nummeriert. Zunächst wird zur Bestimmung des Quasiteilchengewichtes der normierte Grundzustandseigenvektor des Heisenbergmodells ohne Loch

$$|0\rangle_{Heis} = \sum_{\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}} C_{\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}} |\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}\rangle \quad (4.32)$$

mit Gesamtspin $S = 0$ in der S^z -Basis mittels der Lanczos-Prozedur (siehe Anhang C) berechnet. Jeder Zustand der 2^L dimensionalen S^z -Basis entsteht durch die Anwendung von L Elektronenerzeugern mit Spineinstellungen $\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}$ auf das Vakuum ohne Elektronen $|\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}\rangle = c_{0\sigma_0} c_{1\sigma_1} \dots c_{L-1\sigma_{L-1}} |0\rangle$.

Der Eigenvektor des t - J -Modells mit einem Loch wird auf eine ähnliche Weise wie in [10] in einer translationsinvarianten Basis bestimmt. Die Einlochzustände werden durch repräsentative Zustände

$$|0, k, \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{L-1}\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=0}^{L-1} e^{iklaL} (T_g)^l c_{1\sigma_1}^\dagger c_{2\sigma_2}^\dagger \dots c_{L-1\sigma_{L-1}}^\dagger |0\rangle \quad (4.33)$$

mit dem Loch am Ort 0 und Impuls k beschrieben. Der Translationsoperator T_g bewirkt eine Verschiebung der Loch-Spinkonfiguration zu höheren Platznummern, indem die Ortsindizes (modulo L) um einen Platz erhöht werden. Abhängig von der Kettenlänge L und der Lochanzahl ergeben sich dabei aufgrund der fermionischen Natur der $c_{i\sigma_i}$ zusätzliche Phasenfaktoren ± 1 . Für das t - J -Modell entkoppeln dann die Unterräume zu unterschiedlichem Impuls und können getrennt untersucht werden. Der ursprüngliche Einlochzustandsraum hat die Dimension $2^{L-1}L$, während die Basis (4.33) die Dimension 2^{L-1} besitzt.

Die Matrixelemente des Heisenbergtermes in dieser Basis sind reell, da dieser Term das Loch an seinem Ort beläßt. Dagegen erzeugt die Anwendung des Hüpftermes auf einen Zustand (4.33) einen Zustand mit anderer Spinabfolge und mit einer impulsabhängigen Phase e^{-ikaL}

$$-t \sum_{l\sigma} c_{l\sigma}^\dagger c_{l+1\sigma} |0, k, \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{L-1}\}\rangle = -t e^{-ikaL} |0, k, \{\sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_{L-1}, \sigma_1\}\rangle. \quad (4.34)$$

Die Eigenvektoren der Darstellung des Hamiltonoperators in der Basis (4.33) sind explizit vom Impuls abhängig. Der Einlochgrundzustand zum Impuls k wird dann in dieser Basis dargestellt durch

$$|k, 0\rangle_{t,J} = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}} C_{\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}}^k |0, k, \{\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}\}\rangle. \quad (4.35)$$

Für das t - J -Modell ist die z -Komponente des Gesamtspins, S_z , eine Erhaltungsgröße. Aus diesem Grunde zerfällt die Hamiltonsche Matrix in Blöcke zu verschiedenen Eigenwerten von S_z . Da diese Blöcke getrennt diagonalisiert werden können, reduziert sich die Dimension der zu diagonalisierenden Matrix für die Unterräume $S_z = \pm \frac{1}{2}$ auf $\binom{L-1}{L/2}$. Der Gesamtspin und der Hamiltonoperator

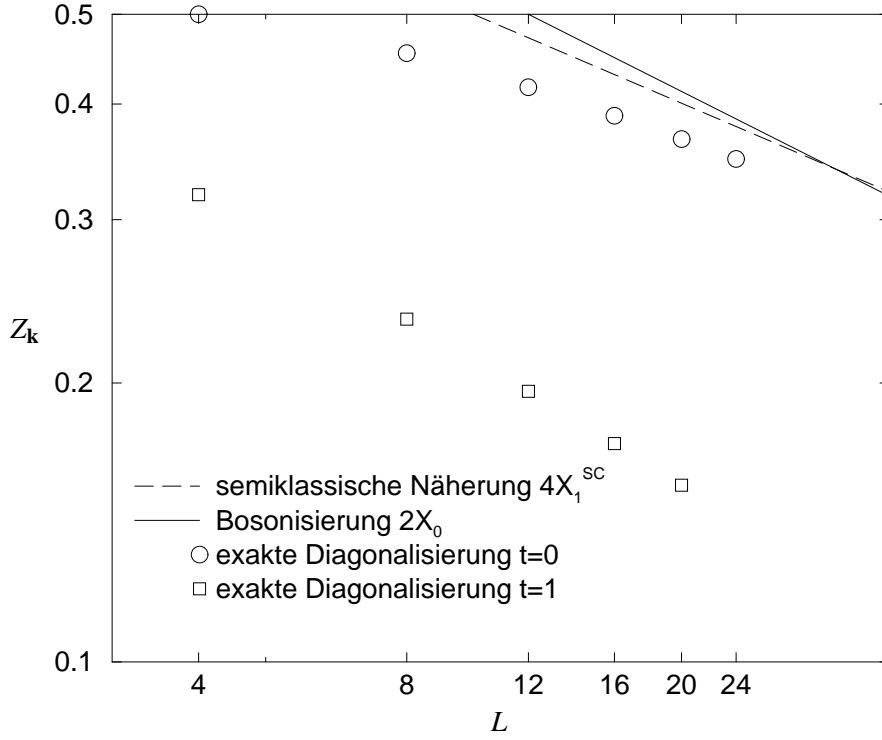


Abbildung 4.1: Das Quasiteilchengewicht Z_k in logarithmischer Darstellung für $t = 0$ und $t = 1$ des Heisenberggrundzustandes mit dem Einlochgrundzustand des t - J -Modells in einer räumlichen Dimension als Funktion der Kettenlänge L für $S = \frac{1}{2}$. Zum Vergleich sind die Steigungen $2X_0$ aus der Bosonisierung des t - J -Modells und $\frac{2}{5}X_1^{SC}$ aus der Ordnung $\frac{1}{5}$ der semiklassischen Rechnung für $t = 0$ und $S = \frac{1}{2}$ dargestellt.

des t - J -Modells vertauschen. Deshalb hat der Grundzustand einen definierten Gesamtspin S und ist im Unterraum der Zustände (4.33) mit $S_z = \frac{1}{2}$ enthalten. Die Hamiltonsche Matrix wird mittels der Lanczos-Methode (siehe Anhang C) diagonalisiert.

Das Grundzustandsband zeigt bei $t = 0$ keine Dispersion. Für sehr kleine t ($t = 0.01$) gilt für die betrachteten Systemgrößen L , die Vielfache von 4 sind, daß der Grundzustandsimpuls bei $k = \frac{\pi}{a_L}$ liegt. Mit wachsendem t bewegt sich der Grundzustandsimpuls nach $k = \frac{\pi}{2a_L}$. Abhängig von der Systemgröße ist dieser Vorgang bei $t = J/2$ ($L=4$) bis etwa $t \approx 0.0725$ ($L=24$) abgeschlossen. Die Ergebnisse für $t < 0$ können aufgrund der Teilchen-Loch-Symmetrie erhalten werden, indem man die Impulse für $t > 0$ um $\frac{\pi}{a_L}$ verschiebt.

Das Quasiteilchengewicht $Z_k = |{}_{tJ}\langle 0, k | c_{k\sigma} | 0 \rangle_{Heis}|^2$ wird mittels der Projektion des Heisenberggrundzustandes bestimmt

$$\begin{aligned}
{}_{tJ}\langle 0, k | c_{k\sigma} | 0 \rangle_{Heis} &= \frac{1}{L} \sum_{\sigma_0, \dots, \sigma_{L-1}} \sum_{\tau_1, \dots, \tau_{L-1}} \sum_{j,l=0}^{L-1} e^{i(kr_j - l' r_l)} C_{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{L-1}}^{k*} C_{\sigma_0, \dots, \sigma_{L-1}} \\
&\quad \cdot \langle 0, \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{L-1} | T_g^j T_g^l c_{l\sigma} | \sigma_0, \dots, \sigma_l, \dots, \sigma_{L-1} \rangle \\
&= \frac{1}{L} \sum_{\sigma_0, \dots, \sigma_{L-1}} \sum_{\tau_1, \dots, \tau_{L-1}} \sum_j e^{i(k - k' + \frac{\pi}{a_L}) r_l} C_{\tau_1, \dots, \tau_{L-1}}^{k*} C_{\sigma_0, \dots, \sigma_{L-1}}.
\end{aligned}$$

$$\cdot \delta_{\sigma\sigma_j} \delta_{\tau_1 \sigma_{(T_g)L-j(j+1)}} \cdots \delta_{\tau_{L-1} \sigma_{(T_g)L-j(j-1)}}. \quad (4.36)$$

Wenn das Quasiteilchengewicht nicht verschwindet, unterscheidet sich der Grundzustandsimpuls des Heisenberggrundzustandes k' vom Grundzustandsimpuls k des t - J -Modells mit einem Loch um eine fermionische Phasenverschiebung $\frac{\pi}{a_L}$.

In Diagramm 4.1 ist für $t = 0$ das Quasiteilchengewicht Z_k , das in diesem Fall keine Abhängigkeit vom Grundzustandsimpuls k des t - J -Modells mit einem Loch zeigt, als Funktion der Systemgröße L dargestellt. Zum Vergleich sind die Exponenten $2X_0 = \frac{3}{8}$ der Bosonisierung des t - J -Modells [10] und das Ergebnis der semiklassische Näherung in niedrigster Ordnung $\frac{2}{3}X_1^{SC} = \frac{1}{\pi}$ für $S = \frac{1}{2}$ angegeben. Die numerischen Ergebnisse schließen den Exponenten $2X_0$ nicht aus.

Für $L=4$ lassen sich analytische Formeln für die Quasiteilchengewichte Z_k ermitteln.

Impuls	Bereich	Energie	Z_k
$k=0$	$0 \leq t < \frac{J}{2}$	$t - J$	$\frac{1}{2}$
	$t > \frac{J}{2}$	$-2t + \frac{J}{2}$	0
$k = \pm \frac{\pi}{2a_L}$	$t \geq 0$	$-\frac{J}{2} - \frac{\sqrt{J^2+12t^2}}{2}$	$\frac{3}{4} \frac{J^2 + J\sqrt{J^2+12t^2} + 8t^2}{2J^2 + J\sqrt{J^2+12t^2} + 24t^2}$
$k = \frac{\pi}{a_L}$	$t \geq 0$	$-t - J$	$\frac{1}{2}$

Die numerischen Ergebnisse für größere Systeme mit $L=8,12,16,20$ und 24 (siehe Fig. 4.2) zeigen, daß bei $k = \frac{\pi}{a_L}$ das Quasiteilchengewicht vom Wert bei $t = 0$ langsam auf $\frac{1}{2}$ bei $t = \frac{J}{2}$, dem Parameterwert des supersymmetrischen Punktes, ansteigt. Mit wachsendem t sinkt es dann wieder. Für $k = 0$ nimmt $Z_{k=0}$ vom Wert bei $t = 0$ bis auf 0 bei $t = 0.5J$ ab. Die Quasiteilchengewichte der anderen Impulse interpolieren stetig bis $t = 0.5J$ zwischen den Eigenschaften bei den Impulse $k = 0$ und $k = \frac{\pi}{a_L}$. Für $t > 0.5$ dehnt sich die Zone mit verschwindendem Z_k um $k=0$ langsam aus. Dort haben die Grundzustände einen Gesamtspin $S \geq \frac{3}{2}$ und damit in natürlicher Weise einen verschwindenden Überlapp mit dem projizierten Heisenberggrundzustand, der ohne Loch einen verschwindenden Gesamtspin besitzt.

In Diagramm 4.3 sind für verschiedene L die Quasiteilchengewichte des Grundzustandes in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t dargestellt. Für jede Kurve zu festem L erkennt man deutlich zwei unterschiedliche Parameterbereiche für die Hüpfamplitude t . Der Bereich I um $t = 0$ ist durch eine negative Krümmung der Graphen charakterisiert. In diesem Bereich variiert der Grundzustandsimpuls im Intervall $\frac{\pi}{2a_L} < k_0 \leq \frac{\pi}{a_L}$. Für größere t im Bereich II liegt der Grundzustand bei $k = \frac{\pi}{2a_L}$. In den beiden Bereichen fällt Z_k für die betrachteten Kettenlängen $4 \leq L \leq 28$ näherungsweise nach einem Potenzgesetz $L^{-2X^{num}}$ ab. Der Exponent X^{num} hat jedoch in den Bereichen I und II stark unterschiedliche Werte (siehe Diagramm 4.1): $2X^{num} \approx 0.2$ im Bereich I und $2X^{num} \approx 0.45$ im Bereich II. Mit wachsender Kettenlänge L schrumpft der Bereich I und Bereich II nähert sich dem Ursprung.

Zur Bestimmung der Größe des Bereiches I im thermodynamischen Limes und des Konvergenzverhaltens der t^2 -Entwicklung bei $t = 0$ wurde die über die Brillouinzone gemittelte Krümmung K_0 des Quasiteilchengewichtes bei $t = 0$ für festes L gemäß den Beziehungen

$$K_k(t) = \frac{1}{2t^2} \left(\left| \frac{Z_k(t)}{Z_k(0)} \right| - 1 \right)$$

$$K_0 = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{L} \sum_k K_k(t) \quad (4.37)$$

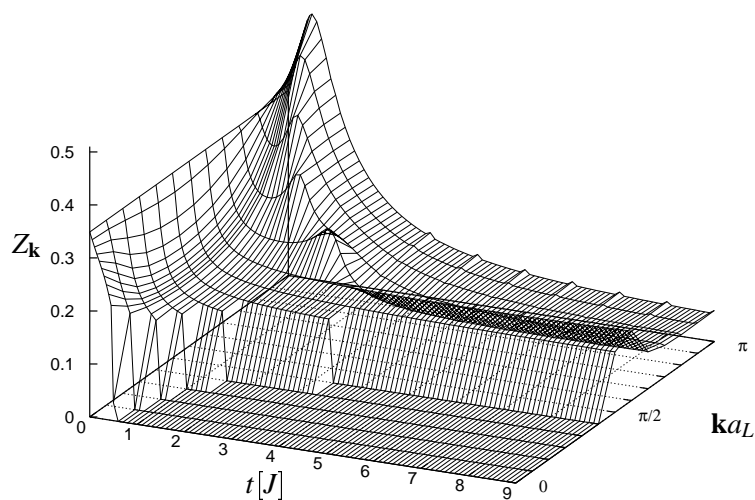


Abbildung 4.2: Das Quasiteilchengewicht Z_k für $S = \frac{1}{2}$ für den jeweiligen Grundzustand aus exakter Diagonalisierung für die Kettenlänge $L = 24$ als Funktion der Hüpfamplitude t und des Impulses ka_L .

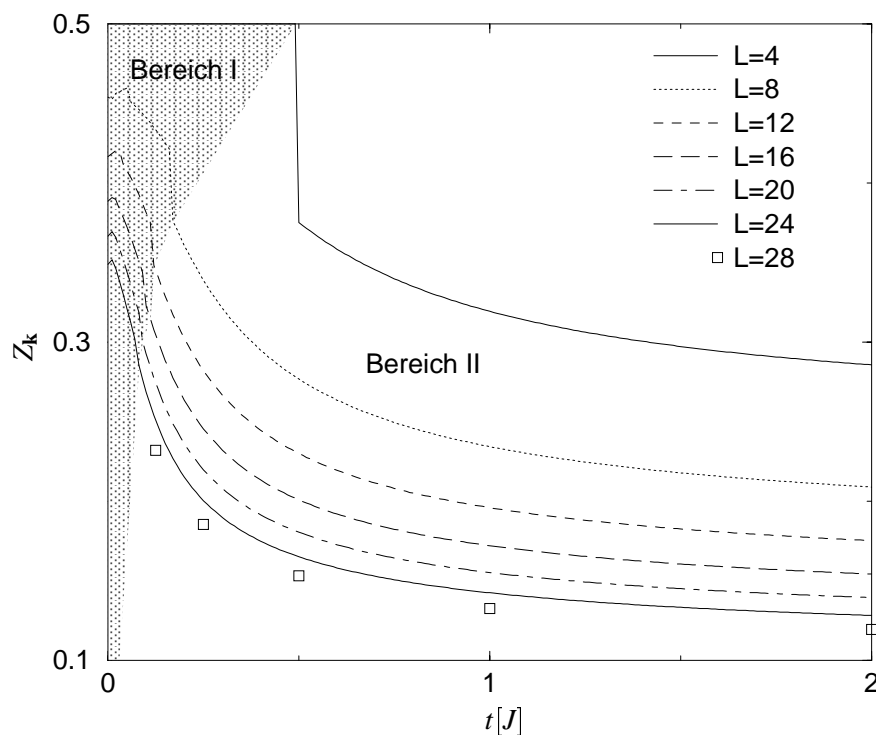


Abbildung 4.3: Das Quasiteilchengewicht Z_k für $S = \frac{1}{2}$ als Funktion der Hüpfamplitude t für den jeweiligen Grundzustand aus exakter Diagonalisierung für verschiedene Kettenlängen L . Im Bereich I liegt der Impuls des Grundzustandes k zwischen $\frac{\pi}{2a_L} < k \leq \frac{\pi}{a_L}$, während im Bereich II der Grundzustand bei $k = \frac{\pi}{2a_L}$ liegt.

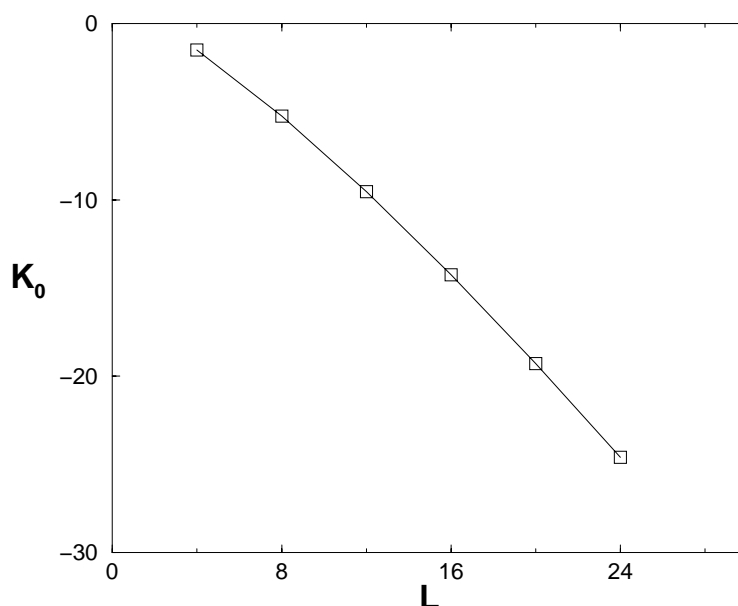


Abbildung 4.4: Die gemittelte Krümmung K_0 für $S = \frac{1}{2}$ aus exakter Diagonalisierung für verschiedene Kettenlängen L . Die Datenpunkte ergeben in guter Näherung eine Gerade.

extrapoliert. Die numerischen Ergebnisse sind in Diagramm 4.4 dargestellt. Es ergibt sich ein nahezu lineares Anwachsen des Betrages der Krümmung K_0 mit der Kettenlänge L . Die gemittelte Krümmung läßt sich auch aus der semiklassischen Entwicklung der Greenschen Funktion (4.27) und (4.29) berechnen. Die so ermittelte Krümmung divergiert nach dieser Rechnung logarithmisch mit der Systemgröße. Sie ist aber für $S = \frac{1}{2}$ um eine Größenordnung kleiner als die numerisch berechnete Krümmung des t - J -Modells. Es ist daher zu erwarten, daß die semiklassischen Entwicklung in höheren Ordnungen noch wesentliche Beiträge zum Wert der Krümmung liefert. Das nahezu lineare Ansteigen des Betrages der Krümmung K_0 mit der Systemgröße L unterstützt die Vermutung, daß im thermodynamischen Limes der Bereich I auf $t = 0$ beschränkt ist und daß das t - J -Modell für $S = \frac{1}{2}$ für $t = 0$ und $t \neq 0$ stark unterschiedliche Eigenschaften besitzt. Dieses stimmt mit Aussage aus [10] überein, daß der Hüpfterm im thermodynamischen Limes ein relevanter Operator für die Renormierungsgruppenbehandlung ist.

4.5 Diskussion der Ergebnisse

In einer räumlichen Dimension wurde der Exponent $2X^{SC}(S) = \frac{2}{5}X_1^{SC} + \frac{2}{5^2}X_2^{SC} + \dots$ (4.27) für die Abhängigkeit des Quasiteilchengewichtes von der Systemgröße L in einer Umgebung von $t = 0$ im Rahmen einer semiklassischen Entwicklung nach Potenzen der inversen Spinlänge $\frac{1}{5}$ bis zur zweiten Ordnung berechnet. Der Beitrag niedrigster Ordnung $\frac{2}{5}X_1^{SC} = \frac{1}{2\pi S}(1 + \frac{4t^2}{J^2})$ ergibt ein Potenzgesetz für das Verschwinden des Quasiteilchengewichtes. Ein Vergleich mit dem Exponenten $2X_0 = \frac{3}{8}$ aus der Bosonisierung des t - J -Modells mit einem Loch bei $t = 0$ und $S = \frac{1}{2}$ [10] liefert eine qualitative Übereinstimmung der Ergebnisse. Im Term zweiter Ordnung X_2^{SC} des Exponenten sind logarithmisch von L abhängige Beiträge enthalten, die zu einer logarithmischen Divergenz der gemittelten Krümmung des Quasiteilchengewichtes $\frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}} \partial_t^2 Z_{\mathbf{q}}^{(t)}|_{t=0}$ (siehe (4.7)) mit der Systemgröße L führen.

Die numerischen Ergebnisse aus exakter Diagonalisierung kleiner Systeme bei $S = \frac{1}{2}$ sind verträglich

mit dem exakten Exponenten $2X_0$ bei $t=0$. Sie können aber für die semiklassische Entwicklung keine Entscheidung bezüglich der Existenz von logarithmischen Korrekturen in X_2^{SC} erbringen. Das numerisch berechnete Quasiteilchengewicht zeigt zwei Bereiche mit Potenzgesetzen $Z_k \propto L^{-2X^{num}}$ und stark unterschiedlichen Exponenten X^{num} . In einer Umgebung von $t = 0$, die, wie die Krümmung K_0 zeigt, mit zunehmender Systemgröße auf infinitesimale Hüpfamplituden schrumpft, beträgt $2X^{num} \simeq 0.2$. Im zweiten Bereich, d.h. für endliche Hüpfamplitude, wächst der Exponent auf $2X^{num} \simeq 0.45$ bei $t = 1$ an. Die Unterschiede zwischen dem semiklassischen und den numerischen Ergebnissen deuten an, daß zum Quasiteilchengewicht alle Ordnungen der semiklassischen Näherung in $\frac{1}{5}$ beitragen.

Im thermodynamischen Limes ergibt sich für endliche S für alle Werte der Hüpfamplitude t ein Verschwinden des Quasiteilchengewichtes. Im klassischen Grenzfall $S = \infty$ ist, wie zu erwarten, das Quasiteilchengewicht endlich, da $X^{SC}(\infty)$ verschwindet. Die logarithmische Abhängigkeit von L in X_2^{SC} sowohl für $t = 0$ als auch für $t \neq 0$ deutet an, daß im thermodynamischen Limes die Modellparameter einer Renormierung unterliegen und unterstützt die Aussage aus [10], daß der Hüpfterm im Sinne der Renormierungsgruppe ein relevanter Term ist.

In zwei und mehr räumlichen Dimension zeigt die semiklassische Rechnung bis zur Ordnung $O(S^{-2})$ ein endliches Quasiteilchengewicht im thermodynamischen Limes und damit keine Hinweise auf ein Nichtfermiflüssigkeitsverhalten. In der Literatur sind die numerischen und die analytischen Ergebnisse in zwei Dimensionen bezüglich des Quasiteilchengewichtes nicht eindeutig. Leung und Gooding [28] schließen aus der Extrapolation von Resultaten der exakten Diagonalisierung für endliche Hüpfamplitude t , daß das Quasiteilchengewicht im thermodynamischen Limes endlich bleibt. Dabei entsprechen die untersuchten Systemgrößen $2N \leq 32$ einer kleinen linearen Längenausdehnung $L < 6$. Das Ergebnis der semiklassischen Rechnung widerspricht den Argumentation aus [2], die besagt, daß aufgrund des quantenmechanischen Phase-String-Effektes das Quasiteilchengewicht im thermodynamischen Limes verschwindet.

Kapitel 5

Das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter

Bisherige Untersuchungen des t - J -Modells betreffen bis auf wenige Ausnahmen [14, 15, 29] die lineare Kette und das Quadratgitter. Wie schon in der Einleitung erwähnt, wird das t - J -Modell auf dem Quadratgitter als eine vereinfachte Beschreibung der Ladungsträgerdynamik in den Kupferoxydebenen der hochtemperatursupraleitenden Kuprate angesehen. Es wird allgemein vermutet, daß im Verständnis der Dynamik von Löchern in dem ohne Dotierung antiferromagnetisch geordneten Spinhintergrund dieser Ebenen der Schlüssel zum Verständnis des Mechanismus liegt, der zur Hochtemperatursupraleitung führt.

Auf dem Quadratgitter wird die Dynamik von Löchern entscheidend durch die kollineare Struktur des Néel geordneten Spinzustandes geprägt, wie sie auf bipartiten Gittern generell vorliegt. Indessen haben Materialien mit magnetischen Ionen auf nicht-bipartiten Gittern in jüngster Zeit zunehmend an Interesse gewonnen. Insbesondere sind eine Reihe von Systemen synthetisiert und untersucht worden, deren magnetische Ionen Dreiecksgitterplätze besetzen [30, 31]. Die Experimente legen bei einigen dieser Materialien die Existenz der in Figur 5.1 dargestellten planaren 120° Spinstruktur nahe. Experimentelle Untersuchungen der Lochdynamik in einem solchen Spinhintergrund gibt es bislang nicht. Da aber zu erwarten ist, daß die Struktur des Spinhintergrundes die Lochdynamik stark beeinflusst, ist die Untersuchung des t - J -Modells auf dem Dreiecksgitter von grundsätzlichem Interesse.

Die in Figur 5.1 gezeigte Spinstruktur mit den drei Untergittern A , B und C repräsentiert den Grundzustand des *klassischen* Heisenbergmodells auf dem Dreiecksgitter. Das Quantenmodell mit Spin $1/2$ ist frustriert, d. h. auf dem Dreiecksgitter kann nicht jeder Spin von sechs antiparallelen nächsten Nachbarn umgeben sein. Dennoch ist auch der Grundzustand des *quantenmechanischen* Heisenbergmodells auf dem Dreiecksgitter, d. h. das t - J -Modell ohne Löcher, langreichweitig geordnet [12]. Figur 5.1 gibt die geordnete Untergitterstruktur des Dreiecksgitterantiferromagneten im Sinne quantenmechanischer Erwartungswerte richtig wieder.

Das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter unterscheidet sich von dem Modell auf dem Quadratgitter in zwei wesentlichen Punkten. Zum einen kann, wie sich zeigen wird, auf dem Dreiecksgitter ein Loch anders als auf hyperkubischen Gittern *ohne* Emission oder Absorption eines Magnons auf einen seiner nächsten Nachbarplätze hüpfen. Zum anderen ist die Teilchen-Loch-Symmetrie, die auf bipartiten Gittern vorhanden ist, auf dem Dreiecksgitter gebrochen [15], so daß positive und negative Hüpfamplituden t einen unterschiedlichen Einfluß auf die physikalischen Eigenschaften haben. In Figur 5.2 ist die Zustandsdichte eines einzelnen Elektrons auf dem Dreiecksgitter im Vergleich zum Quadratgitter dargestellt. Deutlich ist die gebrochene Symmetrie $t \rightarrow -t$ für das Dreiecksgitter erkennbar.

Das Vorgehen in diesem Kapitel ist wie folgt: Zunächst wird in Spinwellennäherung ein effektiver Hamiltonoperator H_Δ für ein Loch hergeleitet, das sich im geordneten Spinzustand des Dreiecksgit-

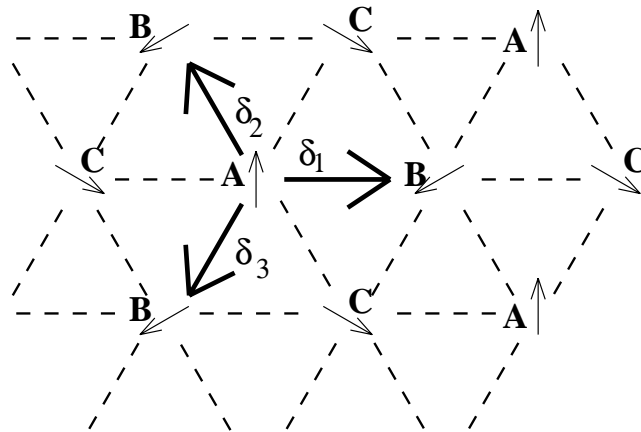


Abbildung 5.1: Das Dreiecksgitter mit den drei magnetischen Untergittern A,B und C. Die Vektoren δ_i kennzeichnen Abstände zwischen nächsten Nachbarn.

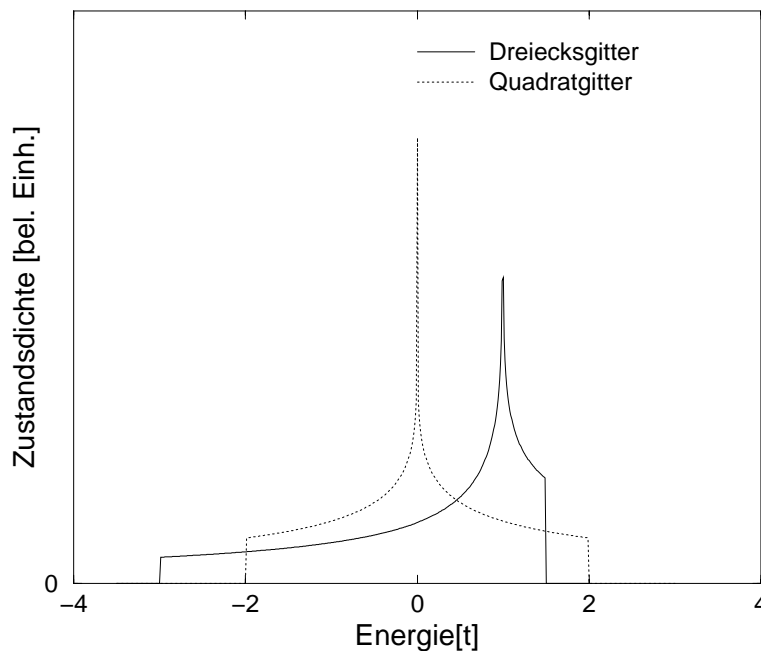


Abbildung 5.2: Zustandsdichte in Abhängigkeit von der Energie in Einheiten von t für ein einzelnes Elektron auf dem Dreiecks- bzw. Quadratgitter. Deutlich ist die gebrochene Symmetrie $t \rightarrow -t$ für das Dreiecksgitter erkennbar.

terantiferromagneten bewegt. Besondere Aufmerksamkeit wird der korrekten Behandlung der Spinwellenmoden gewidmet, die zu zusätzlichen Termen in H_Δ führen. Diese Terme fehlen in dem von Azzouz und Dombre [15] verwendeten Hamiltonoperator, der daher die $SU(2)$ -Rotationssymmetrie im Spinraum nicht erfüllt. Für den hier hergeleiteten Hamiltonoperator wird dann in selbstkonsistenter Bornscher Näherung (SCBA) die spektrale Dichte und die Dispersion eines einzelnen Loches untersucht und mit Resultaten aus der exakten Diagonalisierung kleiner Systeme verglichen.

Im darauffolgenden Abschnitt wird für verschiedene fixierte klassische Spinhintergründe die Verteilung der Lochdichte behandelt. Anschließend werden diese semiklassischen Resultate mit Ergebnissen verglichen, die mittels exakter Diagonalisierung kleiner Systeme mit bis zu 27 Plätzen erhalten

wurden.

Der dritte Abschnitt dehnt die Untersuchungen auf das t - J -Modell mit mehreren Löchern auf dem Dreiecksgitter aus. Betrachtet werden für kleine Systeme die Loch-Loch-Korrelationsfunktion und die elektronische Impulsverteilung, die mittels exakter Diagonalisierung auf Parallelrechnern gewonnen wurden.

Im letzten Kapitel werden verdünnte Heisenbergantiferromagneten auf dem Dreiecksgitter untersucht.

5.1 Effektiver Hamiltonoperator für ein Loch auf dem Dreiecksgitter

Als Ausgangspunkt der Spinwellenentwicklung wird der klassische Grundzustand mit 120° -Struktur verwendet. In den kohärenten Zuständen kann dieser planare Spingrundzustand am Ort j durch die Winkel $\phi_j^{(0)} = \frac{2\pi}{3}, 0, -\frac{2\pi}{3}$ und $\theta_j^{(0)} = \frac{\pi}{2}$ für die drei magnetischen Untergitter A, B und C beschrieben werden. Der Hamiltonsche Teil der Wirkung des t - J -Modells für das Dreiecksgitter (2.26) wird für ein Loch nun quadratisch in den Abweichungen aus dem Grundzustand

$$\begin{aligned} X_j &= \frac{\phi_j - \phi_j^{(0)}}{\sqrt{2}} \equiv \frac{a_j + a_j^*}{\sqrt{2}} \\ P_j &= \frac{\theta_j - \theta_j^{(0)}}{\sqrt{2}} \equiv \frac{a_j - a_j^*}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (5.1)$$

entwickelt. X_j und P_j sind, wie man aus dem kinetischen Teil der Wirkung $i2SA_{\tau,j}^z = -iS(\dot{\psi}_j + \dot{\phi}_j \cos(\theta_j)) \approx iS(-\dot{\psi}_j + 2\dot{X}_j P_j)$ des Spins j sieht (vgl. (2.22) und (2.5)-(2.6)), kanonisch konjugierte Variablen. Der Heisenbergterm stellt sich in diesen Variablen wie folgt dar:

$$\langle \omega_\tau | H_{J,\Delta} | \omega_\tau \rangle = \langle \omega_\tau | H_{J,\Delta}^{0-Loch} | \omega_\tau \rangle + \langle \omega_\tau | H_{J,\Delta}^{1-Loch} | \omega_\tau \rangle \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} \langle \omega_\tau | H_{J,\Delta}^{0-Loch} | \omega_\tau \rangle &= \frac{JS^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 \left\{ -1 + (X_i - X_{i+\delta_l})^2 + (P_i + P_{i+\delta_l})^2 + 2P_i P_{i+\delta_l} \right\} \\ &= -\frac{3NJS^2}{2} + \frac{JS^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 \left\{ a_i a_i^* + a_i^* a_i + a_{i+\delta_l} a_{i+\delta_l}^* + a_{i+\delta_l}^* a_{i+\delta_l} \right. \\ &\quad \left. - \frac{3}{2} (a_i a_{i+\delta_l} + a_i^* a_{i+\delta_l}^* + a_{i+\delta_l} a_i + a_{i+\delta_l}^* a_i^*) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} (a_i a_{i+\delta_l}^* + a_{i+\delta_l} a_i^* + a_i^* a_{i+\delta_l} + a_{i+\delta_l}^* a_i) \right\} \end{aligned} \quad (5.3)$$

$$\langle \omega_\tau | H_{J,\Delta}^{1-Loch} | \omega_\tau \rangle = \frac{JS^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 \sqrt{6} (\eta_{i+\delta_l}^* \eta_{i+\delta_l} + \eta_i^* \eta_i) (X_i - X_{i+\delta_l}) \quad (5.4)$$

$$= -\frac{JS^2 \sqrt{3}}{4} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 (\eta_{i+\delta_l}^* \eta_{i+\delta_l} + \eta_i^* \eta_i) (a_i + a_i^* - a_{i+\delta_l} - a_{i+\delta_l}^*). \quad (5.5)$$

In der Gitterzelle mit periodischen Randbedingungen gibt es N Plätze. $\delta_1 = (1, 0)$, $\delta_2 = (-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$ und $\delta_3 = (-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$ sind die Richtungsvektoren zu einem der beiden anderen Untergitter (siehe Fig.

5.1). Die Terme in (5.5) enthalten dabei nur die lineare Ordnung der Amplituden a und a^* , während der Nulllochterm des Hamiltonoperators bis in zweite Ordnung entwickelt wurde.

In der Entwicklung (5.5) ist also nur die Magnonenemission und -absorption an einem ruhenden Loch berücksichtigt. Die Streuung von Magnonen an Löchern und die Magnonenwechselwirkungen untereinander sind vernachlässigt. Die Amplituden a_i und a_i^* entsprechen Operatoren a_i und a_i^\dagger mit bosonischen Vertauschungsrelationen.

Eine Fouriertransformation der Variablen liefert den entsprechenden Hamiltonoperator

$$H_{J,\Delta}^{0-Loch} = \sum_{\mathbf{q}} \left\{ (2 + w_{\mathbf{q}}) a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} - \frac{3w_{\mathbf{q}}}{2} (a_{-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}}^\dagger + a_{-\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}) \right\} - \frac{3JS^2N}{2}. \quad (5.6)$$

Die Impulssummation wird über die Brillouinzone des Gitters (s. Figur 5.5) durchgeführt. Die reellen Größen $w_{\mathbf{q}}$ und $\gamma_{\mathbf{q}}$ sind definiert durch $w_{\mathbf{q}} + i\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{3} \sum_{l=1}^3 e^{i\mathbf{q} \cdot \delta_l}$. Der Hamiltonoperator kann durch eine Bogoliubov-Transformation

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{q}} &= u_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}} b_{-\mathbf{q}}^\dagger \\ a_{\mathbf{q}}^\dagger &= v_{\mathbf{q}} b_{-\mathbf{q}} + u_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger \end{aligned} \quad (5.7)$$

mit

$$u_{\mathbf{q}} = \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{3JS(1+w_{\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{q}}} + 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (5.8)$$

$$v_{\mathbf{q}} = \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{3JS(1+w_{\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{q}}} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (5.9)$$

$$\omega_{\mathbf{q}} = 3JS \sqrt{(1+2w_{\mathbf{q}})(1-w_{\mathbf{q}})} \quad (5.10)$$

diagonalisiert werden mit dem Ergebnis [32]

$$H_{J,\Delta}^{0-Loch} = -\frac{3NJS^2}{2} + \frac{S}{2} \sum_{\mathbf{q}} (\omega_{\mathbf{q}} - 1) + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}}. \quad (5.11)$$

Diese Grundzustandsenergie stimmt sehr gut mit den Resultaten aus exakter Diagonalisierung überein [33]. Die Magnonenfrequenz $\omega_{\mathbf{q}}$ ist in Figur 5.3 dargestellt und weist drei Nullmoden auf, die globalen Rotationen entsprechen.

Die Entwicklung des Hüpftermes aus (2.26) ist komplizierter. Sie muß so erfolgen, daß die Invarianz des Hüpftermes unter homogenen globalen SU(2)-Rotationen (Nullmoden) erhalten bleibt. Führt man eine naive Entwicklung in den Variablen (5.1) durch, so erhält man eine Ankopplung der Löcher an die Magnonennullmoden von $H_{J,\Delta}^{0-Loch}$

$$\begin{aligned} H_{t,\Delta} &= 2tS \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 \eta_{i+\delta_l}^* \eta_i e^{\frac{i}{2}(\psi_i - \psi_{i+\delta_l})} \left[\cos \left(\frac{\phi_i^{(0)} - \phi_{i+\delta_l}^{(0)}}{2} \right) - \right. \\ &\quad \left. \sin \left(\frac{\phi_i^{(0)} - \phi_{i+\delta_l}^{(0)}}{2} \right) \left(\frac{X_i - X_{i+\delta_l} + i(P_i + P_{i+\delta_l})}{\sqrt{2}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

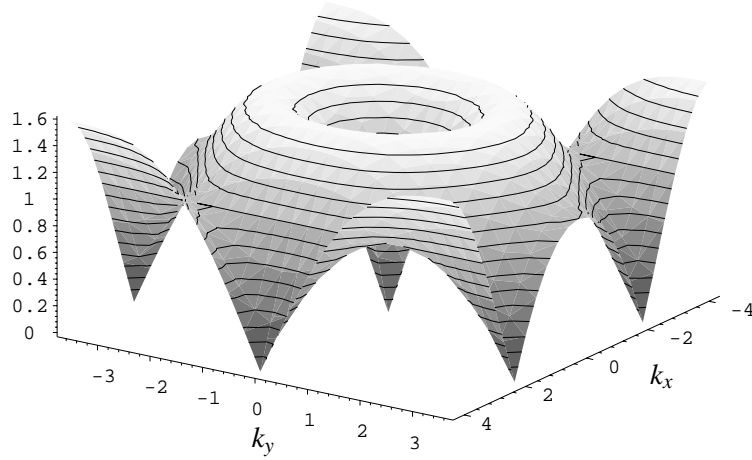


Abbildung 5.3: Die Spinwellenenergie $\omega_{\mathbf{k}}$ über der Brillouinzone des Dreiecksgitters. Die Nullstellen kennzeichnen die Punkte Γ beziehungsweise K der Brillouinzone

Untersucht man nämlich, wie die räumlich homogene infinitesimale $SU(2)$ -Drehung $D(\vec{\varepsilon}) = e^{i\vec{\varepsilon} \cdot \vec{\sigma}}$ angewandt auf die $SU(2)$ -Matrizen g_j wirkt, so ergeben sich in den kleinen Winkeln $\vec{\varepsilon}$ bis einschließlich linearer Ordnung die folgenden Transformationen der Winkelvariablen:

$$\begin{aligned} X'_j &= X_j + \sqrt{2}\varepsilon^z \\ P'_j &= P_j + \sqrt{2}(\varepsilon^x \cos \phi_j^{(0)} + \varepsilon^y \sin \phi_j^{(0)}) \\ \Psi'_j &= \Psi_j + 2(\varepsilon^x \sin \phi_j^{(0)} - \varepsilon^y \cos \phi_j^{(0)}), \end{aligned} \quad (5.13)$$

wobei $\phi_j^{(0)}$ wieder den klassischen Grundzustand beschreibt. Die Grassmannvariablen η sind invariant unter dieser Transformation. Die ε^z zugeordnete Nullmode hebt sich in (5.12), aber die Nullmoden ε^x und ε^y koppeln über P_j linear an die Löcher an. Die infinitesimale Transformation koppelt somit die Phase ψ linear mit P .

Im Falle des Quadratgitters ist $\phi_j^{(0)} = \pm \frac{\pi}{2}$, Ψ_j und P_j sind entkoppelt, und die Nullmoden fallen aus (5.12) heraus.

Für das Dreiecksgitter wird nun mittels einer kanonischen Transformation

$$\Psi_i \rightarrow \tilde{\Psi}_i + \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\tilde{P}_i + \frac{2}{3} \sum_{l=1}^3 \tilde{P}_{i+\delta_l} \right) \quad (5.14)$$

$$X_i \rightarrow \tilde{X}_i + \frac{1}{2S\sqrt{6}} \left(\eta_i^* \eta_i + \frac{2}{3} \sum_{l=1}^3 \eta_{i-\delta_l}^* \eta_{i-\delta_l} \right) \quad (5.15)$$

$$P_i \rightarrow \tilde{P}_i$$

für den verwendeten Grundzustand mit $\phi_j^{(0)} = \frac{2\pi}{3}, 0, -\frac{2\pi}{3}$ und $\theta_j^{(0)} = \frac{\pi}{2}$ erreicht, daß die neue Variable $\tilde{\Psi}$ invariant unter homogenen Drehungen $D(\vec{\varepsilon})$ im Spinraum ist, wie man durch explizites Nachrechnen sieht. (5.14) ist so konstruiert, daß die Entwicklung des Faktors $e^{\frac{i}{2}(\Psi_i - \Psi_{i+\delta_l})}$ in (5.12) nach den Variablen \tilde{P}_j die Nullmoden ε_x und ε_y im Hüpfterm kompensiert. Die Transformation (5.15) und

(5.14) ist kanonisch, da der Zeitentwicklungsterm $S(1 - \eta_j^\dagger \eta_j)(-\dot{\psi}_j + 2\dot{X}_j P_j)$ unter dieser Transformation bis auf eine totale zeitliche Ableitung invariant bleibt. Die neue Variable $\tilde{\psi}$ kann nach einer Redefinition der Grassmannvariablen $\eta_j \rightarrow \eta_j e^{\frac{i}{2}(\tilde{\psi}_j - 3\phi_j^{(0)})} = \tilde{h}$ ausintegriert werden.

In der Operatorformulierung erhält man den effektiven Hamiltonoperator des t - J -Modells auf dem Dreiecksgitter in Spinwellennäherung in Impulsdarstellung zu

$$H_\Delta = H_{J,\Delta}^{0Loch} + \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{q}} \tilde{h}_{\mathbf{q}}^\dagger \tilde{h}_{\mathbf{q}} \quad (5.16)$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \left\{ \tilde{h}_{\mathbf{q}}^\dagger \tilde{h}_{\mathbf{q}'} f_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} (u_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} + v_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} b_{-\mathbf{q}+\mathbf{q}'}) \right\} + h.c. \quad (5.17)$$

Die Kopplung $f_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}$ ergibt sich mittels der kanonischen Transformation aus (5.12) und (5.5):

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} &= 3\sqrt{3}i [-2tS\gamma_{\mathbf{q}'} + JS^2\gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'}] \\ &+ \sqrt{3} \left(\frac{1}{2} + w_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} - i\gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \right) [2tS(w_{\mathbf{q}} - w_{\mathbf{q}'}) + 2JS^2(1 - w_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'})] \end{aligned} \quad (5.18)$$

und die freie Dispersion ist

$$\varepsilon_{\mathbf{q}} = -6tSw_{\mathbf{q}} + 3JS^2. \quad (5.19)$$

Die Dispersion eines Loches $\varepsilon_{\mathbf{q}}$ in nullter Ordnung Spinwellennäherung ist aufgrund des magnonenunabhängigen Hüpfens die Hälfte der Dispersion eines freien Teilchens auf dem Dreiecksgitter und enthält die Energie, die man für das Aufbrechen von 6 frustrierten magnetischen Bindungen im klassischen Grundzustand aufwenden muß. Der Hamiltonoperator $H_0^{(t)} = \sum_{\mathbf{q}} (\varepsilon_{\mathbf{q}} - 3JS^2)$ beschreibt den Anteil, der das magnonenunabhängige Hüpfen in der nicht kollinearen Struktur beschreibt. $H_1^{(t)}$ enthält die Anteile proportional zur Hüpfamplitude t in (5.17), die die Hüpfprozesse unter Emission oder Absorption von Magnonen darstellen.

5.1.1 Bornsche Näherung für die Selbstenergie

In diesem Abschnitt wird der Loch-Magnonen-Beitrag zur Selbstenergie eines Loches in (5.17) mittels selbstkonsistenter Bornscher Näherung (SCBA) für $S = \frac{1}{2}$ untersucht. Für das t - J -Modell auf dem Quadratgitter liefert diese Methode [24] eine gute Übereinstimmung mit den Resultaten aus exakter Diagonalisierung [34]. In dieser Näherung wird die Loch-Magnon-Wechselwirkung (5.17) als kleine Störung des Hamiltonoperators (5.16) aufgefaßt. Die Näherung ist eine Summation aller Selbstenergiediagramme eines Loches mit beliebig vielen Vertizes, bei denen keine sich kreuzenden Magnonenlinien auftreten. Dies bedeutet eine Vernachlässigung der Vertexkorrekturen zum Loch-Magnon-Vertex (5.18). Diagramme mit geschlossenen Lochschleifen wie z.B. in Figur 5.4 a) fehlen, weil im t - J -Modell keine virtuellen Löcher möglich sind.

Die Greensche Funktion des ungestörten Loches ist gegeben durch

$$G_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{q}} + i\hat{\eta}} \quad (5.20)$$

und beinhaltet bereits exakt die Lochdispersion, die die Hüpfprozesse ohne Magnonenemission oder -absorption aufgrund der frustrierten Spineinstellung beschreibt. Der sehr kleine Verbreiterungsparameter $\hat{\eta}$ dient dazu, Singularitäten an den Polen der Greenschen Funktion in den numerischen Rechnungen zu entfernen. Die Selbstkonsistenzgleichung der SCBA lautet dann nach Aufsummation aller

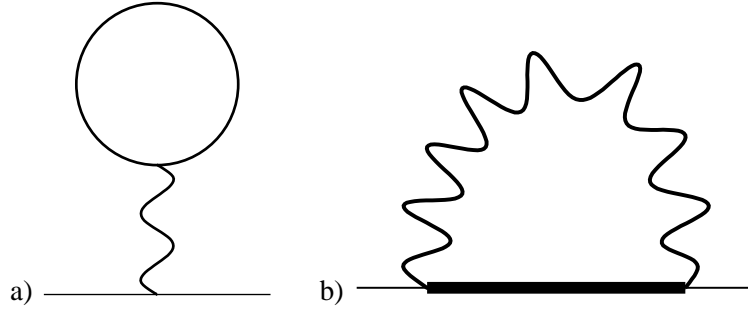


Abbildung 5.4: a) Diagramm, bei dem die Lochanzahl nicht erhalten ist, und b) Selbstkonsistenzgleichung in Diagrammdarstellung. Die gewellten Linien kennzeichnen die Magnonenpropagation und die dicken Geraden die Lochpropagation mittels G . Die dünnen Linien deuten die Punkte an, wo äußere Beine G_0 ansetzen.

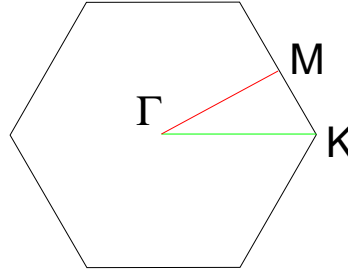


Abbildung 5.5: Die Brillouinzone für das Dreiecksgitter

Diagramme

$$\Sigma^{SCBA}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |u_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} f_{\mathbf{k},\mathbf{q}} + v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} f_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^*|^2 G^{SCBA}(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega - \omega_{\mathbf{q}}) \quad (5.21)$$

mit

$$G^{SCBA}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma^{SCBA}(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (5.22)$$

Das resultierende Diagramm für die Selbstenergie ist in Figur 5.4 b) dargestellt.

Die Selbstkonsistenzgleichung (5.21) für das Dreiecksgitter wurde für ein System mit 36×36 -Plätzen mit periodischen Randbedingungen numerisch gelöst. Dazu wurde für die diskreten Punkte \mathbf{k} in der Brillouinzone (Fig. 5.5) die Selbstenergie $\Sigma^{SCBA}(\mathbf{k}, \omega)$ in ω diskretisiert. Die Selbstenergie wurde dann für die Frequenzen $\omega - \omega_{\mathbf{q}}$ aus den 7 nächsten benachbarten Stützstellen interpoliert [35]. Durch Einsetzen der Greenschen Funktion (5.22) wird die Selbstenergie in diesem Verfahren iterativ berechnet. Die so erhaltene Lösung der Gleichung (5.21) hängt nicht vom Startwert von $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ ab. Der Konvergenzprozeß ist abgeschlossen, sobald sich zwei verschiedene Kontrollgrößen nicht mehr ändern. Eine Größe ist die Selbstenergie an ausgewählten Frequenzen ω . Als zweites Konvergenzkriterium wird das Frequenzintegral über die spektrale Dichte

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\mathbf{k}, \omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im} G(\mathbf{k}, \omega) = 1 \quad (5.23)$$

verwendet. Um den Speicherbedarf zu reduzieren, wurde die sechsfache Rotationssymmetrie der Brillouinzone ausgenutzt.

In der Figur 5.6 sind für verschiedene Werte der Hüpfamplitude t die spektralen Dichten auf ausgewählten Geraden in der Brillouinzone dargestellt. Ausgeprägte Spitzen mit kleiner Halbwertsbreite (Quasiteilchenpeaks) in der spektralen Dichte kennzeichnen Quasiteilchen mit langer Lebensdauer.

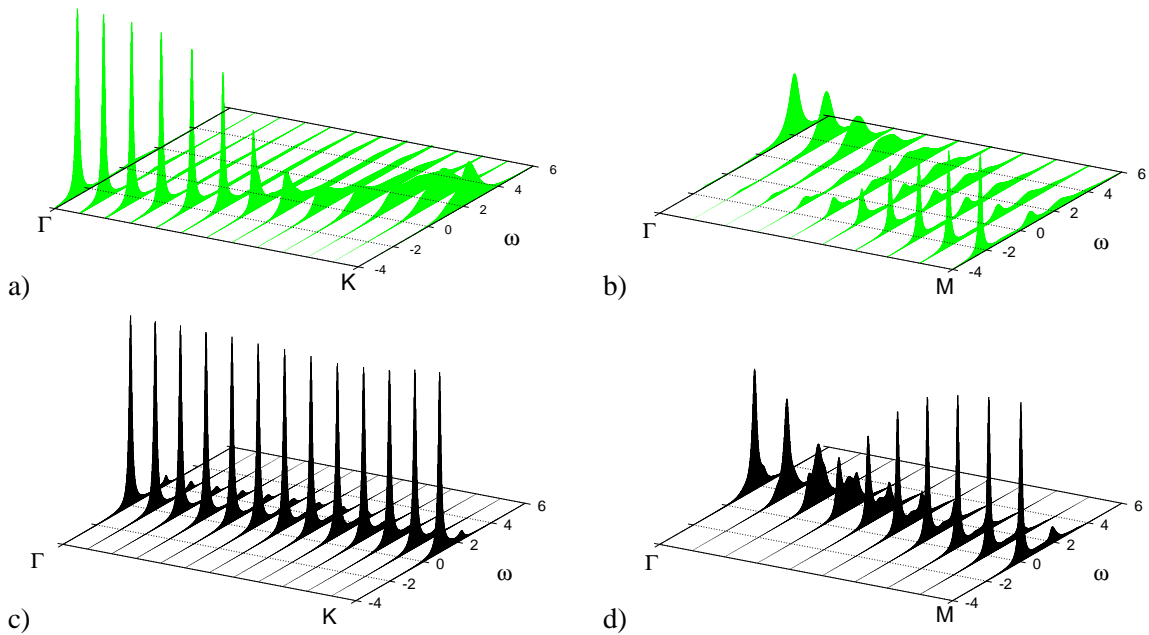


Abbildung 5.6: Spektrale Dichten eines Loches entlang ausgewählter Schnitte von Γ zum jeweiligen Grundzustand der Brillouinzone für a) $t=1$, b) $t=-1$, c) $t=0.2$ und d) $t=-0.3$. ($\eta = 0.1$) für $N = 36 \times 36$. Die Frequenz $\omega = 0$ entspricht der Grundzustandsenergie des Dreiecksgitterantiferromagneten ohne Loch in Spinwellennäherung.

Für $t=0$ ergibt sich ein Quasiteilchenband mit flacher Dispersion für tiefe Energien in den spektralen Dichten, die unabhängig vom Impuls \mathbf{k} sind. Für positives t liegt das Minimum der Dispersion mit einem ausgeprägten Quasiteilchenpeak bei Γ . Diese ausgeprägte Spitze ist bis zu $t = 10J$ gut sichtbar. In den anderen Bereichen der Brillouinzone sind bis $t < 0.2J$ die ausgeprägten Quasiteilchenpeaks leicht nachweisbar. Mit zunehmender Hüpfamplitude t nimmt das Quasiteilchengewicht in der Nähe der Ecken K der Brillouinzone sehr schnell ab, und für $t > 0.5$ ist es schwierig, Quasiteilchenpeaks außerhalb der Region um Γ nachzuweisen. Das spektrale Gewicht des Quasiteilchenpeaks wandert mit wachsendem t in den höherenergetischen inkohärenten Anteil des Spektrums. Diese Zustände können Multimagnonanregungen zugerechnet werden.

Für negative t ergeben sich qualitativ andere Spektren. Bei $t = -1$ gibt es ein tiefliegendes enges Quasiteilchenband, dessen Minimum bei M liegt. Die Quasiteilchenpeaks sind in der gesamten Brillouinzone nachweisbar. Die Existenz eines solchen schmalen Quasiteilchenbandes wird für das Quadratgitter auf das Vorhandensein von magnetischen Polaronen, die eine ferromagnetisch geordnete Kernregion enthalten, in der sich das Loch bevorzugt bewegt, zurückgeführt. Außerdem ist der höherenergetische Teil der spektralen Dichte ähnlich wie auf dem Quadratgitter stark strukturiert, während für $t > 0$ nur ein breiter Berg zu sehen ist. Inwieweit die Stabilität von magnetischen Polaronen auch für das Dreiecksgitter gilt, wird in Abschnitt 5.3 untersucht.

Um den Einfluß der durchgeführten Näherungen auf die erhaltenen Ergebnisse zu beurteilen, wird in den folgenden Abschnitten für kleine Systeme des t - J -Modells auf dem Dreiecksgitter die Dispersion und die spektrale Dichte für ein Loch verglichen.

5.2 Exakte Diagonalisierung für ein Loch

Das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter wurde für verschiedene Systemgrößen mit periodischen Randbedingungen durch Verwendung des Lanczos-Algorithmus (siehe Anhang C) exakt diagonalisiert. Die Gitterzellen und die korrespondierenden Brillouinzone für die Systeme mit $N = 9, 12, 21, 24$ und 27 Plätzen finden sich in Anhang D. Die Plätze der Gitterzellen werden in eine beliebige wählbare Reihenfolge gebracht und fortlaufend von 0 bis $N - 1$ durchnummeriert. Dann werden analog wie in Kapitel 4.4 die Zustände in der Eigenbasis mit Impuls \mathbf{k} dargestellt:

$$|0, \mathbf{k}, \{\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} T_g^j c_{1,\sigma_1}^\dagger \dots c_{N-1,\sigma_{N-1}}^\dagger |0\rangle. \quad (5.24)$$

c_{i,σ_i}^\dagger erzeugt ein Elektron mit Spin σ_i am Platz i . Der Translationsoperator T_g^j stammt aus der Translationsgruppe der Gitterzelle und verschiebt Platz 0 auf Platz j . Weil die S^z -Komponente des Gesamtspins eine Erhaltungszahl ist, reduziert sich für gerades N der Zustandsraum auf den Unterraum mit $S^z = \pm \frac{1}{2}$ mit $\frac{(N-1)!}{(N/2)!((N-2)/2)!}$ Zuständen und auf $\frac{(N-1)!}{((N-1)/2)!((N-1)/2)!}$ Zustände für ungerades N und verschwindender Gesamtszinkomponente S^z . Die Matrixelemente des Heisenbergterms in dieser Basis sind unabhängig vom Impuls des betrachteten Zustandsraumes, während die Matrixelemente des Hüpfers eine Impulsabhängigkeit besitzen:

$$-t \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta_l\sigma} |0, \mathbf{k}, \{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}\rangle = \pm t e^{-i\mathbf{k}\delta_l} |0, \mathbf{k}, P(\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\})\rangle. \quad (5.25)$$

Das Vorzeichen hängt von der Richtung δ_l und der Systemgröße ab. Die Permutation P erzeugt den durch das Hüpfen veränderten Spinzustand.

5.2.1 Grundzustandsenergien für ein Loch

In der Tabelle 5.1 sind die Grundzustandsenergien aus der Spinwellenrechnung [32], der SCBA und aus exakter Diagonalisierung für verschiedene Systemgrößen angegeben. Die Energien $\delta E_1^{ex,SCBA}$ haben als Bezugspunkt die jeweilige Grundzustandsenergie ohne Loch. Die Grundzustandsenergien der Spinwellenrechnung und der exakten Diagonalisierung ohne Loch stimmen sehr gut überein [33]. Für $t < 0$ sind einzelne Ergebnisse für $N = 12$ in [15] veröffentlicht.

Zunächst wird der Fall eines lokalisierten Loches ($t=0$) diskutiert. Bei den Locherzeugungsenergien $E_{1,loc}^{ex}$ ist auffällig, daß die Systeme mit gerader Platzanzahl N eine höhere Locherzeugungsenergie für ein lokalisiertes Loch besitzen als die mit ungeradem N . Dieses ist dadurch erklärbar, daß ohne Loch das System mit ungerader Platzanzahl aufgrund des nicht abgesättigten $S = \frac{1}{2}$ -Spins eine höhere magnetische Energie als eines mit geradem N besitzt. Mit einem Loch kehrt sich die Situation um, für ungerades N liegt nun ein Grundzustand mit $S=0$ vor, während für ungerade Platzanzahl ein energetisch höherer Grundzustand mit $S = \frac{1}{2}$ angenommen wird. Die Auswirkung auf $E_{1,loc}^{ex}$ ist in Figur 5.7 dargestellt. Für größere Systeme nähern sich die Locherzeugungsenergien alternierend dem SCBA-Ergebnis $E_{1,loc}^{SCBA,\infty} = 0.650555$ an. Dieses ist plausibel, da die Spinwellenrechnung auf dem Spinwellenspektrum des unendlich ausgedehnten Systemes beruht. Im thermodynamischen Limes ist zu erwarten, daß sich die Locherzeugungsenergien für beide Gruppen angleichen, da der überschüssige Spin sich dann auf sehr viele Plätze verteilen kann.

Für $t > 0$ liegt der Grundzustandsimpuls für ein Loch bei ungeradem N im Zentrum Γ der Brillouinzone, während er sich bei $N = 12$ bei K und bei $N = 24$ in der Nähe von K befindet. Dieses ist

N	exakte Diagonalisierung				Spinwellen, SCBA			
	$t = 0$		$t = 0.1$	$t = 1$	$t = 0$		$t = 0.1$	$t = 1$
	$n_h = 0$	$n_h = 1$	$n_h = 1$	$n_h = 1$	$n_h = 0$	$n_h = 1$	$n_h = 1$	$n_h = 1$
	E_0^{ex}	$E_{1,loc}^{ex}$	δE_1^{ex}	δE_1^{ex}	E_0^{LSW}	$E_{1,loc}^{SCBA}$	δE_1^{SCBA}	δE_1^{SCBA}
9	-5.25000	0.50000	-0.40000	-4.00000	-5.62500	0.66884	-0.31627	-3.18974
12	-7.32396	1.15197	-0.38544	-4.09035	-7.25658	0.64520	-0.32854	-3.39377
21	-11.78091	0.56862	-0.39986	-4.06326	-11.82919	0.65145	-0.32504	-3.35476
24	-12.93870	0.92897	-0.29581	-3.42937	-13.04174	0.65227	-0.32561	-3.36573
27	-15.12597	0.59201	-0.38805	-3.99864	-15.04634	0.65052	-0.32572	-3.36510

N	exakte Diagonalisierung			Spinwellen, SCBA		
	$t = -0.1$	$t = -0.5$	$t = -1$	$t = -0.1$	$t = -0.5$	$t = -1$
	$n_h = 1$	$n_h = 1$	$n_h = 1$	$n_h = 1$	$n_h = 1$	$n_h = 1$
	δE_1^{ex}	δE_1^{ex}	δE_1^{ex}	δE_1^{SCBA}	δE_1^{SCBA}	δE_1^{SCBA}
9	-0.20000	-1.00000	-2.00000	-0.15855	-0.81011	-2.12542
12	-0.22660	-1.18191	-2.796138	-0.16443	-1.09227	-2.64789
21	-0.20216	-1.07771	-2.882759	-0.16514	-1.06930	-2.67876
27	-0.19704	-1.25489	-2.897100	-0.16515	-1.12255	-2.74088

Tabelle 5.1: Die Grundzustandsenergien ohne Loch ($n_h = 0$) aus exakter Diagonalisierung E_0^{ex} und linearer Spinwellenrechnung E_0^{LSW} , die Locherzeugungsenergien für ein lokalisiertes Loch $E_{1,loc}^{ex}$ bzw. $E_{1,loc}^{SCBA}$ und die Energiedifferenz δE_1^{ex} bzw. δE_1^{SCBA} zu $t = 0$ für ein Loch für verschiedene Parameterwerte von t ($n_h = 1$). Für $N = 24$ liegt der Impuls des Einlochgrundzustandes aufgrund der fehlenden Rotationssymmetrie der Brillouinzone (siehe Anhang D) in der Nähe von K . Dieses ist der Grund für die große Abweichung von δE_1^{ex} von den übrigen Werten. Die Energien sind für das t - J -Modell ohne den Term $\sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j$ berechnet. Für eine Umrechnung auf das vollständige t - J -Modell siehe Anhang E.

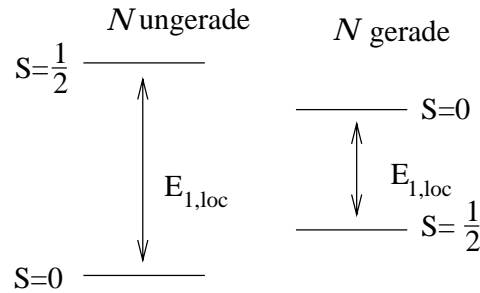


Abbildung 5.7: Einfluß des Gesamtspins auf die Locherzeugungsenergien für das t - J -Modell mit gerader und ungerader Platzanzahl N

damit erklärbar, daß der freie Spin $\frac{1}{2}$ für den Einlochfall bei $N = 12$ für eine Impulsverschiebung um $(\frac{4\pi}{3}, 0)$ sorgt.

Für große negative t wird ein ferromagnetischer Zustand am Ursprung Γ der Brillouinzone angenommen. Bei kleinem negativen Hüpfparameter liegt der Grundzustandsimpuls zunächst auf der Ecke K der Brillouinzone und wandert dann je nach Gitterzelle in die Nähe von M , der Mitte der Brillouinzonkante. Die Hüpfamplituden, bei denen die Wechsel stattfinden, sind abhängig von der Gitterzelle. Der Bereich mit dem Grundzustandsimpuls bei K liegt für $N = 21$ zwischen $-0.3J$ und 0 und für $N = 27$ im Bereich $0 \geq t \geq -0.15J$ und wird mit steigender Systemgröße N kleiner. Für den Zwischenbereich ist der Grundzustandsimpuls für $N = 21$ zwischen $-0.8J$ und $-0.3J$ bei B nahe bei M ,

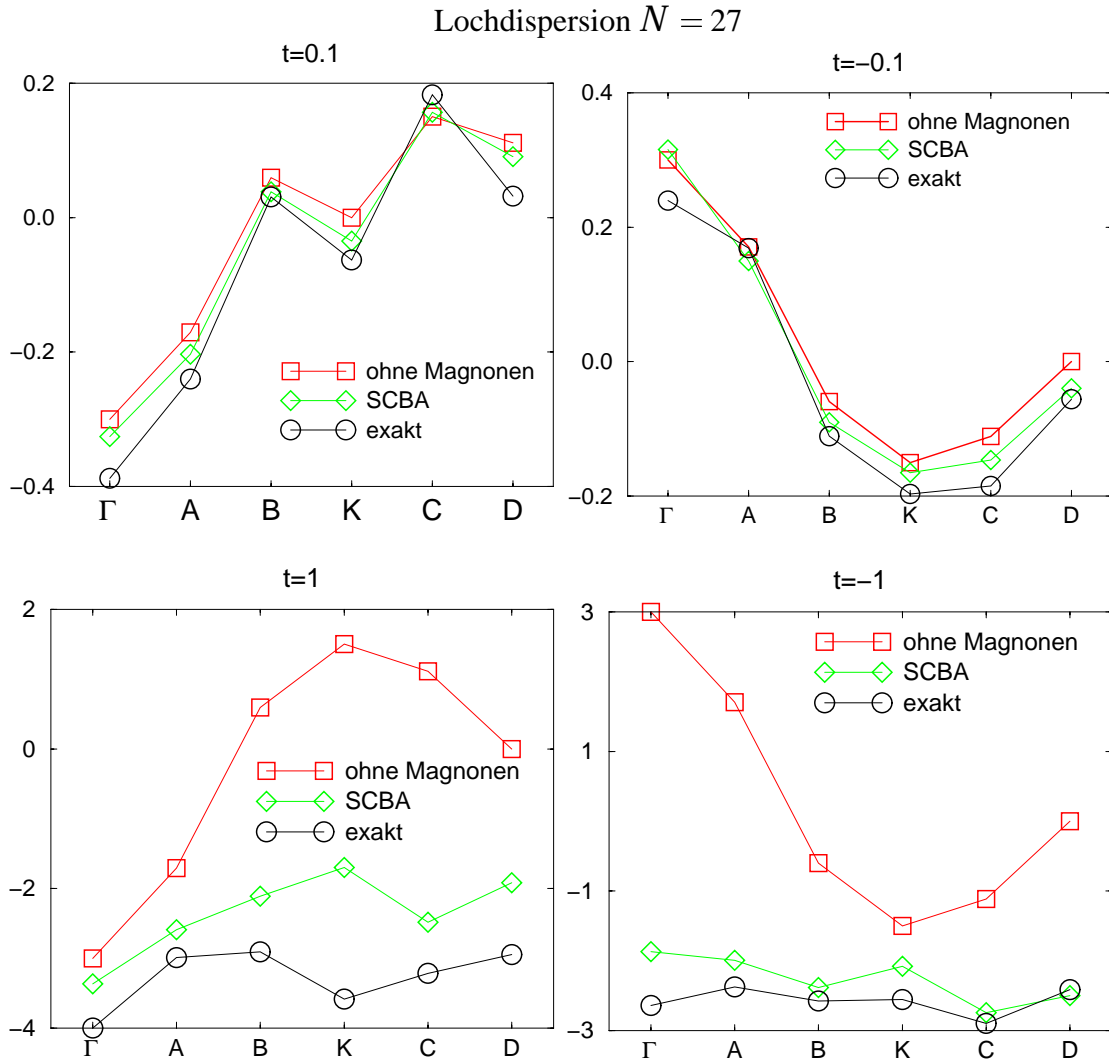


Abbildung 5.8: Die Dispersionen $\delta E_1(k)$ für ein Loch, die mittels exakter Diagonalisierung, magnonenunabhängigen Hüpfen $-3tw_{\mathbf{q}}$ und SCBA gewonnen wurden, für das $N = 27$ -System mit verschiedenen Hüpfamplituden

während er für $N = 27$ bei C im Wertebereich $-0.15J \geq t \geq -4J$ liegt. Für noch stärkeres Hüpfen springt der Grundzustandsimpuls auf Γ . Ein ferromagnetisch geordneter Nagaoka-Zustand [36] liegt für $t < -17.26J$ ($N = 21$) und $t < -23.19J$ ($N = 27$) für das Bandminimum bei Γ vor.

5.2.2 Energiedispersion für ein Loch

In den Diagrammen 5.8 ist für $N = 27$ die Energiedispersion $\delta E_1(k)$ für verschiedene positive und negative Hüpfamplituden t gezeigt, die mittels exakter Diagonalisierung und SCBA ermittelt wurden. Das Nullniveau in den Diagrammen ist durch die Grundzustandsenergie für ein lokalisiertes Loch ($t=0$) gegeben. Der absolute Energieeigenwert des t - J -Modells (2.1) ist dann durch $E_0 + E_{1,loc} + \delta E_1(k)$ zu erhalten. Für kleine Werte der Hüpfamplitude $|t|$ ist die Bandbreite proportional zur Hüpfamplitude. Als erste Näherung ist in den Diagrammen die Größe $-3tw_{\mathbf{q}}$, die nur die Beiträge des magnonenunabhängigen Hüpfens enthält, eingetragen. Für kleine $|t|$ stellt diese erste Approximation bereits eine akzeptable Näherung an die exakten Resultate dar, die durch die Einbeziehung des magnonen-

unterstützten Hüpfens in der SCBA noch weiter verbessert wird. Für $t = 1$ approximiert $-3tw_{\mathbf{q}}$ die Grundzustandsenergien nur noch qualitativ. Eine gute Übereinstimmung ist in der Nähe von Γ noch vorhanden, während in der Nähe von K das magnonenunterstützte Hüpfen eine starke Verminderung der Quasiteilchenenergien und -gewichte bewirkt. Für größere negative Amplitude $t = -1$ ist in den Grundzustandsenergien ein tiefliegendes enges Quasiteilchenband sichtbar, welches schlecht durch den Beitrag des magnonenunabhängigen Hüpfens beschrieben wird. Das magnonenunterstützte Hüpfen in der SCBA ist so stark, daß die Dispersion des magnonenunabhängigen Hüpfens ganz überdeckt wird. Das magnonenunterstützte Hüpfen ist in diesen Parameterbereichen also wesentlich für die Beschreibung der Dispersion.

Das Ergebnis zeigt im Bereich $t > 0$ signifikante Unterschiede zum Quadratgitter [24], bei dem es kein magnonenunabhängiges Hüpfen gibt.

5.2.3 Spektrale Dichten für ein Loch

Um zu bewerten, wie gut die spektralen Dichten durch die SCBA wiedergegeben werden, sind mit der Lanczos-Methode mittels Kettenbruchentwicklung (siehe Anhang C) die spektralen Dichten für ein System mit $N = 21$ Plätzen berechnet worden. Die Ergebnisse sind für verschiedene Punkte der Brillouinzone in Diagramm 5.9 dargestellt. Der Nullpunkt des Spektrums ist für beide Methoden durch die Grundzustandsenergie ohne Loch gegeben.

Die Spektren zeigen eine gute qualitative Übereinstimmung. Die Existenz eines Quasiteilchenpeaks am unteren Ende des Spektrums bei Γ und das Verschwinden bei K wird korrekt wiedergegeben. Die Unterschiede in den quantitativen Werten im unteren Teil des Spektrums sind durch die verwendeten Näherungen in der SCBA erklärbar. Die detaillierte höherenergetische Struktur des Spektrums wird durch die Lanczos-Methode nur näherungsweise berechnet. Ein Vergleich der spektralen Dichten in der SCBA für $N = 21$ und $N = 36 \times 36 = 1296$ zeigt, daß die Spektren fast identisch sind und daß daher bereits bei den verwendeten Systemgrößen das unendlich ausgedehnte System gut beschrieben wird.

In [37] wurden mittels eines Spinpolaronkonzeptes, bei dem jedes Loch mit Pfadoperatoren aus lokalen magnetischen Anregungen verknüpft wird, spektrale Dichten für ein Loch ermittelt. Diese Ergebnisse zeigen ebenfalls eine Übereinstimmung der qualitativen Resultate mit den aus der SCBA erhaltenen Daten bezüglich der Impulsabhängigkeit und der Existenz von Quasiteilchenpeaks.

5.3 Lochwellenfunktion für klassische Spinhintergründe

Um die Fragestellung zu untersuchen, warum sich die Parameterbereiche $t > 0$ und $t < 0$ für größere Hüpfamplituden $|t|$ im Auftreten eines Quasiteilchenpeaks so stark unterscheiden, werden die Spins näherungsweise als klassische Spins behandelt. Im Einlochsektor der Zustandssumme in (2.23) ergibt sich aus (2.26) die folgende Lagrangefunktion

$$\begin{aligned}
 L_{rJ} = & - \sum_j \left\{ \eta_j^* \partial_\tau \eta_j + i(2S - \eta_j^* \eta_j) A_{\tau,j}^z \right. \\
 & + \bar{t} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\eta_j^* \eta_i e^{\frac{i}{2}(\psi_i - \psi_j)} \left(\cos \left(\frac{\phi_i - \phi_j}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_i - \theta_j}{2} \right) \right. \right. \\
 & \left. \left. + i \sin \left(\frac{\phi_i - \phi_j}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_i + \theta_j}{2} \right) \right) + (i \leftrightarrow j) \right]
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

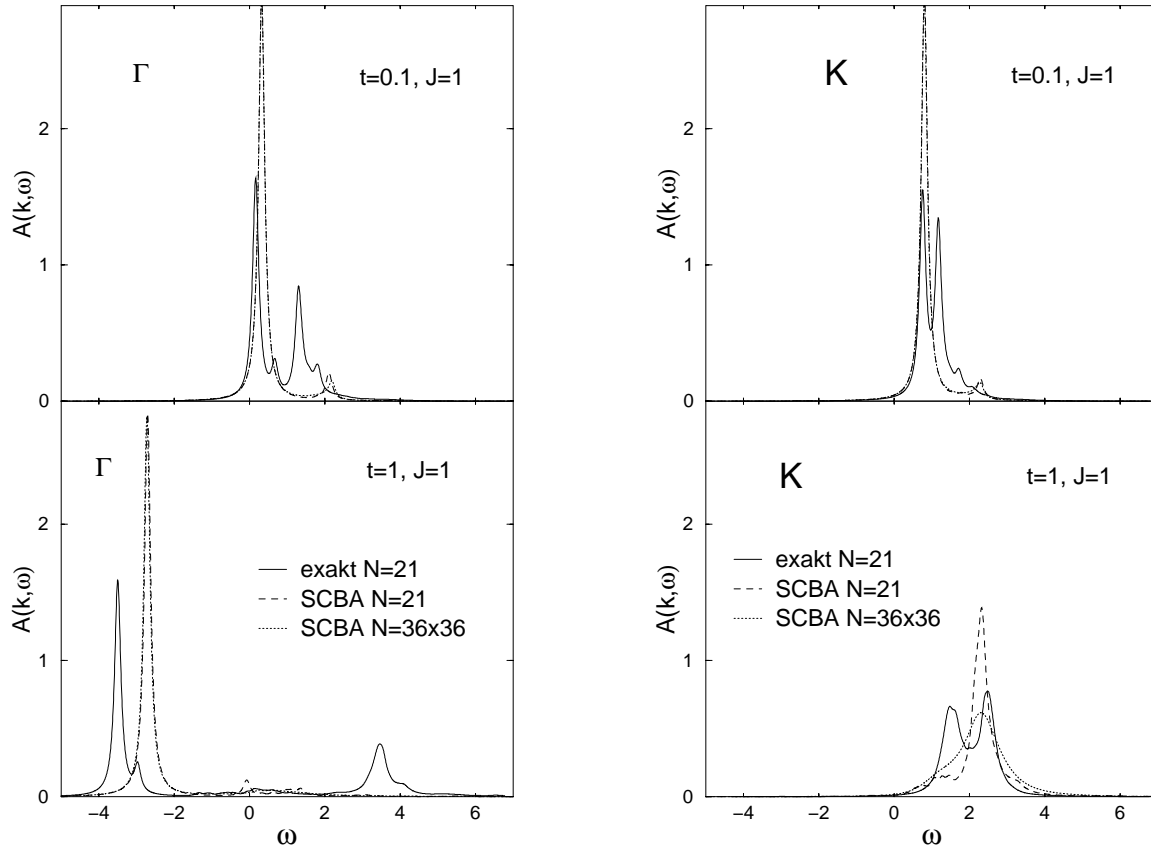


Abbildung 5.9: Spektrale Dichten $A(\mathbf{k}, \omega)$ für ein Loch im t - J -Modell für $N = 21$ für verschiedene Werte der Hüpfamplitude t , die aus exakter Diagonalisierung und selbstkonsistenter Bornscher Approximation (SCBA) ermittelt werden. Der Nullpunkt der Spektren ist jeweils durch die Grundzustandsenergien ohne Loch gegeben. Zum Vergleich sind die SCBA-Spektren für das System mit $N = 36 \times 36 = 1296$ -Plätzen eingezeichnet.

$$+ \frac{\bar{J}}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \frac{\eta_j^* \eta_j}{2S} - \frac{\eta_i^* \eta_i}{2S} \right) [\cos(\phi_i - \phi_j) \sin \theta_i \sin \theta_j + \cos \theta_i \cos \theta_j] \quad (5.27)$$

mit den Abkürzungen im klassischen Limes $\bar{J} = 4JS^2$ und $\bar{t} = 2tS$. Der Summand aus (2.26) mit dem Produkt von vier Grassmannvariablen ist fortgelassen, da nur ein Loch untersucht wird. Durch den klassischen Limes $S \rightarrow \infty$ wird der Zeitentwicklungsterm für die Spins in der Zustandssumme dominant und friert die zeitlichen Fluktuationen der Spins ein. Das führt dazu, daß die Winkelvariablen $\Omega = (\theta, \phi, \psi)$ zeitunabhängig werden. Auerbach und Larson [38] führten diese Näherung für das Quadratgitter durch.

Ist an einem Platz j ein Loch vorhanden, so wird die magnetische Energie der beteiligten Bindungen um einen Term proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit ρ_j des Loches an diesem Ort j vermindert. Für den Einlochfall gilt die Bedingung $\sum_j \rho_j = 1$. Ist die Lochdichteverteilung vorgegeben, so ist die magnetische Energie $E_J(\rho)$ für eine Spinkonfiguration eindeutig bestimmt.

Für die Untersuchung des Einflusses des Hüpftermes auf die Lochdichteverteilung werden der Hüpfterm und der Heisenbergterm getrennt behandelt. Für einen fixierten Spinhintergrund können dann

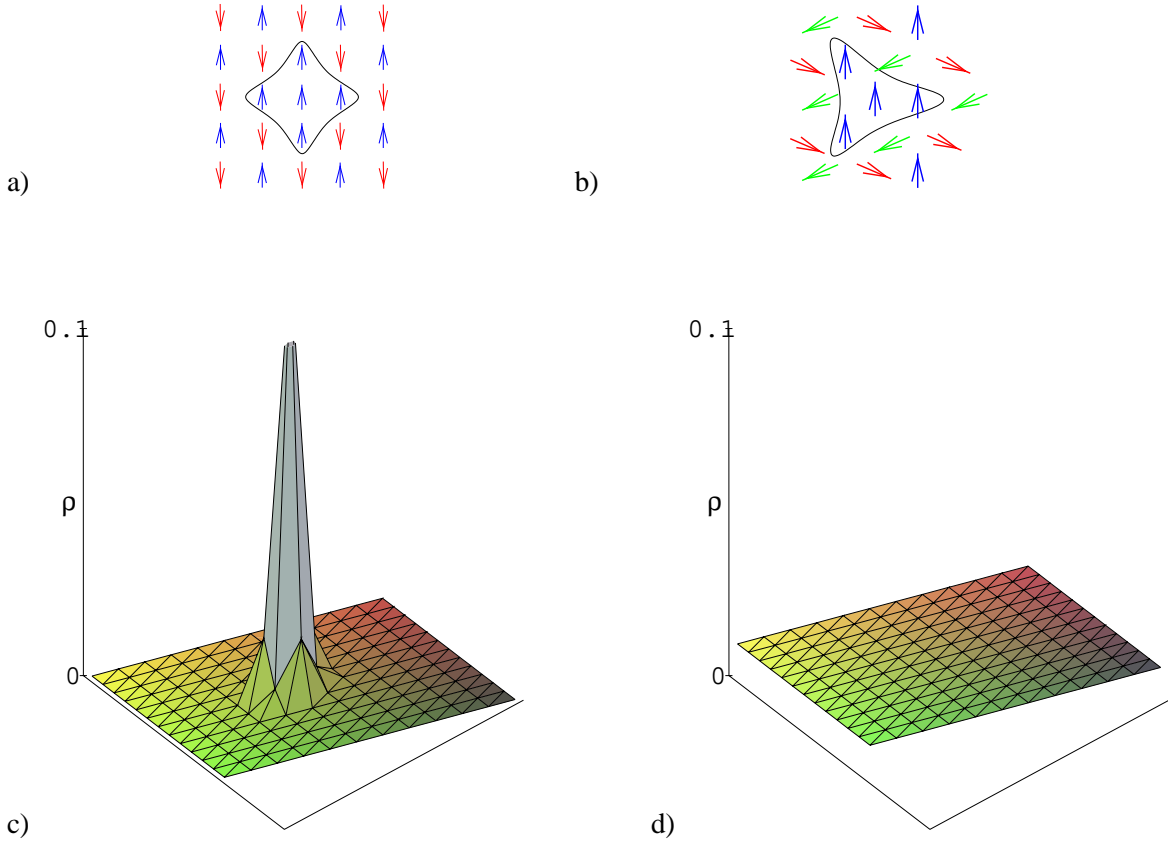


Abbildung 5.10: a) Spinanordnung für das 5-Platz-Polaron auf dem Quadratgitter, b) Spinanordnung für das 4-Platz-Spinpolaron auf dem Dreiecksgitter, c) Lochdichtevertteilung bei $t < 0$ und $J = 1$ für das 4-Platz-Polaron und d) Lochdichte im Grundzustand für $t > 0$ und beliebiges J auf dem Dreiecksgitter in klassischer adiabatischer Näherung für einen hexagonale Gitterzelle mit Seitenlänge $6a_L$. Das Maximum der Lochdichte stimmt mit der Position des mittleren Spins des Polarons überein.

aus der Pfadintegraldarstellung für ein Loch (2.23) die Grassmannvariablen ausintegriert werden. Das Ergebnis lautet

$$Z^{hole} = \prod_{l,\tau} \left(\int d\Omega_l(\tau) \right) e^{-\int_0^\beta d\tau (H_{l,0}(\rho) + F_f)} \quad (5.28)$$

$$F_f = -\frac{1}{\beta} \ln \det \left[\alpha_S + T_\tau \exp \left(-\int_0^\beta d\tau H_{ij}^t(g) - \beta \mu \delta_{i,j} \right) \right] \\ \stackrel{S \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{\beta} \ln \det [1 + \exp(-\beta(H_{ij}^t(\Omega) - \mu' \delta_{i,j}))]. \quad (5.29)$$

Der Faktor $\alpha_S = \frac{2S+1}{2S}$ wird im chemischen Potential μ' für ein Loch absorbiert und spielt für Energiedifferenzen der Einlochzustände keine Rolle. F_f stammt aus der Ausintegration der bilinearen Terme in den Grassmannvariablen des Hüpftermes in (5.26). Die Determinante wird über die zeitgeordneten Matrizen für die nächsten Nachbarbindungen

$$H_{ij}^t(g) = \bar{t} e^{\frac{i}{2}(\psi_i - \psi_j)} \left(\cos \left(\frac{\phi_i - \phi_j}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_i - \theta_j}{2} \right) + i \sin \left(\frac{\phi_i - \phi_j}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_i + \theta_j}{2} \right) \right) \quad (5.30)$$

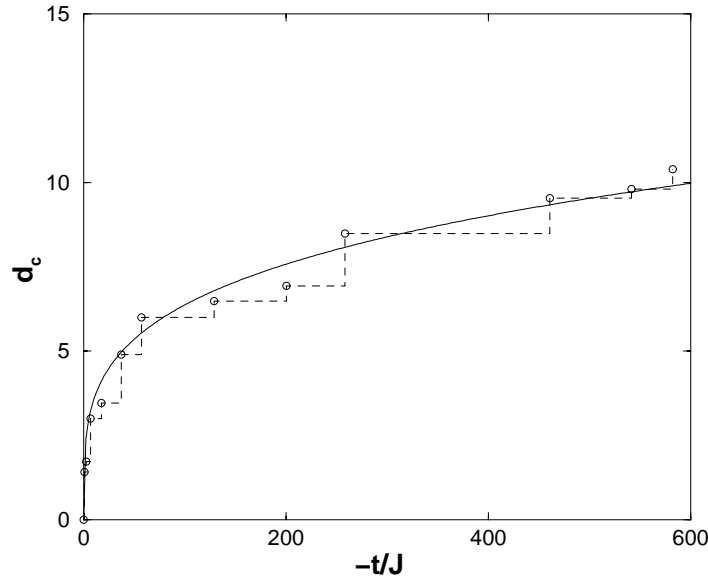


Abbildung 5.11: Die Größe d_c des energetisch tiefsten Polarons in Abhängigkeit von \bar{t}/\bar{J} . Die Kreise kennzeichnen, die Werte von \bar{t}/\bar{J} , an dem zwei Polaronen die gleiche Energie liefern. Die durchgezogene Linie approximiert die numerischen Daten durch die Funktion $d_c = a(|\bar{t}|/\bar{J})^{1/4}$ mit $a = 2.0155 \pm 0.040$.

gebildet. Die Phasen ψ_i werden in der Lochwellenfunktion absorbiert.

Die magnetische Energie des Heisenbergtermes mit einem Loch wird dargestellt durch

$$H_{J,0}(\rho) = \frac{\bar{J}}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \frac{\rho_j + \rho_i}{2S} \right) [\cos(\phi_i - \phi_j) \sin \theta_i \sin \theta_j + \cos \theta_i \cos \theta_j]. \quad (5.31)$$

Die Grundzustandsenergie E_t des Hüpftermes für einen gegebenen Spinhintergrund ist im Tieftemperaturlimit $\beta \rightarrow \infty$ durch den tiefsten Eigenwert von H_{ij}^t bestimmt. Der normierte zugehörige Eigenvektor der Matrix H_{ij}^t ist daher die gesuchte Lochwellenfunktion des Hüpfterms für ein Loch. Die Gesamtgrundzustandsenergie für einen vorgegebenen Spinhintergrund ergibt sich dann durch die Summe $E_J(\rho) + E_t$. Die so erhaltene Grundzustandsenergie wird in einem weiteren Schritt über die Variablen θ und ϕ des Spinhintergrundes minimiert.

Die Matrix H_{ij}^t wurde für einen hexagonalen Ausschnitt des Dreiecksgitters mit einer Seitenlänge von sechs Gitterkonstanten für verschiedene Spinhintergründe und $S = \frac{1}{2}$ in klassischer Näherung untersucht. Die antiferromagnetische 120° -Struktur wurde am Rand fixiert, um Randeffekte auszuschließen. Der untersuchte Spinhintergrund ist so in der Mitte des Ausschnittes plaziert, daß die Symmetrie des unendlich ausgedehnten Systems erhalten bleibt.

Beim t - J -Modell auf dem Quadratgitter sind magnetische Polaronen für $|\bar{t}| > \bar{J}$ energetisch begünstigt [38]. Sie bestehen aus einer ferromagnetisch geordneten Kernregion in einer antiferromagnetisch geordneten Umgebung. In dieser Region befindet sich das Maximum der Lochdichte, die nach außen hin exponentiell abfällt. Das kleinste Polaron auf dem Quadratgitter ist das 5-Platz-Polaron, dargestellt in Figur 5.10 a).

Auf dem Dreiecksgitter begünstigt das 4-Platz-Polaron 5.10 b) für $t < 0$ 5.10 b) einen lokalisierten Lochzustand für den Hüpfterm, wie in Diagramm 5.10 c) gezeigt. Das Loch bevorzugt die ferromagnetisch geordnete Spinregion, und dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit fällt nach außen exponen-

tiell ab. Um die Stabilität von magnetischen Polaronen auf dem Dreiecksgitter für negative Hüpfamplitude abzuschätzen wird nun für unterschiedlich große ferromagnetisch geordnete Kernregionen mit scharfer Abgrenzung zur umgebenden 120° -Struktur der tiefste Eigenwert von H_{ij}^t ermittelt und verglichen. Das 4-Platz-Polaron liegt für $\bar{t} < -0.57\bar{J}$ energetisch tiefer als die 120° -Struktur. Mit sinkendem \bar{t} nimmt die Größe des energetisch tiefsten Polarons zu. Die Größe des Polarons d_c sei durch die Fläche F der ferromagnetischen Region des Polarons gemäß der Beziehung $d_c = \sqrt{F}$ charakterisiert.

In Diagramm 5.11 ist d_c für das energetisch tiefste Polaron in Abhängigkeit von \bar{t}/\bar{J} dargestellt. Die Kreise kennzeichnen den Wert von \bar{t}/\bar{J} , bei dem zwei Polaronzustände die gleiche Gesamtenergie aufweisen. Die durchgezogene Linie stellt eine Approximation mittels $d_c = (2.0155 \pm 0.04)(|\bar{t}/\bar{J}|)^{1/4}$ der numerischen Daten an diese Punkte dar. Diese funktionale Abhängigkeit ergibt sich auch aus der folgenden Variationsrechnung nach der Polarongröße d_c . Dabei sind die Energiekosten für die ferromagnetische Kernregion im Vergleich zur 120° -Struktur bis auf exponentielle Korrekturen der Lochdichte gegeben durch $\Delta E_J = \frac{9\bar{J}}{16}d_c^2 \left(1 - \frac{B}{d_c^2}\right)$ aus (5.31). Der Energiegewinn für delokalisierte Zustände innerhalb dieser ferromagnetischen Region ist durch $\Delta E_t = \frac{9\bar{t}}{2} \left(1 - \frac{A}{d_c^2}\right)$ beschrieben. Eine Variation der Energie bezüglich der Größe des Polarons liefert dann für den tiefsten Zustand für große negative t

$$d_c \propto \left(\frac{|\bar{t}|}{\bar{J}}\right)^{1/4}. \quad (5.32)$$

Dieses Ergebnis stimmt bis auf numerische Vorfaktoren mit dem entsprechenden Zusammenhang für das Quadratgitter überein.

Für den Fall $t > 0$ wandelt sich die Verteilung der Lochdichte grundlegend. Die Lochdichte wird aus der ferromagnetischen Kernregion des 4-Platz-Polarons, das nicht den energetischen Grundzustand darstellt, in die umgebende antiferromagnetische 120° -Struktur herausgedrängt. Der Spinhintergrund, der durch die 120° -Struktur beschrieben ist, minimiert bereits die Energie des Hüpfterms E_t und ist damit der Grundzustand. Die Lochdichte ist in diesem Zustand für beliebiges $J > 0$ gleichmäßig im Ortsraum verteilt (5.10 d). In dieser Phase stellen Polaronen wegen des Verdrängungseffektes also keine bevorzugten Zustände dar, und sowohl der Hüpfterm als auch der Heisenbergterm stabilisieren im Einlochfall den gleichen klassischen antiferromagnetischen Grundzustand mit 120° -Struktur.

Es stellt sich nun die Frage, ob die Ergebnisse auch bei Einschalten der Quantenfluktuationen für $S = \frac{1}{2}$ erhalten bleiben. Dieser Aspekt steht im Mittelpunkt des nächsten Abschnittes.

5.4 Spinkorrelationen des t - J -Modells für ein Loch auf dem Dreiecksgitter

Zur Untersuchung, welchen Effekt starke Quantenfluktuationen auf das t - J -Modell mit $S = \frac{1}{2}$ auf dem Dreiecksgitter für positive und negative Hüpfamplituden t haben, werden in diesem Abschnitt exakte Diagonalisierungen von kleinen Gitterzellen mit $N = 21$ bzw. $N = 27$ Plätzen und periodischen Randbedingungen durchgeführt. Dazu werden die Grundzustandseigenvektoren $|\Psi\rangle$ für ein Loch mittels des Lanczos-Algorithmus (siehe Anhang C) berechnet. Aus diesem Grundzustand in der Impulsdarstellung werden Gesamtspin und die Spinkorrelationen $\langle \Psi | \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j | \Psi \rangle$ ermittelt. Die Darstellung erfolgt dabei im Referenzsystem des Loches, und das Loch ist auf Platz 0 fixiert. Für das t - J -Modell auf dem Quadratgitter sind diese Spinkorrelationen von Ramšak und Horsch in SCBA-Näherung berechnet worden [39].

Im t - J -Modell ohne Loch (Heisenbergmodell) ist die Spinkorrelation des Grundzustandes für nächste

Nachbarn durch den Energieeigenwert zu $\frac{E_0^{ex}}{3JN}$ bestimmt. Für $t \geq 0$ verschwindet für den Einlochgrundzustand bei ungeradem N der Gesamtspin $\sum_{j=0}^{N-1} \mathbf{S}_j$. Da die Berechnungszeit für den Grundzustandseigenvektor für $N = 27$ groß ist, wurden nur wenige Parameterwerte für dieses System untersucht, und für detailliertere Untersuchungen das $N = 21$ -System, das nicht die volle Spiegelungssymmetrie der $N = 27$ -Gitterzelle besitzt, verwendet. Für $N = 21$ ist für negative t eine Entartung des Grundzustandes vorhanden, da $|\Psi\rangle$ in Energieeigenzustände $|\Psi_{\pm}\rangle$ mit unterschiedlicher Rotationsquantenzahl zerlegt werden kann: Bei Anwendung der Darstellung $D(R)$ der 60° -Rotation um den Platz 0 bei $\mathbf{k} = 0$ gilt $D(R)|\Psi_{\pm}\rangle = e^{\pm i\frac{2\pi}{3}}|\Psi_{\pm}\rangle$. Durch diese Entartung ist die Konvergenz bei der Berechnung des Eigenvektors verlangsamt, und die erhaltenen Spinkorrelationen sind nur noch inversionssymmetrisch und nicht rotationssymmetrisch bezüglich der Position des Loches. Daher werden sie über alle unterschiedlichen räumlichen Richtungen gemittelt.

Die Ergebnisse für die Spinkorrelationen der nächsten Nachbarbindungen für $N = 27$ sind in Figur 5.12 dargestellt. Für hinreichend große negative Hüpfamplituden ($t < -4J$) liegt der Grundzustand bei $\mathbf{k} = 0$. In der Nähe des Loches ist eine große Verstärkung der ferromagnetischen Korrelation im Vergleich zur Korrelation ohne Loch sichtbar. Mit zunehmender Entfernung vom Loch oder mit sinkendem Betrag der Hüpfamplitude nimmt diese zusätzliche ferromagnetische Ordnung der nächsten Nachbarbindungen ab. Die Ergebnisse in diesem Parameterbereich zeigen eine qualitative Übereinstimmung mit magnetischen Polaronen, wie sie im t - J -Modell auf dem Quadratgitter vorkommen.

Für $t \geq 0$ ergibt sich ein anderes Resultat. Die antiferromagnetischen Korrelationen der Bindungen, die das Loch konzentrisch umgeben, verstärken sich im Vergleich zum Heisenbergmodell ohne Loch, da sie durch den Wegfall der frustrierenden Bindungen mit dem Lochplatz zu einem für den Heisenbergterm energetisch günstigeren Wert relaxieren können. Als Folge werden die Bindungen, die vom Loch radial nach außen zeigen, ein wenig tripllettähnlicher, da die ursprünglichen Dreiecke der 120° -Struktur verzerrt sind. Schon wenige Gitterkonstanten vom Loch entfernt sind bereits nahezu die Korrelationen des Heisenbergmodells ohne Loch wieder erreicht. Daraus kann geschlossen werden, daß das Loch sich im t - J -Modell bewegen kann, ohne von starken magnetischen Anregungen der 120° -Struktur umgeben zu sein.

In Diagramm 5.13 sind für ausgewählte Bindungen des $N = 21$ -Platz-Systems die über die Raumrichtungen gemittelten Spinkorrelationen des jeweiligen Grundzustandes in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t dargestellt. Für positive Hüpfamplitude ändern sich die meisten Spinkorrelationen gegenüber dem reinen Heisenbergmodell kaum, weil Hüpfterm und Heisenbergterm ähnliche physikalische Effekte bewirken. Besonders starke Änderungen im Vergleich zum Heisenbergmodell ergeben sich für die Korrelation zwischen nächsten Nachbarn $\langle \Psi | \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_5 | \Psi \rangle \equiv (1, 5)$ (Für die Bezeichnung der Plätze siehe Figur 5.14 bzw. Anhang D). Die antiferromagnetische Ordnung des Grundzustandes ist für $(1, 5)$ durch Relaxation verstärkt, während $(1, 4)$, eine Bindung zwischen Plätzen des gleichen Untergitters der 120° -Struktur, eine starke ferromagnetische Korrelation aufweist. Die übrigen gezeigten nächsten Nachbarbindungen in weiterer Entfernung vom Loch weichen nur wenig von der Korrelation des Heisenbergmodells von -0.187 ab.

Für $t < 0$ sind im Diagramm 5.13 aufgrund des wechselnden Grundzustandsimpulses die Korrelationen nur für $t < -0.8J$ eingetragen. Man erkennt für die Nächste-Nachbarkorrelation $(1, 5)$ die starke Erhöhung des ferromagnetischen Tripllettanteiles mit steigender Hüpfamplitude $|t|$. Für die restlichen Korrelationen $(1, 4)$ und $(1, 20)$ ist in der Nähe des Loches der Tripllettanteil im Vergleich zu $t > 0$ leicht verstärkt. Mit stärker negativer Hüpfamplitude sinkt aber der Wert dieser Korrelationen. Die Spinkorrelation $(1, 20)$ wird auch als „across the hole correlation“ bezeichnet, da sich die beiden beteiligten Spins auf entgegengesetzten Seiten des Loches befinden. Die weiter vom Loch entfernten nächsten Nachbarkorrelationen weisen etwa die gleichen Werte wie das Heisenbergmodell auf, so daß das Polaron räumlich begrenzt ist. Im Vergleich zur klassischen Näherung wächst also die Größe des

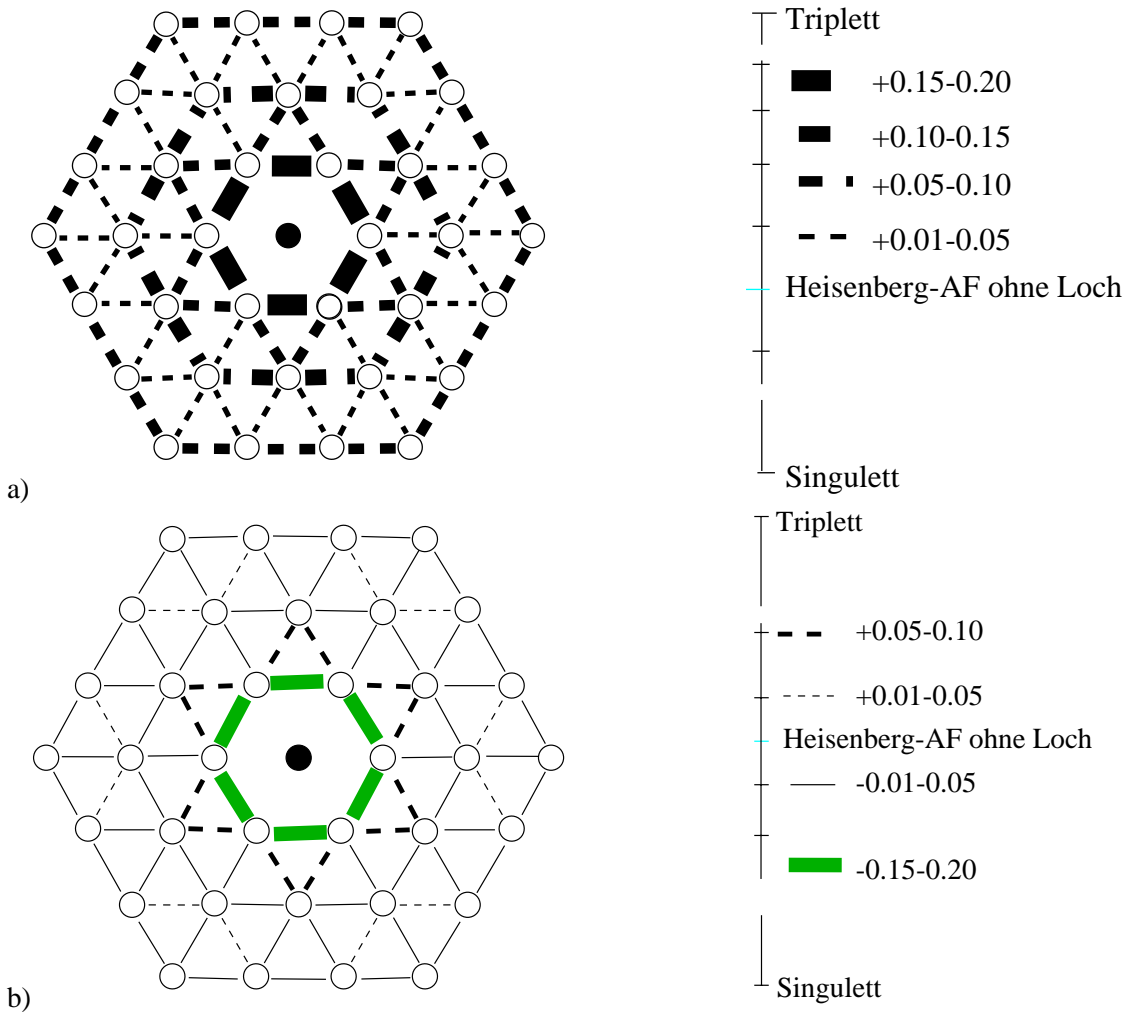


Abbildung 5.12: Spinkorrelationen $\langle \Psi | \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j | \Psi \rangle$ zwischen nächsten Nachbarn für ein Loch im t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter ($N = 27$) für a) $t = -15J$ und b) $t = J$. Die Strichstärken verdeutlichen den Unterschied zu der zugehörigen Spinkorrelation des Heisenbergantiferromagneten ohne Loch $\langle \Psi | \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j | \Psi \rangle = -0.187$. Sind zwei Spins in einem Tripletzustand bzw. Singulettzustand, so ist $\langle \Psi | \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j | \Psi \rangle = 0.25$ bzw. -0.75 .

Polarons nicht so stark mit der Hüpfamplitude. Dies deutet darauf hin, daß die Quantenfluktuationen die ferromagnetische Ausrichtung der Spins in der Umgebung des Loches stark vermindern.

Der wachsende Anteil der Singulettbeiträge der „across the hole correlation“-Spinkorrelation (1,20) mit steigender Hüpfamplitude ist für beide Vorzeichen der Hüpfamplitude erklärbar aufgrund des folgenden Effektes: Man betrachte dazu die Spins 1 und 20 auf entgegengesetzten Seiten eines Loches. Bei verschwindender Hüpfamplitude treten diese Spins nur mittelbar über ihre umgebenden Spins in Wechselwirkung. In Diagramm 5.14 ist ein Hüpfprozess eines Loches von Platz 0 auf Platz 1 im Ortsraum für einen Zustand mit hohem Gewicht in der Grundzustandswellenfunktion gezeigt. Nach diesem Hüpfprozeß tritt nun der ursprüngliche Spin von Platz 1 in direkte magnetische Wechselwirkung mit Spin 20, und daher wird die antiparallele Orientierung der beiden Spins bevorzugt. Mit zunehmender Hüpfamplitude nehmen daher in der Spinkorrelation (1,20) die Singulettanteile zu.

Insgesamt bestätigt die exakte Diagonalisierung die Ergebnisse der klassischen adiabatischen Näherung aus dem vorherigen Abschnitt. Für $t \geq 0$ gibt es keine magnetischen Polaronen im Grundzustand,

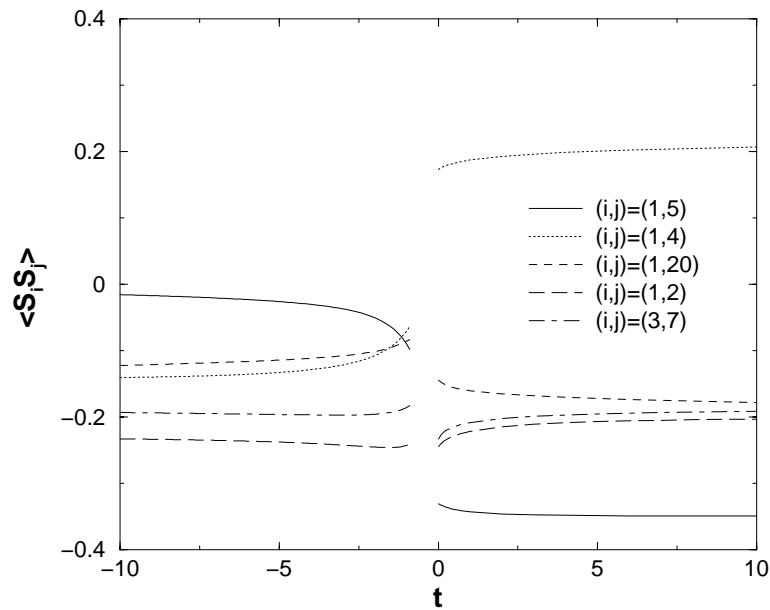


Abbildung 5.13: Spinkorrelationen $\langle \Psi | \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j | \Psi \rangle \equiv (i, j)$ für ein Loch im t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter ($N = 21$) bei Γ in Abhängigkeit von t/J . Für $-0.8J < t < 0$ liegt der Grundzustand bei einem anderen Punkt der Brillouinzone. Die Plätze in (i, j) sind dem Anhang D zu entnehmen. Ein Wert der Korrelation von 0.25 entspricht der ferromagnetischen Ausrichtung eines Triplets, einer von -0.75 einer vollständig antiparallelen Ausrichtung eines Singulets

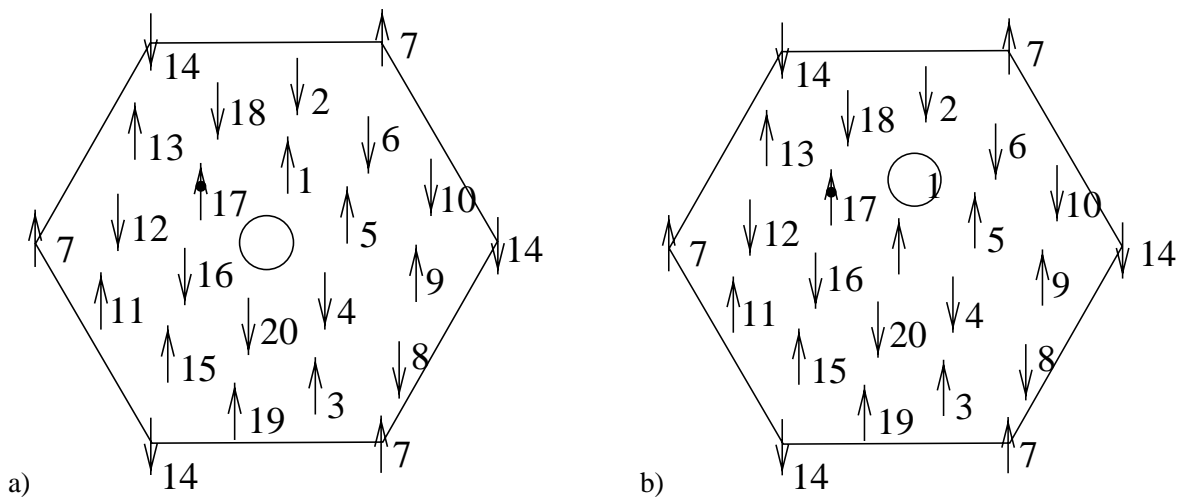


Abbildung 5.14: a) Repräsentativer S_z -Basiszustand im Ortsraum mit sehr hohem Gewicht im Grundzustand des t - J -Modells auf dem Dreiecksgitter für $t = -10J$ und $N = 21$ und b) Zustand der aus dem nach Hüpfen des Loches von Platz 0 nach Platz 1. Der Zustand aus b) ist energetisch bevorzugt gegenüber einer ferromagnetischeren Korrelation in a) zwischen (1,4) und (1,20)

und das Loch beeinflusst außer einer Verstärkung der antiferromagnetischen Ordnung in der unmittelbaren Umgebung des Loches den Grundzustand des Heisenbergmodells kaum. Diese Aussage wird durch die folgende Beobachtung unterstützt: Die effektive Masse, die sich aus der Energiedispersion

$t = 1, J = 0$						
$n_h \backslash \mathbf{k}$	Γ (0,0)	A $(\frac{4\pi}{9}, 0)$	B $(\frac{8\pi}{9}, 0)$	C $(\frac{10\pi}{9}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}})$	D $(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}})$	K $(\frac{4\pi}{3}, 0)$
1	-4.183522166	-4.132979085	-4.141331851	-4.125387340	-4.107406943	-4.165062702
2	-7.732	-7.73582239	-7.725452	-7.73385038	-7.735240786	-7.745476446
$t = -1, J = 0$						
$n_h \backslash \mathbf{k}$	Γ (0,0)	A $(\frac{4\pi}{9}, 0)$	B $(\frac{8\pi}{9}, 0)$	C $(\frac{10\pi}{9}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}})$	D $(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}})$	K $(\frac{4\pi}{3}, 0)$
1	-6.000000000	-5.937353091	-5.813170171	-5.805432904	-5.846272079	-5.806954511
2	-10.0120354	-10.011397	-10.018398	-10.03283199	-10.01011	-10.0295930

Tabelle 5.2: Grundzustandsenergien für mehrere Löcher ohne Heisenbergwechselwirkung und positiver bzw. negativer Hüpfamplitude t bei $N = 27$.

in der Nähe des Bandminimums ergibt, liegt nur etwa 25 Prozent über der Bandmasse eines einzelnen freien Elektrons auf dem Dreiecksgitter. Für das Quadratgitter, bei dem magnetische Polaronen auftreten, beträgt die effektive Masse für ein Loch hingegen etwa das fünf- bis siebenfache der Bandmasse eines freien einzelnen Elektrons [24].

5.5 Mehrere Löcher im t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter

Für mehrere Löcher im t - J -Modell

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j) \quad (5.33)$$

soll nun untersucht werden, welchen Einfluß die Frustration und der Hüpfterm auf die Bindungsenergien von Löchern und auf das Auftreten von Phasenseparation haben. Die Lochanzahl und die S_z -Komponente des Gesamtspins bleiben weiterhin Erhaltungsgrößen. Mittels exakter Diagonalisierung des 21- bzw. 27-Platz-Systems mit periodischen Randbedingungen werden die Energien und die Lochkorrelationsfunktionen numerisch berechnet. Die Implementierung und die Parallelisierung des Programmes für mehrere Löcher sind in Anhang C beschrieben.

5.5.1 Dispersion für mehrere Löcher

Für die $N = 21$ - und die $N = 27$ -Gitterzelle mit zwei Löchern wurden für verschiedene Werte der Hüpfamplitude t die Grundzustandsenergien zu fixiertem Impuls \mathbf{k} in der Brillouinzone bestimmt. Die Impulsabhängigkeit in der Brillouinzone weist eine sechsfache Rotationssymmetrie auf. Die numerischen Ergebnisse sind für ausgewählte t und endliches J im Anhang E aufgelistet.

Der Hüpfterm

In der Tabelle 5.3 sind die Grundzustandsenergien des t - J -Modells zu festem Impuls \mathbf{k} für verschiedene Lochanzahlen n_h bei verschwindender Heisenbergwechselwirkung für $N = 21$ aufgelistet. Die Grundzustandsenergien sind nur vom den Hüpfterm und den Fermieigenschaften der Elektronen auf dem Dreiecksgitter abhängig. Die Delokalisierung der Löcher über die gesamte Gitterzelle begünstigt

$t = 1, J = 0$					
$n_h \backslash \mathbf{k}$	Γ (0,0)	A $\left(\frac{2\pi}{21}, \frac{6\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	B $\left(\frac{4\pi}{21}, \frac{12\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	C $\left(\frac{2\pi}{7}, \frac{8\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	K $\left(\frac{4\pi}{3}, 0\right)$
1	-4.182331719	-4.081394750	-4.085152674	-4.089888991	-4.170361149
2	-7.612320769	-7.505844258	-7.502972206	-7.597100544	-7.492720384
3	-11.32866182	-11.18037249	-11.19721502	-11.28617559	-11.27600464
4	-13.95399605	-13.75038324	-13.75196392	-13.95657423	-13.74019833
5	-16.97286844	-16.70801577	-16.71667919	-16.97088596	-16.70628854
$t = -1, J = 0$					
$n_h \backslash \mathbf{k}$	Γ (0,0)	A $\left(\frac{2\pi}{21}, \frac{6\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	B $\left(\frac{4\pi}{21}, \frac{12\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	C $\left(\frac{2\pi}{7}, \frac{8\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	K $\left(\frac{4\pi}{3}, 0\right)$
1	-6.000000000	-5.894786198	-5.786842347	-5.784801594	-5.676891372
2	-9.530635474	-9.525792717	-9.552405184	-9.543439879	-9.541501644
3	-13.59372156	-13.60618309	-13.63109331	-13.62738708	-13.61342318
4	-15.78411178	-15.87354078	-16.07348326	-16.02261826	-15.87180631
5	-18.22025015	-18.10317779	-18.10309103	-18.09988720	-18.08065633

Tabelle 5.3: Grundzustandsenergien des t - J -Modells für mehrere Löcher ohne Heisenbergwechselwirkung ($J = 0$) und positiver bzw. negativer Hüpfamplitude t für $N = 21$.

eine Energieabsenkung der Mehrlochzustände. Bei Hinzufügen eines Loches verringern sich die absoluten Grundzustandsenergien mit jedem hinzugefügten Loch weniger, da die Löcher sich durch das Pauliprinzip gegenseitig bei der Delokalisierung behindern. Erkennbar ist, daß die Systeme mit gerader Anzahl an Elektronen eine etwas stärkere Energieabsenkung aufweisen als die mit ungerader Elektronenanzahl.

Bei einem Loch liegt für $t < 0$ das energetische Minimum bei Impuls Γ , und dieser Grundzustand hat maximalen Spin $S = \frac{N-1}{2}$. Hier ist also das Nagaoka-Theorem [36] für ein einzelnes Loch erfüllt. Durch die Delokalisierung des Loches über die gesamte Gitterzelle ist die Energieabsenkung im Vergleich zu einer größeren Lochzahl n_h am größten. Der absolute Grundzustand für zwei Löcher und negativer Hüpfamplitude, der in der Brillouinzone bei C liegt, hat Gesamtspin $\frac{3}{2}$. Die Impulsabhängigkeiten der Grundzustandsenergien für $n_h \geq 2$ und $N = 21$ ähneln einander bei negativer Hüpfamplitude und unterscheiden sich wiederum stark vom zugehörigen Einlochfall. Für $t = -1$ liegt das Minimum für zwei bis vier Löcher bei B in der Nähe von M , und es treten lokale Maxima der Energie bei Γ und K auf. Für $n_h = 5$ ist ein ausgeprägtes Minimum bei Γ sichtbar, während die restlichen Energieeigenwerte sehr nahe beieinander liegen. Im Vergleich zum Einlochfall wird die Impulsabhängigkeit insgesamt flacher und der eingeschränkte Zustandsraum bewirkt, daß die Löcher eine höhere effektive Masse im Vergleich zu mehreren isolierten Löchern bekommen. Bei drei Löchern liegt der Grundzustand bei Γ und hat verschwindenden Gesamtspin, d. h. die Löcher bevorzugen bereits nur aufgrund des Hüpftermes ohne die magnetische Wechselwirkung einen antiferromagnetischen Grundzustand.

Für positive t besitzen die Grundzustände einen möglichst geringen Gesamtspin, und die zugehörigen Impulse liegen für $n_h = 1, 2, 3$ oder 5 bei Γ und für $n_h = 4$ bei C . Die Impulsabhängigkeit der Grundzustandsenergien zeigt für alle n_h lokale Minima bei Γ und C . Die Energiedifferenz zwischen den beiden Minima ist sehr gering, so daß im Fall $n_h = 4$ wahrscheinlich die endliche Ausdehnung und die Randbedingungen der Gitterzelle die Ursache für den Unterschied im Grundzustandsimpuls sind. Die übrigen Punkte in der Brillouinzone weisen eine ähnliche Energie auf.

Für das größere System mit 27 Plätzen wurden ebenfalls die Grundzustandsenergien und die Impul-

$t \in \text{Intervall}[J]$				
$n_h = 1$	$n_h = 2$	$n_h = 3$	$n_h = 4$	$n_h = 5$
$[-\infty, -0.9], \Gamma$	$[-\infty, -20], B$	$[-\infty, -10], B$	$[-\infty, -2], B$	$[-\infty, -5], B$
$[-0.85, -0.35], B$	$[-10, -1.1], C$	$[-9, -2.25], \Gamma$	$[-1.5, -0.9], C$	$[-2, -0.5], \Gamma$
$[-0.3, -0.05], K$	$[-1.0 - 0.15], K$	$[-2.2, -1.5], C$	$[-0.5 - 0.3], K$	$[-0.3, -0.1], B$
	$[-0.13, -0.09], A$	$[-1.45, -1], \Gamma$	$[-0.2, -0.2], A$	
	$[-0.07, -0.05], K$	$[-0.95, -0.14], C$	$[-0.15, -0.1], B$	
	$[0.05, 15], C$		$[0.1, 0.3], K$	
$[0.05, \infty], \Gamma$	$[20, \infty], \Gamma$	$[-0.13, \infty], \Gamma$	$[0.5, \infty], C$	$[0.1, \infty], \Gamma$

Tabelle 5.4: Grundzustandswellenvektor in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude für verschiedene Lochanzahlen n_h und $N = 21$. Die Positionen der Wellenvektoren in der Brillouinzone sind dem Anhang D entnehmbar.

sabhängigkeit der Grundzustandsenergien des t - J -Modelles bei $J = 0$ für bis zu zwei Löcher berechnet (siehe die Tabelle 5.2). Die Grundzustandsenergien zeigen eine Energieabsenkung größeren Systems im Vergleich zum kleineren. Das ist auf den starken Einfluß der Systemgröße auf die Delokalisierung der Löcher zurückzuführen, die für $N = 27$ leichter zu erreichen ist. Die Impulsabhängigkeit der Grundzustandsenergien ist wiederum abhängig vom Vorzeichen der Hüpfamplitude. Für beide Vorzeichen ist die Bandbreite der Grundzustandsenergien im Vergleich zum Einlochfall stark reduziert. Für positive Hüpfamplitude t und $n_h = 2$ liegt das Energieminimum bei K . Die Impulsabhängigkeit für $t = 1$ und $J = 0$ unterscheidet sich damit sehr stark von der des kleineren Systems $N = 21$. Dagegen zeigt die Dispersion für $t < 0$ ein hohes Plateau um Γ , das die A - und D -Impulse in der Brillouinzone enthält. Das Minimum liegt bei C in der Nähe von M wie auch für den Fall $N = 21$. Ebenso wie für $N = 21$ ist für $N = 27$ der Punkt M in der Brillouinzone nicht enthalten. In beiden Fällen ergibt sich auf den Kanten der Brillouinzone eine Absenkung der Grundzustandsenergien.

Nachdem bisher nur die Impulsabhängigkeit der Hüpfsterme betrachtet wurde, wird nun der zusätzliche Einfluß der Heisenbergwechselwirkung untersucht. In Tabelle 5.4 sind die ermittelten Impulse der Grundzustände für $N = 21$ angegeben. Der häufige Wechsel des Grundzustandsimpulses für negative Hüpfamplitude t zeigt, daß in diesem Fall der Hüpfsterm und der Heisenbergsterm in Konkurrenz zueinander treten, und die Löcher sich stark beeinflussen. Für positive Hüpfamplitude wechselt der Grundzustandsimpuls wesentlich seltener. Dieses Ergebnis deutet darauf hin, daß auch im Mehrlochfall der Hüpfsterm und der Heisenbergsterm nicht miteinander konkurrieren und die Löcher weniger stark miteinander wechselwirken.

In Anhang E sind die Grundzustandsenergien für verschiedene Werte der Hüpfamplitude t und endlicher Heisenbergkonstante J angegeben. Für große Beträge der Hüpfamplitude t wird bei endlicher Heisenbergwechselwirkung die Impulsabhängigkeit der Grundzustandsenergien durch den Hüpfsterm bestimmt. Die Abgrenzung dieses Regimes ist abhängig von der Lochanzahl. Für mehrere Löcher ist in der Regel die Bandbreite der Energieeigenwerte für negative Hüpfamplitude wesentlich kleiner als für positive Hüpfamplitude. Dieses führt dazu, daß analog wie im Einlochfall die effektive Masse aus der Impulsabhängigkeit der Energie für $t < 0$ sehr viel höher als für $t > 0$ ist. Dieser Massenunterschied zeigt, daß für $t < 0$ jedes Loch von vielen Spinpolaronen umgeben ist, die mitbewegt werden müssen, während im anderen Fall die magnetischen Anregungen aus der 120° -Struktur, die ein Loch begleiten, weit weniger ausgeprägt sind.

Für endliche Heisenbergkonstante ergibt sich für zwei Löcher bei 27 Plätzen, daß das Bandminimum im Bereich $-0.2J \geq t > -1.0J$ bei K und für $t > 0$ bei B liegt. Der letzte Punkt ist wiederum nur in der Brillouinzone des 27-Platz-Systems enthalten, aber der Impuls C der 21-Platz Gitterzelle, der den

Grundzustand für $N = 21$ charakterisiert, liegt am nächsten zum Impuls B der 27-Platz-Gitterzelle. Da $N = 27$ eine symmetrischere und größere Brillouinzone aufweist, ist anzunehmen, daß der Grundzustandsimpuls in diesem Regime bei B der Brillouinzone der Gitterzelle mit $N = 27$ liegt. Dieses stimmt nicht mit einer Vorhersage von Azzouz [15] auf der Basis von SCBA-Rechnungen überein.

5.5.2 Bindungsenergien der Löcher

Aus den Grundzustandsenergien für verschiedene Lochanzahlen lassen sich die Paarbindungsenergien ΔE für zwei Löcher gemäß der Formel

$$E_{0h+2h-2*1h} = E(n_h = 0) + E(n_h = 2) - 2E(n_h = 1) \quad (5.34)$$

berechnen. Eine negative Paarbindungsenergie bedeutet, daß es energetisch vorteilhafter ist, zwei Löcher in das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter einzubringen, als zwei einzelne sehr weit voneinander entfernte Löcher zu erzeugen, die sich nicht beeinflussen. In Diagramm 5.15 sind die Paarbindungsenergien für zwei Löcher und die Systemgrößen $N = 21$ und $N = 27$ aufgelistet. Beide Systemgrößen zeigen einen ähnlichen Verlauf der Paarbindungsenergie $E_{0h+2h-2*1h}$, wobei die Resultate für das größere $N = 27$ -System tendenziell geringere Werte zeigen. Eine Ursache dafür ist zum einen, daß die Impulsvektoren in der Brillouinzone teilweise unterschiedlich sind, und zum anderen, daß das symmetrischere $N = 27$ -System weniger geometrische Verzerrung aufweist. Zudem ist das größere System näher am thermodynamischen Limes.

Für alle Werte der Hüpfamplitude t ist die Paarbindungsenergie positiv, d.h. das physikalische System bevorzugt zwei einzelne Löcher. Deutlich sind die Unterschiede zwischen positiver und negativer Hüpfamplitude t erkennbar. Für positive Hüpfamplitude ist aufgrund der Nichtbevorzugung von Spinpolaronen die Bindungstendenz nicht so ausgeprägt wie für negative t , da in diesem Fall die ferromagnetischen Regionen um die Löcher stärker überlappen und daher die Löcher stärker delokalisieren können. Das lokale Maximum bei $t \approx -0.2J$ und das lokale Minimum bei $t \approx -0.8J$ wird durch die Veränderung der Grundzustandswellenfunktion für zwei Löcher durch den Wechsel des Grundzustandsimpulses verursacht. Für die Auswertung der Paarbindungsenergie in Bezug auf Phasenseparation ist aber zu beachten, daß eine gerade Anzahl von Löchern zu einem nichtverschwindenden Gesamtspin $S \geq \frac{1}{2}$ des Grundzustandes führt. Dagegen weist das t - J -Modell mit einem Loch bei starker Heisenbergwechselwirkung und positiver Hüpfamplitude für die betrachteten Systemgrößen einen verschwindenden Gesamtspin $S=0$ auf. Als eine grobe Abschätzung des Einflusses der endlichen Gitterzelle auf die Bindungsenergien bei kleinen $|t|$ kann die Abweichung der Locherzeugungsenergien $E_{1,loc}^{ex}$ aus exakter Diagonalisierung (siehe Tabelle 5.1) von der Locherzeugungsenergie $E_{1,loc}^{SCBA,\infty}$ bei $t = 0$ von etwa $0.1J$ genommen werden. Die für die betrachteten Gitterzellen berechnete Paarbindungsenergie wäre dann etwa $0.3J$ zu hoch. Daher ist es nicht ausgeschlossen, daß im thermodynamischen Limes für betragsmäßig kleine Hüpfamplituden sich zwei Löcher binden können. Diese Hypothese wird durch den Vergleich der Grundzustandsenergien von einem Loch und drei Löchern mit der von zwei Löchern $E_{1h+3h-2*2h} = E(n_h = 1) + E(n_h = 3) - 2E(n_h = 2)$ gestützt, die in Diagramm 5.16 gezeigt ist, und starke „finite-size“-Effekte offenbart. Für diese Größe gehen die Grundzustandsenergien von den Systemen mit ganz- bzw. halbzahligem Gesamtspin im Vergleich zu $E_{0h+2h-2*1h}$ mit entgegengesetzten Vorzeichen ein. Die Bindungsenergie $E_{1h+3h-2*2h}$ ist für alle Hüpfamplituden negativ und ihr Betrag steigt mit wachsendem Betrag von t . Der Verlauf von $E_{2h+4h-2*3h} = E(n_h = 2) + E(n_h = 4) - 2E(n_h = 3)$ ist analog zu $E_{1h+3h-2*2h}$: Die Paarbindungsenergie ist positiv, d.h. die drei Löcher in einem System sind energetisch stabiler als zwei und vier Löcher.

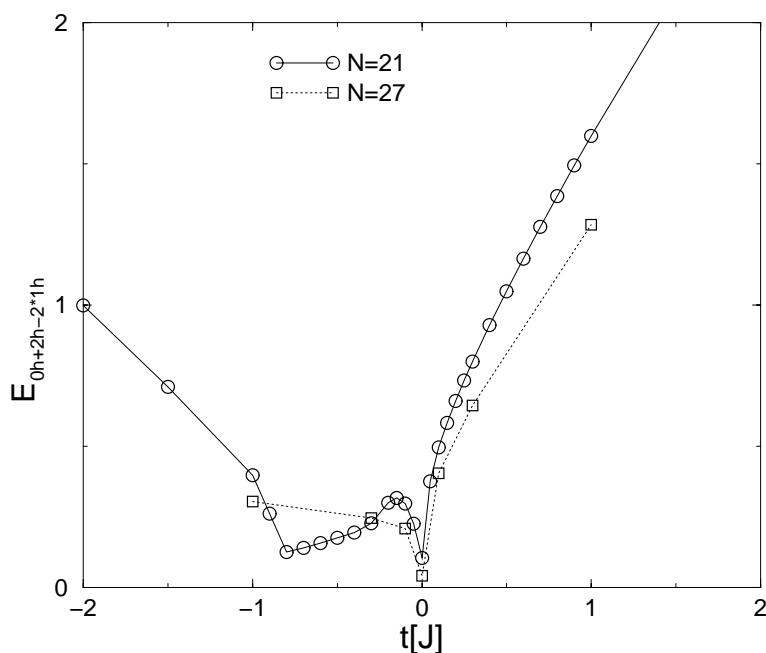


Abbildung 5.15: Paarbindungsenergie $E_{0h+2h-2*1h}$ für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter für $N = 21$ und $N = 27$ in Abhängigkeit der Hüpfamplitude t . Die Linien haben keine physikalische Bedeutung.

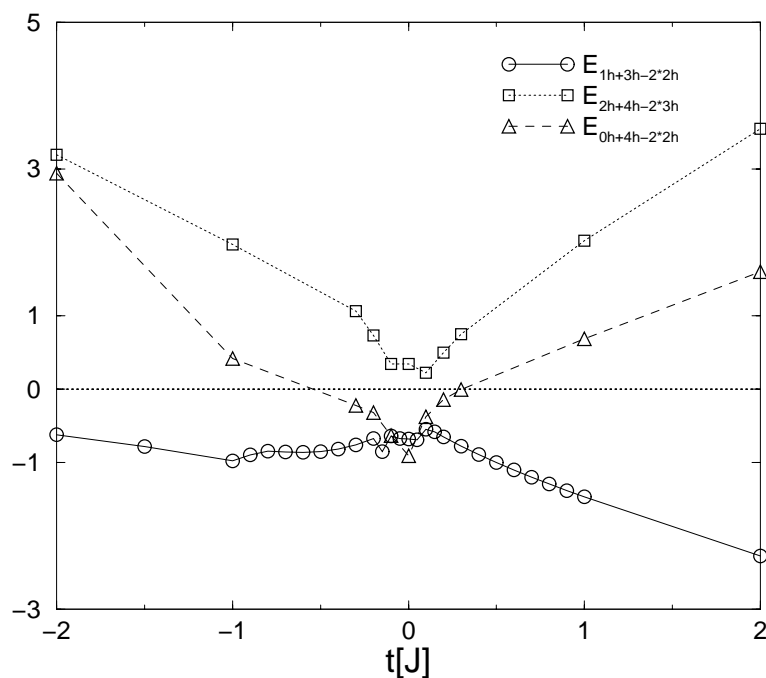


Abbildung 5.16: Paarbindungsenergien $E_{1h+3h-2*2h}$, $E_{2h+4h-3*2h}$ und $E_{0h+4h-2*2h}$ für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter für $N = 21$ in Abhängigkeit der Hüpfamplitude t . Die Linien haben keine physikalische Bedeutung.

Um die Effekte des unterschiedlichen Gesamtspins für gerade und ungerade Elektronenanzahl herauszumitteln, wird die Differenz der Grundzustandsenergien $E_{0h+4h-2*2h} = E(n_h = 0) + E(n_h = 4) - 2E(n_h = 2)$, die mit der Kompressibilität $\kappa = \frac{(N-n_h)^2}{N} (E(n_h - 2) + E(n_h + 2) - 2E(n_h))$ [7] zusammenhängt, betrachtet. Das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter zeigt für $E_{0h+4h-2*2h}$ bei großer Hüpfamplitude $|t|$ Stabilität von paarweise gebundenen Löchern, während für $-0.5J < t \leq 0.3J$ es energetisch vorteilhafter ist, vier Löcher in einem einzigen System zu erzeugen, anstatt zweimal ein einzelnes Lochpaar.

Die Untersuchung der Energieeigenwerte zeigt eine starke Abhängigkeit von der Systemgröße, die keine eindeutigen Ergebnisse für die Existenz von Phasenseparation zuläßt. Vorteilhafter ist es daher, die Lochkorrelationsfunktionen der jeweiligen Grundzustände zu betrachten, da sie direkt die Tendenz zur Häufung von Löchern zeigen.

5.5.3 Lochkorrelationsfunktionen

Für den absoluten Grundzustand zum Impuls \mathbf{k}_0 zu festem t wurde der normierte Grundzustandseigenvektor

$$|v\rangle = \sum_{\{h\}} \sum_{\{\sigma\}} C_{\mathbf{k}_0\{h\},\{\sigma\}} |\mathbf{k}_0, \{h\}, \{\sigma\}\rangle \quad (5.35)$$

mittels des Lanczos-Algorithmus berechnet. Die Summe wird über alle Spinkonfigurationen auf den besetzten Plätzen $\{\sigma\}$ für die verschiedenen Lochkonfigurationen $\{h\}$ durchgeführt. Die Wahrscheinlichkeit einer bestimmten Lochkonfiguration $\{h\}$ am Grundzustand $|v\rangle$ ergibt sich dann zu $A(\{h\}) = \sum_{\{\sigma\}} |C_{\mathbf{k}_0\{h\},\{\sigma\}}|^2$. Da für die endlichen Gitterzellen viele Plätze den gleichen Abstand r vom Ursprung aufweisen, werden zur Ermittlung der Lochkorrelationsfunktion $g(r) = g_r \sum_{\{h\}} A(\{h\}) \delta_{r,|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}$ Gewichtungsfaktoren g_r für die unterschiedlichen Abstände eingeführt. g_r^{-1} gibt die Anzahl der Plätze im Abstand r an. Dabei sind \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 die Positionen der Löcher in der Lochkonfiguration $\{h\}$. Dann gilt

$$\sum_{\mathbf{r}} g(|\mathbf{r}|) = 1. \quad (5.36)$$

Die Summe über \mathbf{r} läuft dabei über alle Gitterplätze, und es gilt stets $g_0 = 0$. Beim $N = 21$ -System ergeben sich $g_1 = g_{\sqrt{3}} = g_2 = \frac{1}{6}$, weil es jeweils 6 äquivalente Plätze im Abstand r gibt. Für den Abstand $r = \sqrt{7}$ gibt es nur zwei äquivalente Plätze, so daß die Gewichtung $g_{\sqrt{7}} = \frac{1}{2}$ beträgt. Für $N = 27$ betragen die Gewichtungsfaktoren $g_1 = g_{\sqrt{3}} = g_2 = g_{\sqrt{7}} = \frac{1}{6}$ und $g_3 = \frac{1}{2}$.

In Diagramm 5.17 ist die Paarkorrelationsfunktion für die Zustände mit verschiedenen Abständen r in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t gezeigt. Deutlich ist die Assymmetrie von $t \leftrightarrow -t$ sichtbar. Für $|t| < 0.15J$ halten sich die Löcher bevorzugt im minimal möglichen Abstand auf. Das ist dadurch erklärbar, daß die Anzahl der durch die Löcher aufgebrochenen Bindungen beim Abstand $r = 1$ minimiert werden. Zwei separierte Löcher verursachen zwölf aufgebrochene Bindungen, während zwei benachbarte Löcher lediglich elf offene Bindungen aufweisen. Der Hüpfterm favorisiert dagegen eine Trennung der Löcher, da zum einen das Hüpfen die Delokalisation fördert und zum anderen zwei eng benachbarte Löcher sich gegenseitig beim Hüpfen behindern. Für große Hüpfamplituden werden daher Löcher in großen Abständen bevorzugt.

In Diagramm 5.18 ist die Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ für das größere System mit $N = 27$ Plätzen und $n_h = 2$ Löchern gezeigt. Im Bereich $-0.1J < t < 0.2J$ wird die Paarkorrelationsfunktion von Zuständen dominiert, in denen sich die Löcher bevorzugt an benachbarten Plätzen aufhalten. Mit betragsmäßig ansteigender Hüpfamplitude wird die Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit $A(\{h\})$ für größere Abstände höher. Auffällig ist der sehr starke Anstieg beim Verlassen des phasenseparierten Bereiches für den Abstand $r = \sqrt{3}$, bei dem die Löcher auf dem gleichen Untergitter sind. Der kleine

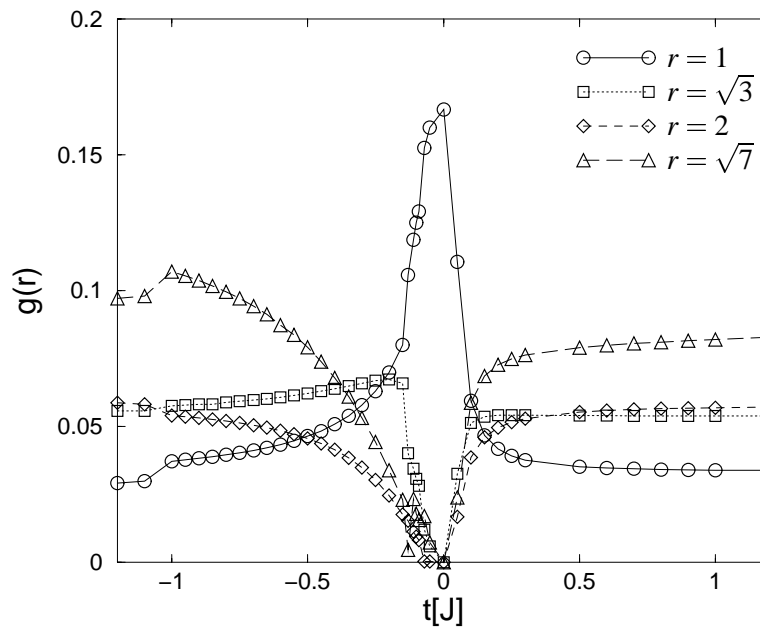


Abbildung 5.17: Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ zweier Löcher im Abstand r für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter für $N = 21$ mit zwei Löchern in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t . Die Linien sind ein „guide to the eye“.

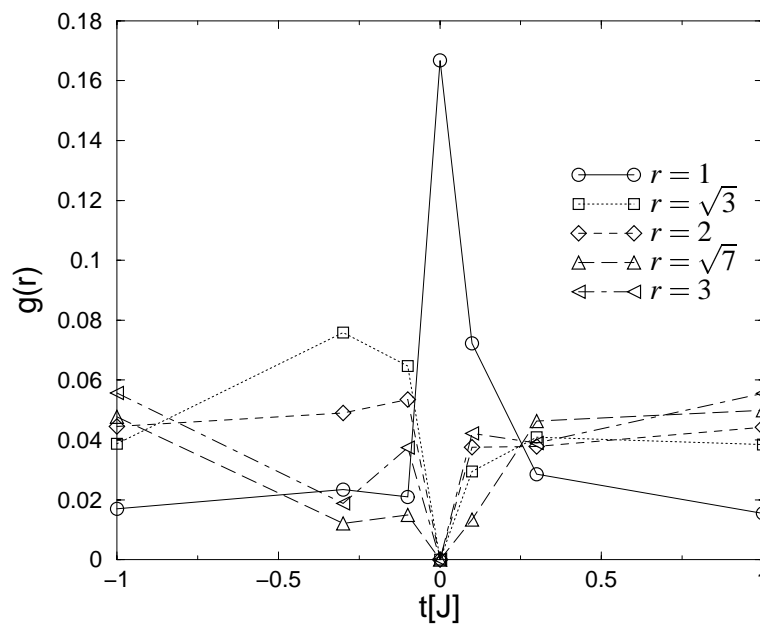


Abbildung 5.18: Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ zweier Löcher für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter für $N = 27$ mit zwei Löchern in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t . Die Linien sind ein „guide to the eye“.

Wert für den Abstand $r = 3$ ist zu erklären, daß für zwei Löcher jeder Hüpfvorgang zu einem anderen geringeren Abstand führt. Nimmt die Hüpfamplitude zu, nimmt daher die entsprechende Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit zunächst leicht ab, um dann später wieder anzusteigen, wenn die

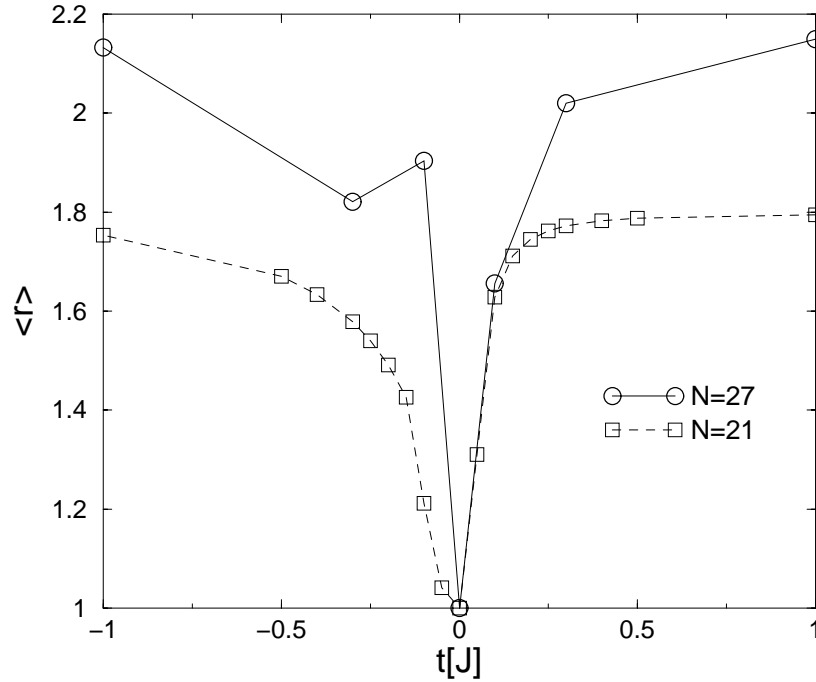


Abbildung 5.19: Durchschnittlicher Abstand $\langle r \rangle$ zweier Löcher für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter für $N = 21$ und $N = 27$ mit zwei Löchern in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t . Die Linien sind ein „guide to the eye“.

Hüpfprozesse eines Loches die gesamte Gitterzelle überdecken. Der Sprung für $t = -0.3$ wird durch einen Wechsel des Grundzustandsimpulses verursacht. Das Diagramm 5.19 zeigt einen Vergleich des durchschnittlichen Abstandes für das $N = 21$ und $N = 27$. Es wird deutlich, daß für größeres $|t|/J$ die Löcher für das größere System sich im Durchschnitt weiter voneinander entfernt aufhalten.

5.5.4 Dreilochkorrelationen

Für drei Löcher im t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter mit $N = 21$ Plätzen wurde die Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit $A(\{h\})$ für Gruppen von Lochzuständen $\{h\}$, die bis auf Drehungen und Translationen im Ortsraum identisch sind, numerisch berechnet. In Diagramm 5.20 sind für Lochkonfigurationen mit einem Loch am Platz 0, in denen die Lochpositionen ein gleichseitiges Dreieck mit Seitenlänge r bilden, die Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit als Funktion der Hüpfamplitude gezeigt. Die Gewichtungen $g_{(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)}$ zur Umrechnung der Lochkonfigurationswahrscheinlichkeiten $A(\{h\})$ in die Dreilochkorrelationsfunktion

$$g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \sum_{\{h'\}} g_{(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)} A(\{h'\})$$

für die repräsentativen Lochkonfigurationen sind in Tabelle 5.5 angegeben. Die Summation erfolgt über die unterschiedlichen Lochkonfigurationen $\{h'\}$, die aus der Dreilochkonfiguration $\{h\} \equiv (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ durch Translation, Rotation und Spiegelungen der $N = 21$ Gitterzelle hervorgehen.

Für $-0.15J < t < 0.1J$ ist die Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit auf den Zustand mit minimalem Lochabstand konzentriert, d.h. das t - J -Modell zeigt in der Grundzustandswellenfunktion Phasenseparation. Bei Verlassen dieses Bereiches wechselt der Grundzustand sofort auf den Lochzustand mit ma-

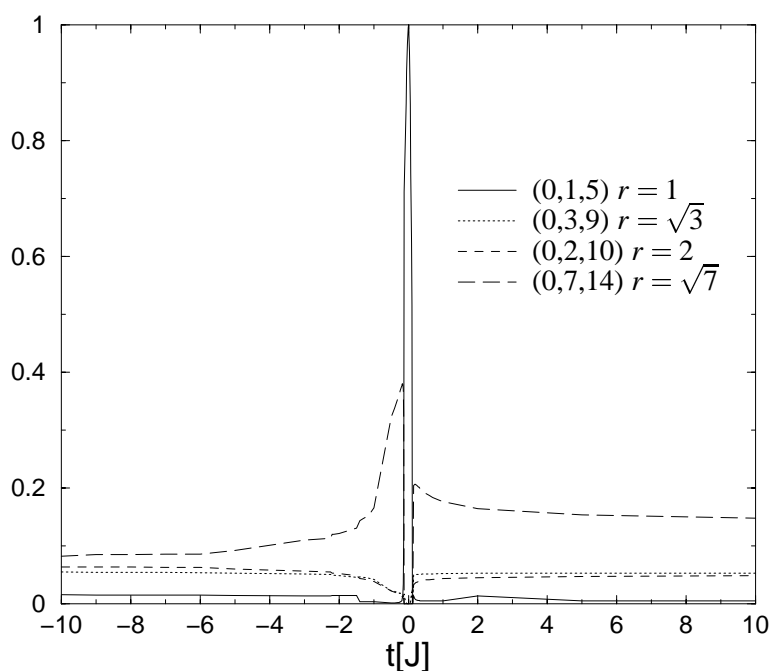


Abbildung 5.20: Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit $A(\{h\})$ für die Gruppen der Lochkonfigurationen $\{h\}$ im Grundzustand, die ein gleichseitiges Dreieck mit Kantenlänge r bilden, für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter mit $N = 21$ bei drei Löchern in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t . Die Gruppen der Lochkonfigurationen werden durch die Plätze der Löcher für eine repräsentative Lochkonfiguration bezeichnet (siehe Anhang D).

	$g_{(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)}$		$g_{(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)}$		$g_{(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)}$
$(0,1,2)$	$\frac{1}{63}$	$(0,1,3)$	$\frac{1}{126}$	$(0,1,4)$	$\frac{1}{126}$
$(0,1,5)$	$\frac{1}{42}$	$(0,1,7)$	$\frac{1}{126}$	$(0,2,4)$	$\frac{1}{63}$
$(0,2,5)$	$\frac{1}{126}$	$(0,2,6)$	$\frac{1}{126}$	$(0,2,7)$	$\frac{1}{126}$
$(0,2,8)$	$\frac{1}{126}$	$(0,2,9)$	$\frac{1}{126}$	$(0,2,10)$	$\frac{1}{42}$
$(0,3,6)$	$\frac{1}{63}$	$(0,3,9)$	$\frac{1}{42}$	$(0,7,14)$	$\frac{1}{7}$

Tabelle 5.5: Gewichtungsfaktoren $g_{(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)}$ für die Dreilochzustände in der Dreilochkorrelationsfunktion für $N = 21$

ximal entfernten Löchern mit $r = \sqrt{7}$. Dieses Verhalten deutet darauf hin, daß Stripes, eindimensionale Bereiche, in denen sich die Löcher bevorzugt aufhalten, nicht begünstigt werden. Die Sprünge im Diagramm für negative t sind wieder auf den Wechsel der Grundzustandsimpulse zurückführbar. Für größere $|t|$ sinkt dann diese Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit, da die Lochpositionen durch das verstärkte Hüpfprozesse zusätzlich unschärfer werden. An den Rändern des Parameterbereiches der

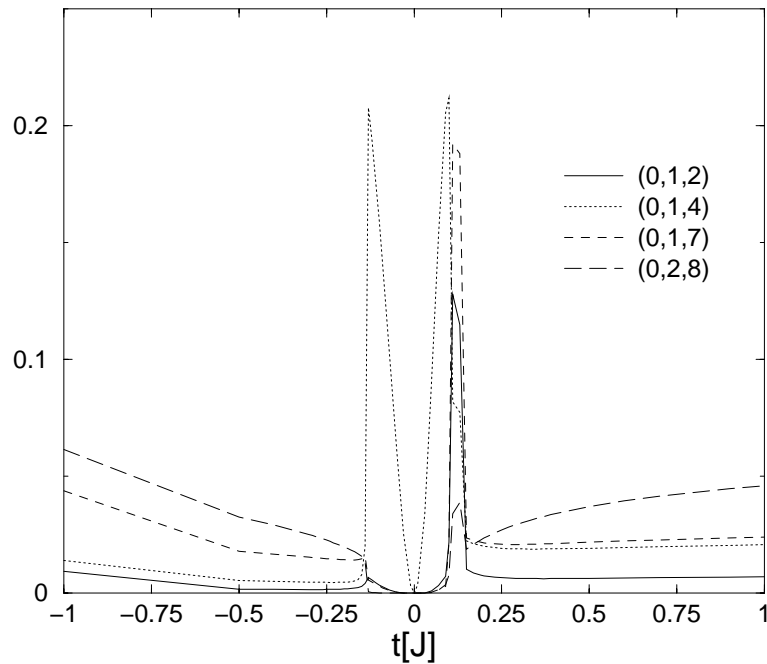


Abbildung 5.21: Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit $A(\{h\})$ für einige Gruppen von Lochkonfigurationen im Grundzustand für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter für $N = 21$ mit drei Löchern in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t . Die Gruppen der Lochkonfigurationen werden durch die Plätze der Löcher für eine repräsentative Lochkonfiguration bezeichnet (siehe Anhang D).

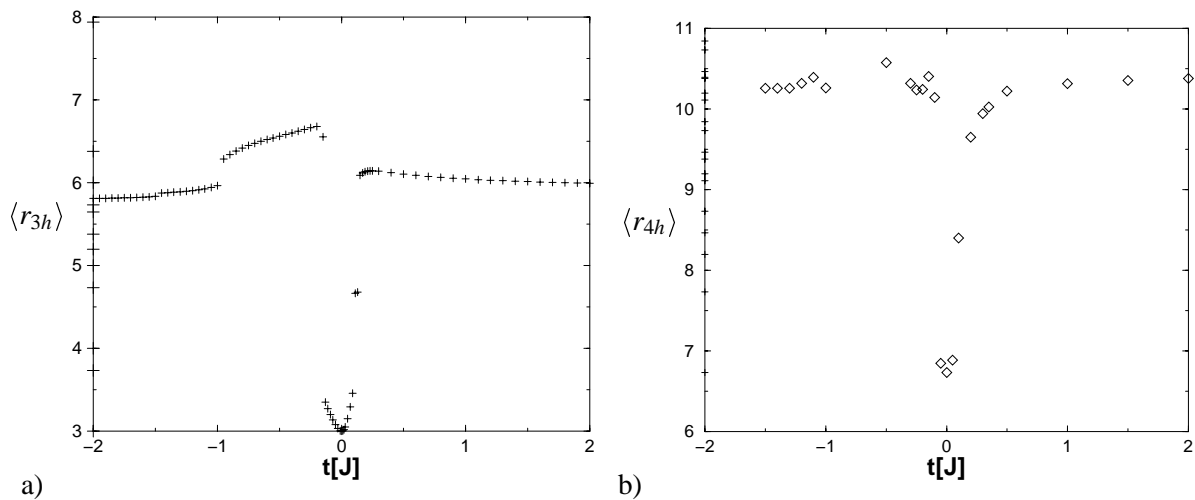


Abbildung 5.22: Mit der Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit gemittelte Summe der minimalen Lochdistanzen für den Grundzustand des t - J -Modells a) $\langle r_{3h} \rangle$ mit drei Löchern bzw. b) $\langle r_{4h} \rangle$ mit vier Löchern in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t . Die möglichen Werte der Summe der Lochdistanzen für einzelne Lochkonfigurationen sind durch kleine Striche auf der linken Skala angegeben.

phasenseparierten Region sammelt sich die fehlende Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit zunächst in dem Zustand $(0,1,4)$, der durch einen einzelnen Hüpfprozess aus dem Cluster $(0,1,5)$ entsteht (siehe Figur 5.21). Dabei löst sich das Loch aber noch nicht vom Cluster. Für positive t verlagert sich mit stärkerem Hüpfen die Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit in den linearen Lochzustand $(0,1,2)$, und es kann sich schließlich ein Loch vom Cluster ganz ablösen $(0,1,7)$. Für negative Hüpfamplitude ist dieser Vorgang nicht beobachtbar. Das bedeutet, daß für positive t die Löcher unabhängiger als für negative t sind. Mit zunehmender Hüpfamplitude werden dann die noch weiter separierten Lochzustände wie beispielsweise $(0,2,8)$ bevorzugt.

In Fig. 5.22 a) ist die mit der Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit gemittelte Summe der Lochabstände¹ $\langle r_{3h} \rangle$ zwischen den drei Löchern in Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t dargestellt. Diese Größe reduziert sich für zwei Löcher auf den durchschnittlichen Abstand der beiden Löcher $\langle r \rangle$. Man erkennt wiederum deutlich den Bereich der Phasenseparation $-0.15J < t < 0.13J$, wo fast ausschließlich der Lochzustand mit der niedrigsten Summe der Lochdistanzen besetzt ist. Für positive t nähert sich $\langle r_{3h} \rangle$ kontinuierlich dem Wert ohne magnetische Wechselwirkung an.

5.5.5 Vierlochkorrelationen

Es wurde ebenfalls für das t - J -Modell mit $n_h = 4$ die Vierlochkorrelationsfunktion bestimmt. In Diagramm 5.22 b) ist wieder die mit der Lochkonfigurationswahrscheinlichkeit gemittelte Summe der minimalen Lochdistanzen für den Grundzustand des t - J -Modells $\langle r_{4h} \rangle$ dargestellt. Wiederum ergibt sich für den Bereich mit dominanter magnetischer Wechselwirkung $-0.12J < t < 0.15J$ Phasenseparation. Der Bereich der Phasenseparation hängt kaum von der Lochanzahl n_h ab. Mit wachsender positiver Hüpfamplitude t steigt $\langle r_{4h} \rangle$ schneller mit $|t|$ an als für negative Hüpfamplitude. Dieses unterstützt, daß viele Löcher in diesem Fall die frustrierte magnetische Ordnung des Heisenbergmodells weniger stark ändern als für den Fall von Spinpolaronen bei negativem t . Der sprunghaftere Verlauf in diesem Fall ist wieder auf die Änderungen des Grundzustandsimpulses zurückführbar.

5.5.6 Elektronische Impulsverteilung

In diesem Abschnitt wird die Elektronenimpulsverteilung mit Spin σ für den Grundzustand des $N = 21$ -Systems mit ein bis drei Löchern untersucht. Sie ist definiert als [40]

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - c_{i-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}) (1 - c_{j-\sigma}^\dagger c_{j-\sigma}) \rangle_0. \quad (5.37)$$

Diese Definition berücksichtigt, daß im t - J -Modell keine Doppelbesetzung möglich ist. Der Erwartungswert ist mit dem entsprechenden Grundzustand zu bilden. Zur Vereinfachung der Darstellung wird angenommen, daß die S_z -Komponente des Gesamtspins nicht negativ ist. Für Zustände mit negativem S_z vertauschen $n_{\mathbf{k}\sigma}$ und $n_{\mathbf{k}-\sigma}$ die Rollen im Vergleich zum positiven Fall. Die Differenz $n_{\mathbf{k}\uparrow} - n_{\mathbf{k}\downarrow}$ zeigt bei ungerader Elektronenzahl, bei welchen Impulsen sich der überzählige Spin bevorzugt aufhält. Der Wertebereich der Elektronenimpulsverteilung ist durch eine obere Schranke beschränkt

$$0 \leq n_{\mathbf{k}\sigma} \leq \frac{N_\sigma + n_h}{N}$$

und die gemittelte Dichte über die Brillouinzone beträgt $\bar{n}_\sigma = N_\sigma/N$. Dabei bezeichnet N_σ die Anzahl der Elektronen mit Spineinstellung σ . Ein Beispiel für $n_h = 2$ bei endlichem J ist in Diagramm 5.23 gezeigt.

¹Der Abstand zweier Löcher kann wegen der periodischen Randbedingungen auch über die Ränder einer Gitterzelle reichen. Es wird stets der minimale Abstand in den Berechnungen verwendet.

Eine positive S_z -Komponente des Gesamtspins für ungerade Gesamtelektronenzahl bestimmt, daß für die Elektronenimpulsdichte $\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\uparrow} > \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\downarrow}$ gilt. Dagegen gilt für die Grundzustände mit gerader Elektronenzahl, daß $n_{\mathbf{k}\uparrow}$ identisch mit $n_{\mathbf{k}\downarrow}$ ist. Liegt der Grundzustandsimpuls nicht am Ursprung, so weist die Elektronendichteverteilung keine Rotationssymmetrie auf.

Zunächst wird die Elektronenimpulsverteilung $n_{\mathbf{k}\sigma}$ für das t - J -Modell mit verschwindender magnetischer Wechselwirkung betrachtet. Die Elektronenimpulsverteilung zeigt ein unterschiedliches Verhalten abhängig vom Vorzeichen der Hüpfamplitude t . Für negative Hüpfamplitude ergibt sich ein Minimum der Elektronenimpulsverteilung $n_{\mathbf{k}\sigma}$ des Grundzustandes bei Γ und Maxima bei K für alle untersuchten Lochzahlen n_h . Im Einlochfall verschwindet die Elektronenimpulsverteilung bei Γ im ferromagnetischen Nagaoka-Zustand, und im Rest der Brillouinzone hat sie den konstanten Wert $\frac{1}{2}$. In diesem Fall kann also der Einlochgrundzustand durch einen Produktzustand aus $N - 1$ Elektronen mit Gesamtspin $\frac{N-1}{2}$ beschrieben werden. Ein Minimum von $n_{\mathbf{k}\downarrow}$ bei Γ sagt ebenfalls die Einlochdispersion $-2t\gamma_{\mathbf{k}}$ eines freien Elektrons auf dem Dreiecksgitter voraus. Mit steigender Anzahl der Löcher flacht der Sprung bei Γ in $n_{\mathbf{k}\sigma}$ ab, und das Minimum bei Γ wird breiter.

Für das System mit ungerader Elektronenzahl ($n_h = 2$) steigt die Elektronenimpulsverteilung bei Γ auf etwa die Hälfte des Durchschnittswertes \bar{n}_{\uparrow} an. Die Werte der Elektronenimpulsdichte am Ursprung ist für beide Einstellungen von σ fast gleich. Dagegen verteilt sich die Differenz $n_{\mathbf{k}\uparrow} - n_{\mathbf{k}\downarrow}$ auf die gesamte restliche Brillouinzone. Eine eindeutige Abhängigkeit von $n_{\mathbf{k}\uparrow} - n_{\mathbf{k}\downarrow}$ von der Entfernung zum Ursprung der Brillouinzone ist nicht erkennbar, da der Gesamtimpuls des Grundzustandes nicht verschwindet.

Bei positiver Hüpfamplitude t gibt es einen starken Unterschied zwischen dem Einlochfall und dem Mehrlochfall. Im Einlochfall liegt das Minimum der Elektronendichte bei Γ und das Maximum bei K , aber der Abstand zwischen Minimum und Maximum von $n_{\mathbf{k}\sigma}$ ist wesentlich geringer als für $t < 0$. Bei mehreren Löchern und $t > 0$ ergibt sich eine völlig andere Elektronenimpulsverteilung. Es gibt nun zwei äquivalente Minima auf den Ecken K der Brillouinzone, und die Elektronenimpulsverteilung weist ein ausgeprägtes Maximum bei Γ auf. Diese Merkmale lassen sich für $n_h = 2$ und $n_h = 3$ wiederum durch die freie Dispersion $-2t\gamma_{\mathbf{k}}$ eines einzelnen Elektrons reproduzieren. Die Minima von $n_{\mathbf{k},\sigma}$ bei K sind wesentlich weniger stark ausgeprägt als für $t < 0$, und die Differenz $n_{\mathbf{k}\uparrow} - n_{\mathbf{k}\downarrow}$ ist an der Stelle der Minima klein. Der überzählige Spin für $n_h = 2$ ist auf den Rest der Brillouinzone verteilt mit der größten Differenz bei Γ .

Insgesamt verfügt die Elektronenimpulsverteilung für $J = 0$ und $t > 0$ durch die Wechselwirkungen der Elektronen untereinander über einen breiten inkohärenten Untergrund, der anzeigt, daß keine einzelnen Elektronen mit definierten Spin und Impuls vorliegen, sondern jedes fehlende Elektron durch ein Quasiteilchen beschrieben wird, das Löcher und magnetische Anregungen mit verschiedenen Impulsen enthält.

Ist nun zusätzlich eine schwache Heisenbergwechselwirkung $J \ll |t|$ vorhanden, so ändert sich der qualitative Verlauf der Elektronenimpulsverteilung für dominanten Hüpfterm mit positiver Hüpfamplitude wenig. Wird der Heisenbergterm stärker, so vermindert sich der Abstand zwischen Maximum und Minimum der Elektronenimpulsverteilung und der inkohärente Untergrund steigt durch die zusätzliche magnetische Wechselwirkung an. Dies resultiert in einer Glättung von $n_{\mathbf{k}\pm\sigma}$. Die nicht abgesättigte magnetische Wechselwirkung für ungerade Elektronenzahl ($n_h = 2$) mit Gesamtspin $S = \frac{1}{2}$ glättet die Unterschiede in der Impulsverteilung zusätzlich.

Für negative Hüpfamplitude ändert sich der Grundzustandsimpuls bei gegebener Lochanzahl häufiger als für positive Hüpfamplitude t . Bei großen $|t|/J$ ähneln die Elektronenimpulsverteilungen denen des t - J -Modells bei verschwindendem Heisenbergterm. Mit dem Wechsel des Grundzustandsimpulses mit zunehmender Heisenbergwechselwirkung nimmt die Bandbreite der Elektronenimpulsverteilung gegenüber dem Fall $J = 0$ ab.

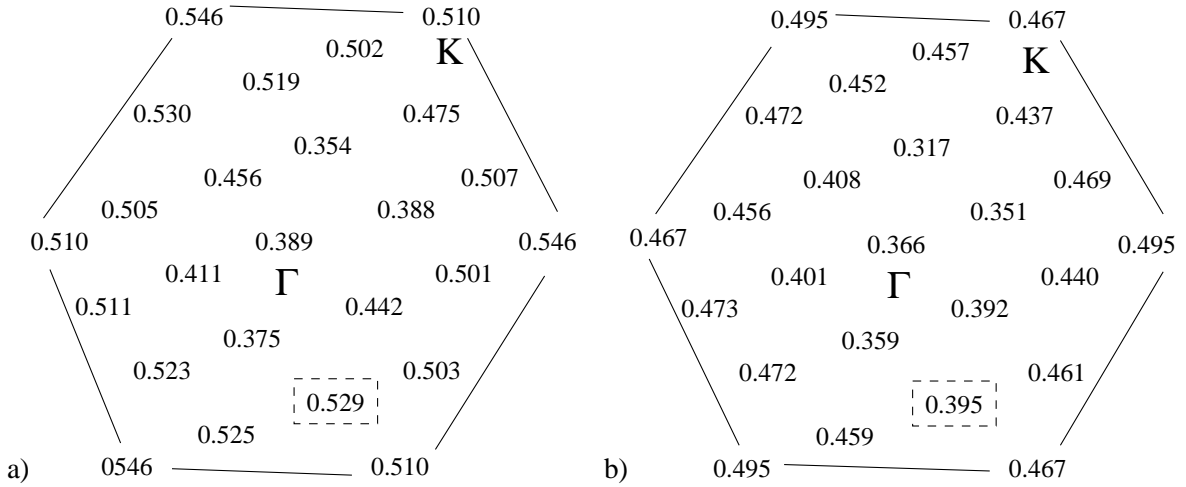


Abbildung 5.23: a) $n_{\mathbf{k}\uparrow}$ bzw. b) $n_{\mathbf{k}\downarrow}$ für den Zweilochgrundzustand bei $t = -1.1$ und $J = 1$. Die Elektronenimpulsverteilung ist nicht rotationssymmetrisch, weil der Grundzustandsimpuls bei C liegt. Dieser Punkt ist durch den gestrichelten Kasten markiert. Dort weisen $n_{\mathbf{k}\uparrow}$ und $n_{\mathbf{k}\downarrow}$ den größten Unterschied auf. Deutlich ist zudem die Senke in der Nähe von Γ erkennbar.

Im Einlochfall bei negativem t setzt sich der ferromagnetisch geordnete Nagaoka-Zustand vom reinen Hüpfterm bis zu $t \lesssim -17.26J$ fort. Bei Hüpfamplituden mit $t > -17.26J$ tritt das Verschwinden der Elektronenimpulsverteilung bei Γ und die Gleichverteilung im Rest der Brillouinzone nicht mehr auf. Es verbleibt nur ein schwaches Minimum in der Impulsverteilung bei Γ und Umgebung und ein Maximum bei K . Ab $t = -0.85J$ nimmt die Bandbreite der Elektronenimpulsverteilung zusätzlich ab, und $n_{\mathbf{k}\sigma}$ ist in der Umgebung von K leicht erhöht.

Bei zwei Löchern gibt es ein Minimum von $n_{\mathbf{k}\sigma}$ bei Γ , das mit zunehmendem J weniger ausgeprägt ist, und die Maxima liegen bei oder in der Nähe von K . Im Bereich $10J > t > -10J$ ist die Differenz $n_{\mathbf{k}\uparrow} - n_{\mathbf{k}\downarrow}$ am jeweiligen Impuls des Grundzustandes groß (siehe Fig. 5.23) und steigt mit stärkerer Heisenbergwechselwirkung an. Dieses Verhalten wurde für den Einlochgrundzustand auf dem Quadratgitter, der ebenfalls über eine ungerade Elektronenzahl verfügt, beobachtet [4].

Bei drei Löchern ist die Elektronenimpulsverteilung für positive Hüpfamplitude und $J \neq 0$ der Elektronenimpulsverteilung des t - J -Modells mit $J = 0$ sehr ähnlich. Dieses bestätigt ebenfalls, daß in diesem Fall Hüpfterm und Heisenbergterm eine ähnliche Elektronenimpulsverteilung bevorzugen. Für $t < 0$ und $J > 0$ wechselt der Grundzustandsimpuls mehrmals zwischen Γ und C hin und her. Für Grundzustandsimpuls Γ und $t \lesssim -2.25J$ gleicht die Impulsverteilung qualitativ der Hüpftermes bei $J = 0$, auch wenn die Minima mit sinkender Hüpfamplitude t schwächer ausgeprägt sind. Für den Grundzustand bei C im Bereich $-2.20J \lesssim t \lesssim -1.5J$ ist die Bandbreite im Vergleich dazu nochmals vermindert. Im Bereich mit Tendenz zur Phasenseparation $|t| \lesssim 0.15J$ ist den Elektronenimpulsverteilungen der Hüpftermes eine starker inkohärenter Untergrund überlagert, der auf gebundene lokalisierte Zustände hindeutet.

Kapitel 6

Verdünnte magnetische Systeme auf dem Dreiecksgitter

In diesem Abschnitt wird die gemittelte Energie und der Spinstrukturfaktor bei verschwindender Temperatur für den $S = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter-Heisenbergantiferromagneten mit zufällig verteilten ortsfesten Löchern zu fester Lochkonzentration untersucht. Im Mittelpunkt steht dabei die Frage, welchen Einfluß die Löcher auf die magnetische Ordnung des Dreiecksgitterantiferromagneten haben.

Die Löcher repräsentieren beispielsweise nichtmagnetische Ionen auf einem Dreiecksgitter, die die Plätze der magnetischen Spins einnehmen und das Gitter dabei nicht verzerren. Die Substitution eines Spins durch ein nichtmagnetisches Ion verursacht ein Aufbrechen der beteiligten Heisenbergbindungen. Die Verteilung der Löcher auf dem Dreiecksgitter ist unabhängig von den magnetischen Freiheitsgraden und jede Lochkonfiguration ist gleichwahrscheinlich.

Für den Heisenbergantiferromagneten auf dem Quadratgitter wurde mittels Quanten-Monte-Carlo-Simulation die gemittelte Energie und die Untergittermagnetisierung numerisch bei endlichen Temperaturen berechnet, und die Ergebnisse nach $T = 0$ extrapoliert [41, 42]. Dabei wurde gefunden, daß die Energie pro Bindung für Systeme mit mehr als 8×8 Plätzen kaum von der Systemgröße abhängt. Die Untergittermagnetisierung auf dem Quadratgitter nimmt bei fester Systemgröße linear mit der Lochkonzentration ab.

Für das hier betrachtete Modell des Antiferromagneten auf dem Dreiecksgitter versagt die Quanten-Monte-Carlo-Methode wegen des sogenannten Vorzeichenproblems [33]. Als einziger Zugang zur Berechnung der Energie und der Untergittermagnetisierung verbleibt somit die exakte Diagonalisierung kleiner Zellen. Aus rechentechnischen Gründen bestimmen wir hier anstelle der Untergittermagnetisierung den Strukturfaktor, der ähnlich wie die Untergittermagnetisierung auf das Vorliegen von magnetischer Ordnung schließen läßt.

Der verdünnte Heisenbergantiferromagnet auf dem Dreiecksgitter wird durch den folgenden Hamiltonoperator beschrieben:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (6.1)$$

Die Faktoren $n_i = 1(0)$ geben an, ob ein Spin auf einem Platz des Dreiecksgitters vorliegt (fehlt). Die Löcher werden als zufällig verteilt angenommen. Für physikalische Größen wird daher das Scharmittel über die Lochpositionen genommen.

Der gemittelte Energieerwartungswert und der gemittelte Spinstrukturfaktor werden mittels exakter Diagonalisierung kleiner Systeme bestimmt. Die verwendeten Gitterzellen mit 21 und 27 Plätzen weisen periodische Randbedingungen auf (siehe Anhang D). Die Zustände liegen in dem Unterraum mit

betragsmäßig minimaler S_z -Komponente des Gesamtspins. So kann mittels einer einzigen Diagonalisierung der Grundzustand aus den Zuständen aller Gesamtspins erhalten werden.

Die Anzahl der Lochzustände zu fixierter Lochanzahl für die betrachteten Systeme ist sehr groß. Für den größten Unterraum zu fester Lochzahl n_h der $N = 27$ -Gitterzelle mit $n_h = 13$ Löchern beträgt sie 20 058 300 Lochkonfigurationen. Die Anzahl der unterschiedlichen Lochkonfigurationen auf N Plätzen mit n_h Löchern lautet allgemein

$$\binom{N}{n_h}. \quad (6.2)$$

Eine Reduktion der Anzahl der Lochzustände, deren Hamiltonoperatoren diagonalisiert werden müssen, liefert die Ausnutzung von Rotations-, Translations- und Spiegelungssymmetrien der Gitterzellen. Für den größten Raum der Lochkonfigurationen reduziert sich dann die Zahl der durchzuführenden Diagonalisierungen auf 63 202. Die Anzahl der unterschiedlichen Lochkonfigurationen, die aus einer repräsentativen Lochkonfiguration \tilde{h} durch die Symmetrietransformationen erzeugt werden, legt die geometrische Multiplizität $g_m(\tilde{h})$ der Lochkonfiguration fest.

Für hohe Lochzahlen n_h zerfallen einige Lochkonfigurationen in zusammenhängende Spincluster, die miteinander nicht in Wechselwirkung treten, da sie durch Löcher vollständig voneinander getrennt sind. Die Anzahl und die interne Vielfachheit der Energieeigenwerte dieser Cluster der Lochkonfiguration \tilde{h} liefern zusätzliche Beiträge zur Entartung $g_{\tilde{h}}$. Da die Lanczosmethode keine Vielfachheit von Energieeigenwerten bestimmen kann, wird mit Hilfe von Diagonalisierungsroutinen der NAG-Bibliothek für spärlich besetzte Matrizen die Vielfachheit der Grundzustandseigenwerte der Lochzustände, die nur einen einzigen zusammenhängenden Spincluster aufweisen, bestimmt.

Da die Spinkorrelationen zwischen Spins verschiedener Cluster verschwinden, wird der Spinstrukturfaktor als Summe der Spinstrukturfaktoren der Cluster bestimmt. Aufgrund der Mittelung über alle Lochkonfigurationen ist der resultierende Spinstrukturfaktor $S(\mathbf{q})$ rotationssymmetrisch um $\mathbf{q} = 0$.

Jeder Cluster hat im Grundzustand einen Gesamtspin, der die Entartung des Grundzustandes der Lochkonfiguration mitbestimmt. Aufgrund der antiferromagnetischen Wechselwirkung ist der Gesamtspin $S_{\tilde{h},i}$ für den Cluster i meist minimal und die Entartung enthält einen Faktor $\prod_i (2S_{\tilde{h},i} + 1)$. Größere Gesamtspins $S_{\tilde{h},i} \geq 1$ eines Clusters treten auf, wenn beispielsweise die Untergitter stark unterschiedlich besetzt sind und der Cluster bipartit ist.

Zusätzlich kann jeder Cluster neben der Spinentartung eine Entartung aufgrund ihrer Form enthalten, der als Faktor $g_{\tilde{h},i}$ in die Gesamtentartung $g_{\tilde{h}}$ einer repräsentativen Lochkonfiguration \tilde{h} eingeht.

Die Gesamtentartung $g_{\tilde{h}}$ einer repräsentativen Lochkonfiguration ergibt sich also zu

$$g_{\tilde{h}} = g_m(\tilde{h}) \prod_i g_{\tilde{h},i} (2S_{\tilde{h},i} + 1). \quad (6.3)$$

Die gemittelte Grundzustandsenergie pro Spin ist in Diagramm 6.1 in Abhängigkeit von der Lochdichte $\delta = \frac{n_h}{N}$ gezeigt. Die Werte für $N = 21$ und $N = 27$ sind wie beim Quadratgitter sehr ähnlich und daher wird nahegelegt, daß die Energie pro Spin bereits den thermodynamischen Limes repräsentiert. Für $0 \leq \delta < 0.35$ sind für beide Systemgrößen die Energien durch die Gerade $(0.252975 \pm 0.01222)\delta - (0.56946 \pm 0.003442)(N = 21)$ und $(0.235458 \pm 0.00777)\delta - (0.566481 \pm 0.002035)(N = 27)$ gut beschrieben. Im Bereich der Platzperkolationsschwelle $\delta \approx 0.5$ für das Dreiecksgitter mit periodischen Randbedingungen [43, 44] treten Abweichungen von dieser Geraden auf, die mit zunehmender Lochdichte dominanter werden. Zum Vergleich ist die Grundzustandsenergie pro Spin der energetisch tiefsten Lochkonfiguration eingezeichnet. Für $\delta \leq 0.33$ sammeln sich in diesen Konfigurationen die Löcher einem Untergitter und bilden, soweit möglich, ein bipartites Gitter. Für höhere Lochdichten bilden die Spins bevorzugt Ketten, die ebenfalls eine bipartite Struktur aufweisen. Die zugehörigen

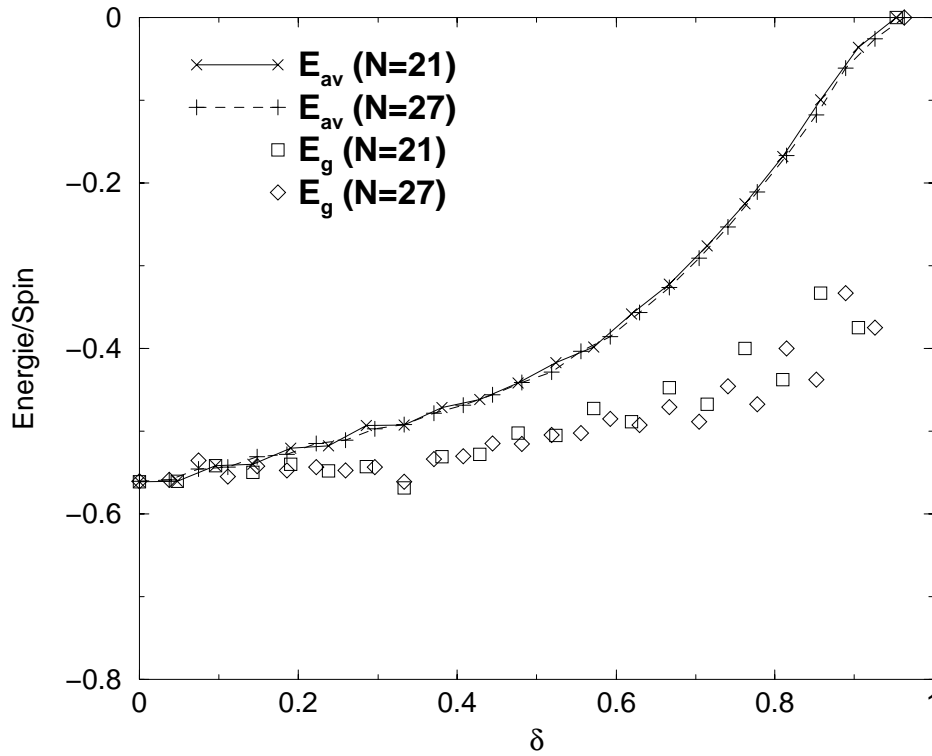


Abbildung 6.1: Die gemittelten Grundzustandsenergien E_{av} und die Energien E_g der energetisch tiefsten Grundzustände pro Spin für die periodischen Gitterzellen mit 21 bzw. 27 Plätzen in Abhängigkeit von der Lochdichte δ

Energien liegen daher wesentlich tiefer als die gemittelten Energien. Durch die vielen zufällig verteilten Löcher wird jenseits der Perkolationschwelle die Anzahl der Bindungen zwischen den Spins und damit die gemittelte Energie stärker reduziert.

Als weitere physikalische Größe wurde der über die Lochkonfigurationen gemittelte Spinstrukturfaktor bei $T = 0$ aus den Spinkorrelationen im Ortsraum der Grundzustände berechnet:

$$S(\mathbf{k}) = \langle S_{\mathbf{k}} \cdot S_{-\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{(N - n_h)} \sum_{i,j=0}^{N-1} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle n_i n_j S_i \cdot S_j \rangle. \quad (6.4)$$

In Diagramm 6.2 ist der normierte Spinstrukturfaktor $Y(\mathbf{k}) = \frac{8}{N - n_h + 6} S(\mathbf{k})$ für die Systeme mit a) $N = 21$ und b) $N = 27$ dargestellt. Der Spinstrukturfaktor aus [33] wurde bei Halbfüllung für $N = 21$ ($n_h = 0$) reproduziert. Für $N = 27$ und $n_h = 0$ wurden die Werte des Spinstrukturfaktors aus dieser Veröffentlichung übernommen.

Der Spinstrukturfaktor zeigt für beide Gitterzellen bei niedrigen Lochdichten ein ausgeprägtes Maximum bei K , welches die frustrierte magnetische Ordnung mit drei Untergittern anzeigt (Fig. 6.2).

Wird nun der Anteil der Löcher erhöht, so verschwindet für etwa $\delta \lesssim 0.55$ der ausgeprägte Peak des Spinstrukturfaktors auf der Ecke K der Brillouinzone, d.h. die Frustration des magnetischen Systems ist durch die vielen zufällig verteilten Löcher, die eine Relaxation der Spins ermöglichen, weitgehend aufgehoben. Antiferromagnetische Korrelationen, gekennzeichnet durch hohe Werte von $Y(\mathbf{k})$ bei großen $|\mathbf{k}|$, bleiben weiterhin vorherrschend. Es kann aber keine bestimmte Periodizität der magnetischen Korrelationen bestimmt werden, und eine magnetische Ordnung ist daher in den Resultaten

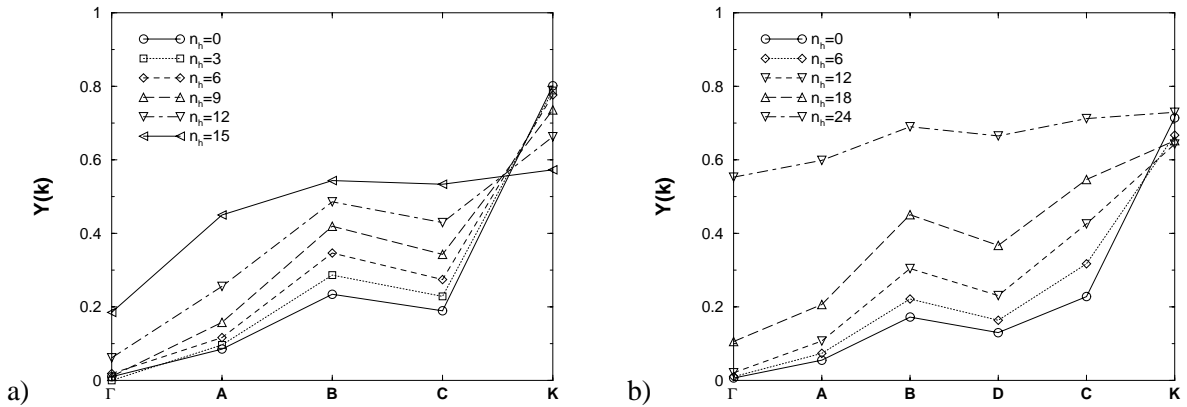


Abbildung 6.2: Die normierten Spinstrukturfaktoren $Y(\mathbf{k})$ für a) $N = 21$ und b) $N = 27$ für verschiedene Lochanzahlen n_h . Die Punkte in der Brillouinzone sind aus Anhang D zu entnehmen. Deutlich ist das Maximum auf der Ecke K der Brillouinzone für kleine n_h erkennbar.

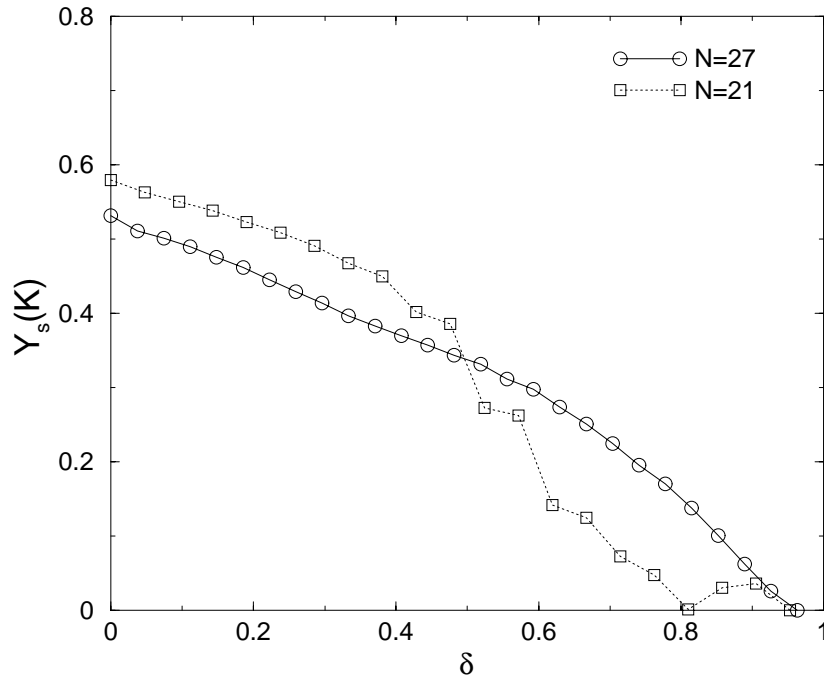


Abbildung 6.3: Höhe des Spinstrukturfaktorpeaks $Y_s(\mathbf{K})$ bei K über dem Hintergrund für $N = 21$ bzw. $N = 27$ in Abhängigkeit von der Lochdichte δ .

nicht mehr sichtbar. Für sehr hohe Lochdichten ($N = 27$ und $n_h = 24$) zeigt der Spinstrukturfaktor über die ganze Brillouinzone nahezu eine Gleichverteilung der Werte, die im Vergleich zu niedrigeren Lochdichten erhöht sind. In diesem Bereich liegt ebenfalls keine magnetische Ordnung mehr vor, da hier neben den antiferromagnetischen Bindungen auch die isolierten Spins einen großen Beitrag zum Spinstrukturfaktor liefern.

In Figur 6.3 ist die Größe $Y_s(\mathbf{K}) = Y(\mathbf{K}) - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} Y(\mathbf{k})$ dargestellt. In $Y_s(\mathbf{K})$ wird vom Wert des Strukturfaktors an der Ecke der Brillouinzone der über die Brillouinzone gemittelte Wert abgezogen. Für $N = 27$ zeigt $Y_s(\mathbf{K})$ einen kontinuierlichen Verlauf, während für $N = 21$ bei höheren Lochdich-

ten δ Effekte der endlichen Größe der Gitterzelle sichtbar sind. Weil beide Kurven insbesondere für niedrige Lochdichten nicht identisch sind, kann geschlossen werden, daß der thermodynamische Limes für diese physikalische Größe noch nicht erreicht wurde. Dieses ist dadurch erklärbar, daß im Gegensatz zur Energie der Spinstrukturfaktor auch von längerreichweitigen Spinkorrelationen beeinflusst ist. Diese Unterschiede treten auch auf dem Quadratgitter für die dort untersuchten größeren Systeme bei mittleren Lochdichten auf. Die Differenz des Spinstrukturpeaks $Y(\mathbf{K})$ zum Spinuntergrund sinkt nahezu linear für niedrige Lochdichten bis etwa zur Perkolationsschwelle $\delta \approx 0.5$ ab [43]. Bei höherer Lochdichte fällt die Differenz zum Untergrund stärker mit steigender Lochdichte, da sich das Gewicht aus $Y(\mathbf{K})$ zunächst auf die Impulsvektoren am Rande der Brillouinzone verteilt. Dieses ist darauf zurückzuführen, daß in diesem Bereich die Spins in der Regel wenige große Spincluster bilden, aber jeder Spin schon viele Löcher als nächste Nachbarn hat. Deshalb liefern bereits die Konfigurationen mit antiparalleler Ausrichtung benachbarter Spins einen großen Beitrag zum Spinstrukturfaktor bei großen $|\mathbf{k}|$. Bei weiter steigender Lochdichte nimmt der Strukturfaktor bei Γ weiter zu, weil dann die isolierten Spins einen größeren Teil beitragen.

Insgesamt ergibt sich, daß bei niedrigen Lochdichten die 120° -Struktur dominant ist, da die Spins um die meist isolierten Löcher nur lokal relaxieren und die Dreiecksgitterstruktur im wesentlichen erhalten bleibt. Mit zunehmender Lochdichte ab etwa $\delta \approx 0.5$ relaxieren die Spins, wo es von der Lochkonfiguration ermöglicht wird, in eine antiparallele Ausrichtung benachbarter Spins, und die magnetische Ordnung des verdünnten Dreiecksgitterantiferromagneten wird zunehmend zerstört. Bei sehr hoher Lochdichte ergibt sich zudem ein wachsender Beitrag von isolierten Spins zum Spinstrukturfaktor bei Γ , und es ist keine magnetische Ordnung vorhanden.

Kapitel 7

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden im Rahmen des t - J -Modells die Dynamik und die Korrelationen von Löchern, die sich in geordneten Spinzuständen bewegen, mit analytischen und mit numerischen Methoden untersucht.

Die analytischen Untersuchungen basieren auf einer Pfadintegraldarstellung der Zustandssumme des t - J -Modells, die in Kapitel 2 der Arbeit hergeleitet wird. Bei der Berechnung physikalisch relevanter Größen wie z. B. des Quasiteilchengewichts wird in den späteren Abschnitten eine semiklassische Entwicklung verwendet. Um eine solche Entwicklung zu ermöglichen, mußte das ursprünglich für Spin-1/2 Teilchen definierte t - J -Modell auf beliebigen Spin S verallgemeinert werden. Zur Herleitung der Pfadintegraldarstellung dieses verallgemeinerten Modells wurden kohärente Lochzustände verwendet, in denen die fermionischen Freiheitsgrade durch Grassmannvariablen und die Spinfreiheitsgrade durch $SU(2)$ -symmetrische Matrizen dargestellt werden. Die Darstellung der Spinfreiheitsgrade durch die $SU(2)$ -Matrizen ist der Schlüssel für die in Kapitel 4 der Arbeit vorgestellte Berechnung des Quasiteilchengewichts eines Lochs, denn nur in dieser Darstellung ist eine konsistente Gradientenentwicklung der Lagrangefunktion des verallgemeinerten t - J -Modells möglich. Das Ergebnis dieser Gradientenentwicklung ist eine Verallgemeinerung der $SU(2)$ -Darstellung des nicht-linearen σ -Modells für den reinen Heisenbergantiferromagneten, wobei die Zusatzterme die Dynamik eines Lochs in dem nahezu klassisch geordneten Spinhintergrund beschreiben.

Bei der Ermittlung des Quasiteilchengewichts eines Lochs auf hyperkubischen Gittern wird die Einloch-Greensche Funktion in semiklassischer Näherung, d. h. in einer Entwicklung nach Potenzen von $1/S$, berechnet. Hinsichtlich ihrer Abhängigkeit von der Hüpfamplitude t können die Ergebnisse nicht in geschlossener Form, sondern nur in Form einer Potenzreihenentwicklung angegeben werden. Es zeigt sich, daß sich die Quasiteilcheneigenschaften eines Lochs in einer Dimension einerseits und in höheren Dimensionen andererseits qualitativ unterscheiden. Der Vorteil der in dieser Arbeit zum ersten Mal verwendeten semiklassischen Entwicklung gegenüber anderen Methoden liegt darin, daß sie auf das t - J -Modell der hyperkubischen Gitter in *beliebiger Raumdimension* anwendbar ist.

In *einer Dimension* verschwindet das Quasiteilchengewicht Z_k für große Systemgrößen L . Dies bedeutet, daß ein Loch im eindimensionalen t - J -Modell nicht durch einen Quasiteilchenzustand beschrieben werden kann: der Einlochzustand des eindimensionalen t - J -Modells entwickelt sich *nicht* adiabatisch aus dem Einlochzustand des nichtwechselwirkenden Systems. Vielmehr sind der Einlochzustand des nichtwechselwirkenden Systems und der exakte Eigenzustand eines Lochs im thermodynamischen Limes orthogonal zueinander, man spricht von einer Orthogonalitätskatastrophe [9].

In niedrigster Ordnung der semiklassischen Entwicklung ergibt sich der Exponent $\frac{1}{S}X_1^{SC} = \frac{1}{4\pi S} \left(1 + \frac{4t^2}{J^2} \right)$. Erwartungsgemäß gibt es im klassischen Grenzfall $S \rightarrow \infty$ keine Orthogonalitätskatastrophe; sie ist ein reines Quantenphänomen. Für verschwindende Hüpfamplitude $t = 0$ haben Sorella und Parola [10]

im extremen Quantengrenzfall $S = \frac{1}{2}$ mittels Bosonisierung für den Exponenten ein exaktes Resultat gefunden: $X_0 = \frac{3}{16}$. Das obige Resultat erster Ordnung $\frac{1}{3}X_1^{SC} = \frac{1}{2\pi}$ für $S = \frac{1}{2}$ stimmt damit qualitativ überein. In der zweiten Ordnung der semiklassischen Entwicklung, $O(S^{-2})$, ergeben sich Korrekturen X_2^{SC} zu dem Exponenten, die logarithmisch mit der Systemgröße divergieren. Diese Korrekturen zeigen an, daß die Kopplungskonstanten des t - J -Modells, t und JS^2 , durch renormierte Größen ersetzt werden müssen.

Numerische, auf exakter Diagonalisierung von Systemen mit bis zu 28 Gitterplätzen beruhende Berechnungen des Quasiteilchengewichts bestätigen das algebraische Verschwinden von Z_k qualitativ. Darüberhinaus ergeben diese Rechnungen zwei Bereiche der Hüpfamplitude mit sehr unterschiedlichen Exponenten für den Abfall des Quasiteilchengewichtes $Z_k \sim L^{-2X^{num}}$: der numerische Wert von X^{num} beträgt bei den betrachteten Systemen $2X^{num} \simeq 0.2$ für den ersten Bereich bei $t = 0$ und $2X^{num} \simeq 0.45$ bei $t = 1$ für den zweiten Bereich. Die Krümmung K_0 , die den Abfall von Z_k mit der Hüpfamplitude bei $t = 0$ beschreibt, fällt mit wachsender Systemgröße nahezu linear, so daß für die t -Abhängigkeit von Z_k bei $t = 0$ ein singulärer Punkt nicht ausgeschlossen werden kann. Die semiklassischen Resultate lassen eine derartige t -Abhängigkeit des Quasiteilchengewichtes mit der Systemgröße nicht erkennen. Diese Diskrepanz könnte darauf zurückzuführen sein, daß die numerischen Resultate Spin-1/2 Systeme betreffen, deren Verhalten durch die semiklassische Näherung in niedriger Ordnung quantitativ noch nicht korrekt erfaßt wird.

In *zwei und mehr Dimensionen* ergeben die semiklassischen Rechnungen bis zur Ordnung S^{-2} ein *endliches* Quasiteilchengewicht für den Einlochzustand. Dieses Resultat steht im Einklang mit numerischen Berechnungen des Quasiteilchengewichts in zwei Dimensionen von Leung und Gooding [4], widerspricht aber der Argumentation von Sheng et al. [2], daß der Phase-String-Effekt auch in zwei und mehr Dimensionen zum Verschwinden des Quasiteilchengewichts eines Lochs führen müsse.

Im zweiten Teil der Arbeit, Kapitel 5 und 6, werden die Quasiteilcheneigenschaften eines Lochs und die Korrelationen mehrerer Löcher für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter mit analytischen Methoden und mittels numerisch exakter Diagonalisierung untersucht. Ausgangspunkt für die analytischen Rechnungen ist die in Kapitel 2 mittels kohärenter Lochzustände entwickelte Lagrangefunktion eines Lochs im t - J -Modell. Aus dieser Lagrangefunktion wird in semiklassischer Näherung niedrigster Ordnung ein effektiver Hamiltonoperator H_Δ hergeleitet. In H_Δ ist der Heisenbergterm durch die lineare Spinwellennäherung ersetzt. Im Gegensatz zum Fall des Quadratgitters treten in H_Δ zwei verschiedene Hüpfsterme $H_t^{(0)}$ und $H_t^{(1)}$ auf. $H_t^{(1)}$ beschreibt wie auf dem Quadratgitter das magnon-unterstützte Hüpfen eines Lochs. $H_t^{(0)}$ hat hingegen die Form des magnon-unabhängigen Hüpfsterms des ursprünglichen t - J -Modells. Das Auftreten dieses letzteren Terms beruht auf der nicht-kollinearen Struktur des Spingrundzustandes des Dreiecksgitterantiferromagneten. Er ist deshalb auf dem Quadratgitter nicht vorhanden.

Für den effektiven Hamiltonoperator H_Δ wurde in selbstkonsistenter Bornscher Näherung (SCBA) die Selbstenergie eines Loches numerisch berechnet, und daraus spektrale Dichten, Grundzustandsenergien und die Energiedispersion eines Loches gewonnen. Die spektralen Dichten zeigen für betragsmäßig kleine t/J ausgeprägte Quasiteilchenpeaks bei niedrigen Energien und bei höheren Energien ein breites inkohärentes Spektrum, das von Multimagnonprozessen herrührt. Für größere positive t/J bleiben die ausgeprägten Maxima am Bandminimum im Zentrum Γ der Brillouinzone bestehen, während in den anderen Bereichen der Brillouinzone die Quasiteilchenpeaks mit stark verminderterem Quasiteilchengewicht in den inkohärenten Hintergrund wandern und nicht mehr zu identifizieren sind. Dieses könnte auf ein Nichtfermiflüssigkeitsverhalten in diesem Parameterbereich hindeuten. Für stärker negative t/J bleibt ein Quasiteilchenband unterhalb des inkohärenten Hintergrundes erhalten. Das Bandminimum und das Maximum des Quasiteilchengewichtes liegen beide im Punkt M

auf dem Rand der Brillouinzone. Die Ergebnisse aus der SCBA wurden mit Resultaten aus der Diagonalisierung kleiner Systeme verglichen. Es ergab sich eine gute qualitative Übereinstimmung. Der Vergleich zeigt, daß für kleine Hüpfamplitude die gefundene exakte Energiedispersion zum großen Teil bereits durch den magnon-unabhängigen Hüpfterm $H_t^{(0)}$ des effektiven Hamiltonoperators H_Δ erklärt wird. Die SCBA-Rechnung verbessert die Energiedispersion weiter in Richtung der Resultate aus exakter Diagonalisierung. Die spektralen Dichten, die mittels SCBA gewonnen wurden, reproduzieren die Existenz bzw. Nichtexistenz der Quasiteilchenpeaks aus der exakten Diagonalisierung kleiner Systeme zumindest qualitativ, wenn auch quantitative Abweichungen zu sehen sind. Für positive Hüpfamplitude t beträgt die effektive Masse eines Lochs, die sich aus dem Verlauf der Energiedispersion am Minimum des Bandes ergibt, nur etwa das Doppelte der Bandmasse eines freien Lochs auf dem Dreiecksgitter, während sich für negative Hüpfamplitude t aus der Energiedispersion des Grundzustandsbandes eine wesentlich höhere effektive Masse des Lochs ergibt.

Um den hier zu Tage tretenden Unterschied zwischen den Fällen positiver und negativer Hüpfamplitude zu verstehen, wurde die Einlochwellenfunktion in semiklassischer Näherung und mittels numerisch exakter Diagonalisierung berechnet. Beide Rechnungen haben ergeben, daß bei negativer Hüpfamplitude die 120° -Spinstruktur durch das Loch in seiner Umgebung ferromagnetisch polarisiert wird. Es bildet sich wie auf dem Quadratgitter ein magnetisches Polaron. Dies erklärt die oben erwähnte hohe effektive Masse des Lochs für negative t . Für positive Hüpfamplitude t kommt es nicht zur Ausbildung eines Polarons. Dementsprechend ist der Einfluß des Spinhintergrundes auf die effektive Masse des Lochs vergleichsweise gering.

Für mehrere Löcher wurden die Bindungsenergien, die Lochkorrelationsfunktionen und die elektronische Impulsverteilung untersucht. Das vorrangige Ziel dieser Untersuchungen war es, den Bereich des Parameterverhältnisses t/J abzugrenzen, in dem auf dem Dreiecksgitter Phasenseparation auftritt. Es zeigte sich, daß die relevante Information am einfachsten aus den Lochkorrelationen ablesbar ist: der Bereich, in dem Phasenseparation auftritt, konnte auf $|t| \lesssim 0.15J$ eingegrenzt werden.

Für zufällig verteilte Löcher im Dreiecksgitterantiferromagneten wurde die Grundzustandsenergie und der Spinstrukturfaktor untersucht. Bis zur einer Lochdichte im Bereich $\delta \lesssim 0.55$ ist die magnetische Ordnung der 120° -Struktur durch einen Peak im Strukturfaktor gut nachweisbar. Für größere Lochdichten verschwindet dieser Peak in einem anwachsenden Hintergrund; eine magnetische Ordnung ist daher nicht mehr feststellbar.

Anhang A

Berechnung der Greenschen Funktion

In diesem Anhang wird aus der Pfadintegraldarstellung der Greenschen Funktion (4.8) für ein Loch durch Ausintegration der Intraplakettenvariablen u_j und der Grassmannvariablen η_j die Greensche Funktion für ein Loch bei einem gewählten Spinhintergrund gewonnen (vgl. 4.10). Die Ausintegration der Intraplakettenvariablen geht wie im Abschnitt 3.5 vor sich und man erhält als effektive Lagrangefunktion in der Greenschen Funktion die bereits berechneten L_0 und L_1 . Zur Vereinfachung der Darstellung wird jetzt die räumliche Größe des Systems auf einen Platz beschränkt. In der Trotterformulierung der Greenschen Funktion mit $M = \frac{\beta}{\varepsilon}$ Zeitscheiben ergibt sich das Pfadintegral zu

$$G_{\sigma\sigma}(\tau) = - \frac{\prod_{\tau'} (\int dg(\tau') d\eta_{\tau'}^* d\eta_{\tau'}) (g^{-1}(\tau)g(0))_{\sigma\sigma} \eta(\tau)\eta^*(0) e^{-\int_0^{\beta} d\tau' L}}{\prod_{\tau'} (\int dg(\tau') d\eta_{\tau'}^* d\eta_{\tau'}) e^{-\int_0^{\beta} d\tau' L}} \quad (\text{A.1})$$

mit L von der Form ($\alpha_S = 1 + \frac{1}{2S}$)

$$L(\tau') = L_0(\tau') - \frac{1}{\varepsilon} \left[\eta_{\tau'+1}^* (1 - \varepsilon H_{\tau'}^{1-Loch}) \eta_{\tau'} + \alpha_S \varepsilon \eta_{\tau'}^* \eta_{\tau'} \right]. \quad (\text{A.2})$$

$H_{\tau'}^{1-Loch}$ ist der vom Spinhintergrund abhängige Koeffizient des bilinearen Anteils in den Grassmannvariablen der Hamiltonfunktion zur Zeitscheibe τ' , und L_0 ist die Lagrangefunktion ohne Loch.

Im Zähler wird aus dem Heisenbergzustand ein Loch zur Zeit $\tau' = 0$ erzeugt und später zur Zeit $\tau' = \tau$ vernichtet. Daher muß in der ersten Zeitscheibe der Term η_0^* mit dem Term $\eta_1^* (1 - \varepsilon H_0^{1-Loch}) \eta_0$ gepaart werden. Der Term $\alpha_S \varepsilon \eta_0^* \eta_0$ kann nichts beitragen. Während für $\tau > \tau' > 0$ genau ein Loch vorliegt, werden so sukzessive die Grassmannvariablen mit dem eine Zeitscheibe späteren Term $\eta_{\tau'+1}^* (1 - \varepsilon H_{\tau'}^{1-Loch}) \eta_{\tau'}$ aus (A.2) abintegriert. Zu späteren Zeiten $\beta > \tau' > \tau$ können dagegen die Terme $\eta_{\tau'+1}^* (1 - \varepsilon H_{\tau'}^{1-Loch}) \eta_{\tau'}$ nichts beitragen, und man muß für die Integration die Grassmannvariablen aus dem Term $-\alpha_S \eta_{\tau'}^* \eta_{\tau'}$ verwenden.

Nach der Ausintegration ergibt sich für den Zähler folgendes Ergebnis:

$$\prod_{\tau'} \left(\int dg(\tau') \right) [g^{-1}(\tau)g(0)]_{\uparrow\uparrow} \alpha_S^{M-\tau} (1 - \varepsilon H_{\tau-1}^{1-Loch}) \dots (1 - \varepsilon H_0^{1-Loch}) e^{-\int_0^{\beta} d\tau' L_0}. \quad (\text{A.3})$$

Im zeitlichen Kontinuumsmlimes wird dieses Ergebnis zu $U(\tau)$ (4.12).

Der Nenner der Greenschen Funktion kann nach der Anzahl der Löcher entwickelt werden. Bis zu einem Loch ergibt sich für den Nenner ein Nulllochanteil, der nur Grassmannvariablen aus $-\alpha_S \eta_{\tau'}^* \eta_{\tau'}$ enthält, und einen 1-Lochanteil der komplett aus Grassmannvariablen des zweiten Terms von (A.2)

aufgebaut ist. Insgesamt ergibt sich für den Nenner von (4.8)

$$\prod_{\tau'} \left(\int dg(\tau') \right) \left\{ \alpha_S^M + [1 - \epsilon H_{M-1}^{1-Loch}] \dots [1 - \epsilon H_0^{1-Loch}] \right\} e^{-\int_0^\beta d\tau' L}. \quad (\text{A.4})$$

Der Faktor α_S^M wird in Zähler und Nenner gekürzt. Der zusätzliche Faktor α_S^{-M} wird in $U(\tau) = T \left\{ \exp\left(-\int_0^\tau d\tau' H^{1-Loch}(\tau')\right) \right\} e^{-\frac{\tau}{\epsilon} \ln \alpha_S}$ absorbiert, welches lediglich eine Redefinition des chemischen Potentials für ein Loch bedeutet. Der Nenner wird zu $1 + U(\beta)$, der sich im Limes $\beta \rightarrow \infty$ zu 1 reduziert, da für starke Heisenbergwechselwirkung die Locherzeugung sehr viel Energie kostet.

Für mehrere Plätze werden H und α_S zu Matrizen $H_{j,j'}$ und $\alpha_S \delta_{j,j'}$ im Ortsraum, die Multiplikationen werden zu Matrixmultiplikationen und im Nenner ist die Determinante der entstehenden Matrix im Ortsraum zu nehmen.

Anhang B

Semiklassische Entwicklung der Greenschen Funktion

Aus der Darstellung (4.10) der Greenschen Funktion werden zur Berechnung von c_1 mittels der semiklassischen Entwicklung von $g_j^*(\tau)g_j(0)$ (4.16) und G^{Loch} (4.14) bis zur Ordnung t^2 und $\frac{1}{S}$ die folgenden Erwartungswerte ausgewertet:

$$\begin{aligned}
-2G_{\sigma\sigma jj}(\tau) &= 1 - \frac{1}{2} \langle (\vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau) - \vec{\epsilon}_{j+d_0}(0))^2 \rangle + \frac{t^2 S^2}{d^2} \int_0^\tau d\tau_2 \int_0^{\tau_2-0} d\tau_1 \sum_{l=0}^{2d-1} \cdot \\
&\cdot \left[\sum_{l', l''=0}^{2d-1} \langle (\vec{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}(\tau_1) - \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_1)) (\vec{\epsilon}_{j+d_0-d_{l''}+d_{l''}}(\tau_2) - \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_2)) \rangle \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{J^2 S^2} \langle \partial_\tau \vec{\epsilon}_{j+2d_0-d_l}(\tau_1) \partial_\tau \vec{\epsilon}_{j+2d_0-d_l}(\tau_2) \rangle \right] \\
&= 1 - \frac{d}{N} \sum_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{Jd}{\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2} \left\{ 1 - \cos(\omega\tau) - \left(\frac{tS}{d} \right)^2 \int_0^\tau d\tau_2 \int_0^{\tau_2-0} d\tau_1 e^{i\omega(\tau_1-\tau_2)} \right. \\
&\quad \left. \left(\sum_{l', l''=0}^{2d-1} (1 - e^{i\vec{k}(d_{l'}-d_0)}) (1 - e^{-i\vec{k}(d_{l''}-d_0)}) - \frac{\omega^2}{J^2 S^2} \right) \right\} \\
&= 1 - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{Jd(1 - e^{-\omega_{\vec{k}}\tau})}{2\omega_{\vec{k}}} \left[1 + \frac{4t^2}{J^2 d} \right] + \tau^2 A'_1 = 1 + \frac{c_1(t, J, L, \tau)}{S} + \tau^2 A'_1. \tag{B.1}
\end{aligned}$$

Dabei werden die Erwartungswerte $\langle \dots \rangle$ mit der Wirkung (4.18) gebildet, und die Frequenzsummen werden in Integrale überführt. Der lineare Term $\tau^2 A'_1$ ist der Energiedifferenz der beiden Grundzustände hinzuzufügen.

In der Ordnung $\frac{1}{S^2}$ ergibt sich aus der Spinwellenentwicklung für den Beitrag von $g_j^*(\tau)g_j(0)$ (4.16) der folgende Erwartungswert:

$$B_3 = \frac{1}{24} \left\langle \left\{ (\vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau) - \vec{\epsilon}_{j+d_0}(0))^2 \right\}^2 + 4 \left[\vec{\epsilon}_{j+d_0}^2(0) \vec{\epsilon}_{j+d_0}^2(\tau) - (\vec{\epsilon}_{j+d_0}(0) \cdot \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau))^2 \right] \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{J^2 d^2}{48\pi^2 N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega'^2 + \omega_{\vec{k}'}^2} \\
&\quad \cdot [4(1 - \cos(\omega\tau))(1 - \cos(\omega'\tau)) + 1 - \cos(\omega\tau)) \cos(\omega'\tau)] \\
&= \frac{J^2 d^2}{48N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{(1 - e^{-\omega_{\vec{k}}\tau})}{\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}'}} [5 - 3e^{-\omega_{\vec{k}'}\tau}]. \tag{B.2}
\end{aligned}$$

Der Mischterm von G^{Loch} (4.14) und $g_j^*(\tau)g_j(0)$ (4.16) der Ordnung $O(\varepsilon^4)$ verursacht diesen Beitrag:

$$\begin{aligned}
B_2 &= \frac{t^2}{2J^2 d^2} \left\langle \left[(\vec{\xi}_{j+d_0}(\tau) - \vec{\xi}_{j+d_0}(0))^2 - 2(\vec{\xi}_{j+d_0}(\tau) \times \vec{\xi}_{j+d_0}(0))_z \right] \right. \\
&\quad \cdot \int_0^\tau d\tau_2 \int_0^{\tau_2-0} d\tau_1 \sum_{l=0}^{2d-1} \left\{ \partial_{\tau_1} \vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_1) \partial_{\tau_2} \vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_2) \right. \\
&\quad \left. \left. - J^2 S^2 \sum_{l', l''=0}^{2d-1} (\vec{\xi}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}(\tau_1) - \vec{\xi}_{j+d_0}(\tau_1)) (\vec{\xi}_{j+d_0-d_l+d_{l''}}(\tau_2) - \vec{\xi}_{j+d_0}(\tau_2)) \right\} \right\rangle \\
&= \frac{t^2 d}{N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{1}{2\omega_{\vec{k}} 2\omega_{\vec{k}'}} \left\{ (1 - e^{-\omega_{\vec{k}}\tau})(4 - 4e^{-\omega_{\vec{k}'}\tau} - 2\tau\omega_{\vec{k}'} + \gamma_{\vec{k}+\vec{k}'}^2 (1 - 3e^{-\omega_{\vec{k}'}\tau})) \right. \\
&\quad + 2 \frac{2dJS(1 - e^{-(\omega_{\vec{k}} + \omega_{\vec{k}'})\tau})}{\omega_{\vec{k}'}(\omega_{\vec{k}} + \omega_{\vec{k}'})} \left[\omega_{\vec{k}}(\gamma_{\vec{k}}^2 - \gamma_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}'}\gamma_{\vec{k}+\vec{k}'}) - \omega_{\vec{k}'}(\gamma_{\vec{k}'}^2 - \gamma_{\vec{k}'}\gamma_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}+\vec{k}'}) \right] \\
&\quad + 2 \frac{(e^{-\omega_{\vec{k}}\tau} - e^{-\omega_{\vec{k}'}\tau})}{\omega_{\vec{k}}(\omega_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}'})} \left[(2dJS)^2 (1 + \gamma_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}'}\gamma_{\vec{k}+\vec{k}'} - \gamma_{\vec{k}}^2 - \gamma_{\vec{k}'}^2) + \omega_{\vec{k}}\omega_{\vec{k}'}\gamma_{\vec{k}+\vec{k}'}^2 \right. \\
&\quad \left. + 2dJS\omega_{\vec{k}}(\gamma_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}'}\gamma_{\vec{k}+\vec{k}'} - \gamma_{\vec{k}}^2) + 2dJS\omega_{\vec{k}'}(\gamma_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}'}\gamma_{\vec{k}+\vec{k}'} - \gamma_{\vec{k}'}^2) \right] \\
&\quad \left. + 2 \frac{1 - e^{-\omega_{\vec{k}}\tau}}{\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}'}} \left[2dJS \left(\omega_{\vec{k}}(\gamma_{\vec{k}}^2 - \gamma_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}'}\gamma_{\vec{k}+\vec{k}'}) (1 + e^{-\omega_{\vec{k}'}\tau}) - \omega_{\vec{k}'}(\gamma_{\vec{k}'}^2 - \gamma_{\vec{k}'}\gamma_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}+\vec{k}'}) (1 - e^{-\omega_{\vec{k}}\tau}) \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (2dJS)^2 (1 + \gamma_{\vec{k}}\gamma_{\vec{k}'}\gamma_{\vec{k}+\vec{k}'} - \gamma_{\vec{k}}^2 - \gamma_{\vec{k}'}^2) (1 + e^{-\omega_{\vec{k}'}\tau}) \right] \right\} = B'_2 + \tau A'_4. \tag{B.3}
\end{aligned}$$

Der nächste Term beinhaltet die Anharmonizitäten des Hüpftermes G^{Loch} (4.14)

$$\begin{aligned}
B_1 &= \frac{t^2}{6J^2 d^2} \int_0^\tau d\tau_2 \int_0^{\tau_2-0} d\tau_1 \left\{ 4 \sum_{l=0}^{2d-1} \langle \partial_{\tau_1} \vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_1) \partial_{\tau_2} \vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_2) (\vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}^2(\tau_1) + \vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}^2(\tau_2)) \rangle \right. \\
&\quad - 4 \sum_{l=0}^{2d-1} \langle [\vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_2) \cdot \partial_{\tau} \vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_1)] [\vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_2) \cdot \partial_{\tau} \vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_2)] \\
&\quad \left. + [\vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_1) \cdot \partial_{\tau} \vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_1)] [\vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_1) \cdot \partial_{\tau} \vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}(\tau_2)] \right\rangle \\
&\quad - \sum_{l, l', l''=0}^{2d-1} \left\langle ((\vec{\xi}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}(\tau_1) - \vec{\xi}_{j+d_0}(\tau_1)) \cdot [\vec{\xi}_{j+d_0-d_l+d_{l''}}(3\vec{\xi}_{j+2d_0-d_l}^2(\tau_2) + \vec{\xi}_{j+d_0-d_l+d_{l''}}^2(\tau_2)) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\bar{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_2)(3\bar{\epsilon}_{j+2d_0-d_l}^2(\tau_2) + \bar{\epsilon}_{j+d_0}^2(\tau_2)) - 3\bar{\epsilon}_{j+2d_0-d_l}(\tau_2)(\bar{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}^2(\tau_2) - \bar{\epsilon}_{j+d_0}^2(\tau_2)) \\
 & + (\bar{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}(\tau_2) - \bar{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_2)) \left[\bar{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}(\tau_1)(3\bar{\epsilon}_{j+2d_0-d_l}^2(\tau_1) + \bar{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}^2(\tau_1)) \right. \\
 & \left. - \bar{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_1)(3\bar{\epsilon}_{j+2d_0-d_l}^2(\tau_1) + \bar{\epsilon}_{j+d_0}^2(\tau_1)) - 3\bar{\epsilon}_{j+2d_0-d_l}(\tau_1)(\bar{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}^2(\tau_1) - \bar{\epsilon}_{j+d_0}^2(\tau_1)) \right] \Bigg\rangle \\
 = & \frac{t^2 d}{6\pi^2 N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^{\tau} d\tau_2 \int_0^{\tau_2-0} d\tau_1 \frac{\cos(\omega(\tau_2 - \tau_1))}{\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega'^2 + \omega_{\vec{k}'}^2} \cdot \\
 & \cdot \left[2\omega^2 - 5\omega_{\vec{k}}^2 - 3\omega_{\vec{k}'}^2 + 3\omega_{\vec{k}+\vec{k}'}^2 \right] \\
 = & \frac{t^2 d}{6N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{1 - e^{-\omega_{\vec{k}}\tau}}{\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}'}} \left(7 + 3 \frac{\omega_{\vec{k}'}^2 - \omega_{\vec{k}+\vec{k}'}^2}{\omega_{\vec{k}}^2} \right) + \tau t^2 A'_3 = B'_1 + \tau t^2 A'_3 \tag{B.4}
 \end{aligned}$$

Zusätzlich werden noch die Terme untersucht, die aus Kombinationen des Maßfaktors (4.15) und der Anharmonizitäten von L_0 jeweils mit den Termen aus $G^{Loch}(\tau)$ und $g_j^*(\tau)g_j(0)$ entstehen. Dabei sind nur die Terme, deren Kontraktionen die Grenzen zwischen den ursprünglichen Termen überschreiten, relevant, da die restlichen Terme (Vakuumbigramme) faktorisieren und sich daher aus Zähler und Nenner der Greenschen Funktion (4.10) kürzen.

Weil der Maßfaktor und die Anharmonizitäten von L_0^4 eine Integration von 0 bis β enthalten, reduziert sich dadurch die Ordnung in $\frac{1}{\beta}$ um 1, und es sind Beiträge bis zur sechsten Ordnung in ϵ für die Ordnung $O(S^{-2})$ zu betrachten. Für die Terme niedrigster Ordnung der Anharmonizitäten ergibt sich folgendes:

$$\begin{aligned}
 C_0 & = \frac{1}{2} \left\langle (\bar{\epsilon}(\tau) - \bar{\epsilon}(0))^2 \int_0^{\beta} d\tau' L_0^4 \right\rangle \\
 & = -\frac{J^2 d^2}{6\pi^2 N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega d\omega' \frac{1 - \cos(\omega\tau)}{(\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2)^2 (\omega'^2 + \omega_{\vec{k}'}^2)} \cdot \\
 & \quad \cdot \left[4(\omega_{\vec{k}}^2 + \omega_{\vec{k}'}^2) - 3\omega_{\vec{k}+\vec{k}'}^2 + \omega^2 - \omega_{\vec{k}'}^2 + (\omega'^2 + \omega_{\vec{k}'}^2) \right] \\
 & = -\frac{(Jd)^2}{12N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{\left[(1 - e^{-\omega_{\vec{k}}\tau}(1 + \omega_{\vec{k}}\tau)) \left\{ 5\omega_{\vec{k}}^2 + 3(\omega_{\vec{k}'}^2 - \omega_{\vec{k}+\vec{k}'}^2) \right\} + 2\omega_{\vec{k}}^3 \tau e^{-\omega_{\vec{k}}\tau} \right]}{\omega_{\vec{k}}^3 \omega_{\vec{k}'}} \tag{B.5}
 \end{aligned}$$

$$-\frac{(Jd)^2}{6\beta N^2} \sum_{\vec{k}} \frac{1 - (1 + \omega_{\vec{k}}\tau)e^{-\omega_{\vec{k}}\tau}}{\omega_{\vec{k}}^3} \sum_{\vec{k}', \omega'} 1. \tag{B.6}$$

Der Term (B.6) wird vom analogen Term mit dem Maßfaktor kompensiert (M ist die Anzahl der Zeitscheiben bzw. Frequenzen):

$$\begin{aligned}
 C_1 & = \frac{1}{2} \left\langle (\bar{\epsilon}_{j+d_0}(\tau) - \bar{\epsilon}_{j+d_0}(0))^2 \frac{2M}{3\beta} \sum_j \int_0^{\beta} d\tau' \bar{\epsilon}_{j+d_0}^2(\tau') \right\rangle \\
 & = \frac{(Jd)^2}{6\beta N^2} \sum_{\vec{k}} \frac{1 - (1 + \omega_{\vec{k}}\tau)e^{-\omega_{\vec{k}}\tau}}{\omega_{\vec{k}}^3} \sum_{\vec{k}', \omega'} 1. \tag{B.7}
 \end{aligned}$$

Für die Kombination der Anharmonizitäten L_0^4 und des Hüpftermes ergeben sich in Ordnung $\frac{1}{S^2}$ die folgenden Korrekturen (ohne Vakuumdiagramme):

$$\begin{aligned}
D_0 &= \frac{t^2 S^2}{d^2} \int_0^\tau d\tau_2 \int_0^{\tau_2-0} d\tau_1 \sum_{l=0}^{2d-1} \left\langle \left[-\frac{1}{J^2 S^2} \partial_{\tau_1} \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_1) \partial_{\tau_2} \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_2) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \sum_{l', l''=0}^{2d-1} (\vec{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}(\tau_1) - \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_1)) (\vec{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l''}}(\tau_2) - \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_2)) \right] \cdot \left(-\int_0^\beta d\tau' L_0^4 \right) \right\rangle \\
&= -\frac{t^2 d}{N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \left\{ \frac{1 - e^{-\omega_{\vec{k}} \tau}}{\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}'}} \left[\frac{8}{3} + 2 \frac{\omega_{\vec{k}'}^2 - \omega_{\vec{k}+\vec{k}'}^2}{\omega_{\vec{k}}^2} \right] - \frac{\tau}{3\omega_{\vec{k}'}} - \frac{\tau(1 + e^{-\omega_{\vec{k}} \tau})}{\omega_{\vec{k}'}} \left(1 + \frac{\omega_{\vec{k}'}^2 - \omega_{\vec{k}+\vec{k}'}^2}{\omega_{\vec{k}}^2} \right) \right\} \\
&\quad - \frac{2t^2 d}{3\beta N^2} \sum_{\vec{k}} \frac{2 - \omega_{\vec{k}} \tau - (2 + \omega_{\vec{k}} \tau) e^{-\omega_{\vec{k}} \tau}}{\omega_{\vec{k}}^3} \sum_{\vec{k}', \omega'} 1. \tag{B.8} \\
&= D'_0 + \tau A_2''
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_1 &= -\left\langle \frac{2M}{3\beta} \sum_j \int_0^\beta d\tau' \vec{\epsilon}_{j+d_0}^2(\tau') \frac{t^2 S^2}{d^2} \int_0^\tau d\tau_2 \int_0^{\tau_2-0} d\tau_1 \sum_{l=0}^{2d-1} \left[-\frac{1}{J^2 S^2} \partial_{\tau_1} \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_1) \partial_{\tau_2} \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_2) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \sum_{l', l''=0}^{2d-1} (\vec{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l'}}(\tau_1) - \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_1)) (\vec{\epsilon}_{j+d_0-d_l+d_{l''}}(\tau_2) - \vec{\epsilon}_{j+d_0}(\tau_2)) \right] \right\rangle \\
&= \frac{2t^2 d}{3\beta N^2} \sum_{\vec{k}} \frac{2 - \omega_{\vec{k}} \tau - (2 + \omega_{\vec{k}} \tau) e^{-\omega_{\vec{k}} \tau}}{\omega_{\vec{k}}^3} \sum_{\vec{k}', \omega'} 1. \tag{B.9}
\end{aligned}$$

$$= D'_1 + \tau t^2 A_2''' \tag{B.10}$$

Dabei werden wiederum die Divergenzen im letzten Term von (B.8) durch die Kombination des Hüpftermes und des Maßtermes (B.9) kompensiert. $\tau t^2 A_2''$ und $\tau t^2 A_2'''$ enthalten die in τ linearen Anteile von D_0 bzw. D_1 , die der Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand des Heisenbergmodells und dem Einlochgrundzustand des t - J -Modells hinzufügen sind und daher nicht verwendet werden. Der Koeffizient $c_2(t, J, L, \tau)$ ergibt sich insgesamt zu

$$c_2 = B'_1 + B'_2 + B_3 + C_0 + C_1 + D'_0 + D'_1. \tag{B.11}$$

Anhang C

Exakte Diagonalisierung mittels Lanczos-Methoden

Um das Eigenwertspektrum eines hermiteschen Operators, z.B. eines Hamiltonoperators H in einem Zustandsraum mit endlicher Dimension N , zu bestimmen, ist es notwendig, die zugrundeliegende Matrixdarstellung des Operators zu diagonalisieren.

C.1 Bestimmung von Energieeigenwerten

Um das komplette Energiespektrum des t - J -Modells zu bestimmen, reichen für Systeme moderater Größe derzeit die Speicherkapazitäten und verfügbaren Rechenzeiten nicht aus. Für die Berechnung der Eigenschaften größerer Systeme kann man sich auf die Zustände mit niedriger Energie beschränken. Eine Methode dafür ist der Lanczos-Algorithmus, der ausführlich in [45] dargestellt wird. Das Energiespektrum der ursprünglichen Matrixdarstellung wird durch eine Tridiagonalmatrix T_M der Größe $M \times M$ genähert. Die Näherung ist für die betragsmäßig größten Energieeigenwerte besonders gut. Das Verfahren ist in der Lage, numerische Ungenauigkeiten auszugleichen. T_M nähert die betragsmäßig größten Energieeigenwerte der ursprünglichen Hamiltonmatrix besonders schnell an. Es ist aber nicht möglich Multiplizitäten der Energieeigenwerte ohne Verwendung von weiteren Informationen zu erschließen.

Beim Lanczosverfahren wird eine Sequenz von M (komplexwertigen) Vektoren der Dimension N erzeugt, die die Basis der Tridiagonalmatrix bilden. Für reelle symmetrische Matrizen können die Vektoren dieser Sequenz reell gewählt werden. Der Startvektor der Sequenz $|v_1\rangle$ ist ein zufällig gewählter Vektor. Im ersten Schritt wird aus $|v_1\rangle$ der nächste Vektor $|v_2\rangle$ durch die Gleichungen $\alpha_1 = \langle v_1|H|v_1\rangle$ und $\beta_2|v_2\rangle = H|v_1\rangle - \alpha_1|v_1\rangle$ erzeugt. Aus diesen beiden Vektoren werden mittels der Rekursionsgleichungen

$$\begin{aligned}\alpha_i &= \langle v_i|H|v_i\rangle \\ \beta_{i+1}|v_{i+1}\rangle &= H|v_i\rangle - \alpha_i|v_i\rangle - \beta_i|v_{i-1}\rangle \\ \beta_{i+1} &= \langle v_{i+1}|H|v_i\rangle\end{aligned}\tag{C.1}$$

die restlichen der M Vektoren $\{|v_i\rangle\}_{i=1,\dots,M}$ erzeugt. Die α_i und β_i bestimmen die Matrixelemente der

Tridiagonalmatrix T_M und in der Basis der $|v_i\rangle$ besitzt T_M die folgende Gestalt:

$$T_M = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_M \\ & & & \beta_M & \alpha_M \end{pmatrix}. \quad (\text{C.2})$$

Die Matrix T_M kann nun mit Standardmethoden effizient diagonalisiert werden. Da die Größe der untersuchbaren Systeme im wesentlichen durch die Speicheranforderungen beschränkt ist, wurde bei der Implementierung des Algorithmus auf geringen Speicherbedarf geachtet. Durch eine geeignete Reihenfolge der Rechenschritte kommt die Rekursionsgleichung zur Bestimmung der Energieeigenwerte mit maximal zwei komplexen Vektoren $|c_0\rangle$ und $|c_1\rangle$ der Länge N aus. Die Initialisierung erfolgt mit $|c_1\rangle = 0$ und $|c_0\rangle = |v_1\rangle$. Der Rekursionsschritt i (siehe (C.1) mit den beiden Vektoren $|c_0\rangle$ und $|c_1\rangle$) stellt sich so dar

$$|c_1\rangle = |c_1\rangle + H|c_0\rangle \quad (\text{C.3})$$

$$\alpha_i = \langle c_1|c_0\rangle \quad (\text{C.4})$$

$$|c_1\rangle = |c_1\rangle - \alpha_i|c_0\rangle \quad (\text{C.5})$$

$$\beta_{i+1} = \sqrt{\langle c_1|c_1\rangle} \quad (\text{C.6})$$

$$|c_1\rangle = \frac{1}{\beta_{i+1}}|c_1\rangle \quad (\text{C.7})$$

$$|c_0\rangle = \frac{1}{\beta_{i+1}}|c_0\rangle \quad (\text{C.8})$$

$$|c_0\rangle \leftrightarrow |c_1\rangle \quad (\text{C.9})$$

Als Kriterium für die Approximation wird die Differenz des energetisch niedrigsten Eigenwertes von T_{M-1} und T_M benutzt. In der Regel werden für die alleinige Bestimmung der Energieeigenwerte der betrachteten Systeme ca. 150 Iterationen durchgeführt.

C.2 Eigenvektoren

Für den Grundzustandenergieeigenwert lässt sich auch der zugehörige Eigenvektor $|e_0\rangle$ ermitteln. Bei der Diagonalisierung von T_M wird dafür zusätzlich der normierte Eigenvektor (z_1, \dots, z_M) zum zugehörigen Energieeigenwert berechnet. Diese Darstellung des Eigenvektors ist in der Basis der Lanczos-Vektoren gegeben. Um den Eigenvektor in der ursprünglichen Basis der Hamiltonmatrix zu erhalten, werden die Lanczos-Vektoren für T_m in einem weiteren Durchlauf des Lanczos-Algorithmusses noch einmal erzeugt und der Eigenvektor gemäß $|e_0\rangle = \sum_{i=1}^M z_i|v_i\rangle$ berechnet. Für die genaue Berechnung des Grundzustandseigenvektors sind bei großen Systemen in der Regel $M \approx 300$ Lanczositerationen notwendig.

C.3 Spektrale Dichte

Aus den Koeffizienten α_i und β_i der Tridiagonalmatrix T_M kann die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ des Elektronenvernichters $c_{\vec{k}\sigma}$ mit Impuls \vec{k} und Spin σ und Frequenz ω bei Temperatur $T = 0$ definiert

durch

$$A(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{N_N} \sum_n \delta(\omega - E_n(\vec{k})) \frac{|\langle n | c_{\vec{k}\sigma} | 0 \rangle|^2}{\omega - E_n(\vec{k})} \quad (\text{C.10})$$

naherungsweise berechnet werden. Die Zustande $|n\rangle$ sind die Energieeigenzustande des Hamiltonoperators mit Energie $E_n(\vec{k})$ und einem Loch, die sich vom Grundzustand $|0\rangle$ um den Impuls \vec{k} unterscheiden. Die Konstante N_N ist ein Normierungsfaktor. Die δ -Funktion wird durch eine Lorentzkurve mit der kleinen Halbwertsbreite η genahert. Insgesamt ergibt sich fur die Hamiltonoperator H

$$A(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \langle 0 | c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \frac{1}{\omega - H + i\eta} c_{\vec{k}\sigma} | 0 \rangle. \quad (\text{C.11})$$

Im Lanczos-Algorithmus ist als Startvektor $|c_0\rangle$ der Grundzustand $|0\rangle$ des betrachteten Systems ohne Loch zu nehmen, in dem ein Loch mittels $c_{\vec{k}\sigma}$ erzeugt wurde. Dann kann die Greensche Funktion nach dem Hamiltonoperator formal entwickelt werden:

$$G(\vec{k}, \omega) = \langle 0 | c_{\vec{k}\sigma}^\dagger (\omega - H)^{-1} c_{\vec{k}\sigma} | 0 \rangle = \frac{1}{\omega} \left(1 + \sum_{s=1}^{\infty} \langle 0 | c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \left(\frac{H}{\omega} \right)^s c_{\vec{k}\sigma} | 0 \rangle \right), \quad (\text{C.12})$$

und es ergibt sich nach Aufsummation aller Ordnungen der Kettenbruch [46, 47] mit den Koeffizienten α_i und β_i aus dem Lanczos-Algorithmus

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \alpha_1 - \frac{\beta_2^2}{\omega - \alpha_2 - \frac{\beta_3^2}{\omega - \alpha_3 - \dots}}}. \quad (\text{C.13})$$

C.4 Hashing der S_z -Basis

Die Diagonalisierung der Hamiltonmatrix wird aufgrund der Erhaltung der S_z -Komponente des Gesamtspins in einem Unterraum zu festem S_z durchgefuhrt. Ein Zustand mit n_s Spins der Lange $S = \frac{1}{2}$ wird durch eine Bitfolge beginnend bei Bit 0 der Lange n_s eindeutig kodiert, die einen naturliche Zahl reprasentiert. Hat der Spinzustand des j -ten Spins in der S_z -Darstellung die Spinrichtung aufwarts bzw. abwarts, so erscheint an der Position $j - 1$ eine 1 bzw. eine 0. Der S_z -Unterraum legt dann die Anzahl der Nullen in der Bitfolge fest. Die Position des Basiszustandes im Lanczosvektor wird durch den Platz in der nach steigendem Integerwert sortierten Folge der Basiszustande festgelegt.

Um die Position im Lanczosvektor eines S_z -Basiszustandes auf effiziente Weise zu bestimmen, wird ein Verfahren aus [48] verwendet, welches auf zwei Hash-Tabellen beruht. In Tabelle C.1 ist dieses fur ein einfaches System mit vier Spins dargestellt. Die Bitfolge wird durch Division in einen oberen Teil mit n_1 Bits und einen unteren mit $n_s - n_1$ Bits aufgeteilt und jeder Teil wiederum als nichtnegativer Integerwert interpretiert. Die oberen Teilfolgen werden der einen und die unteren der anderen Hash-Tabelle zugeordnet. Der Integerwert jeder Teilfolge bestimmt die Position des zugehorigen Eintrages in der jeweiligen Hash-Tabelle. Der Wert dieses Eintrages ist die Position im Lanczosvektor, bei der zum ersten Mal die Bitfolge des oberen Teiles angenommen wird. Ab dieser Position sind im Lanczosvektor alle S_z -Basiszustande, die die gleiche obere Bitfolge aufweisen, sortiert nach dem steigenden Integerwert der unteren Bitfolge hintereinander abgelegt. Die Hash-Tabelle fur die unteren Teilbitfolgen erhalt dann die Position mit 0 beginnend in dieser Teilfolge. Da die Anzahl der Nullen im unteren Teil durch die Anzahl der Nullen im oberen Teil eindeutig festgelegt ist, verfugen obere Teilbitfolgen mit gleicher Anzahl Nullen uber gleich sortierte untere Teilbitfolgen. Die Position im Lanczosvektor wird dann uber die Summe der Eintrage der beiden Hashtabellen gewonnen. Dieses Verfahren gestattet es, den Speicherbedarf fur das Hashing der Basiszustande zu reduzieren.

Position	Spinzustand		untere Hashtabelle		obere Hashtabelle	
	oben	unten				
0	0	0	1	1	0	0
1	0	1	0	1	0	1
2	0	1	1	0	1	1
3	1	0	0	1	0	3
4	1	0	1	0	1	3
5	1	1	0	0	0	5

Tabelle C.1: Werte für die Spinzustände mit 4 Spins und $S_z = 0$, die in zwei Teilbitfolgen der Länge 2 aufgespalten werden, und die zugehörigen Hashtabellen. Die Position eines Spinzustandes ergibt sich als Summe der Werte beider Hashtabellen.

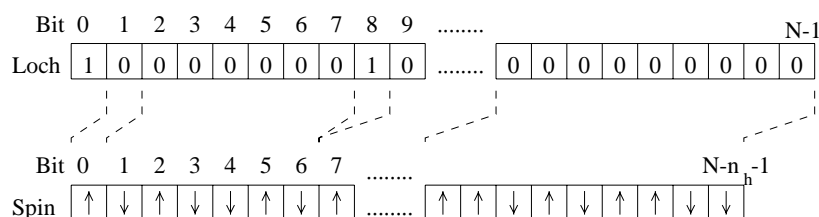


Abbildung C.1: Zerlegung eines Basiszustandes mit n_h Löchern in den Lochanteil und den Spinanteil. Im Lochzustand symbolisiert eine 0 ein Elektron und eine 1 ein Loch an dem Platz. Im Spinzustand sind die Löcher entfernt und durch 0 oder 1 wird die Spineinstellung \downarrow (\uparrow) des vorhandenen Elektrons an diesem Platz vermerkt.

C.5 Hamiltonmatrixdarstellung für mehrere Löcher

Im Vergleich zum Einlochfall gibt es für mehrere Löcher in der translationsinvarianten S_z -Basis nicht nur einen Zustand mit dem Loch an Platz 0, sondern eine Menge von Lochzuständen mit unterschiedlicher Anordnung der Löcher in der Gitterzelle. Aufgrund der Ähnlichkeit von Elektronen mit Spin aufwärts oder abwärts werden die Lochzustände getrennt von den Spinzuständen behandelt (siehe dazu Abbildung C.1). Ein Basiszustand $|\{h\}, \{\sigma\}\rangle$ zu einer bestimmten Lochanzahl n_h sei durch eine bestimmte Lochkonfiguration $\{h\}$ und eine Spinverteilung $\{\sigma\}$ auf den nach der Platznummer geordneten Plätzen I , die mit Elektronen besetzt sind, charakterisiert:

$$|\{h\}, \{\sigma\}\rangle = \prod_{l \in I} c_{l\sigma_l}^\dagger |0\rangle. \quad (\text{C.14})$$

Die Nummer des Platzes in der Gitterzelle legt die Reihenfolge im Produkt der Elektronenerzeuger fest. Die translationsinvarianten Basiszustände zum Impuls \mathbf{k} werden dann durch

$$|\mathbf{k}, \{h\}, \{\sigma\}\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} T_g^j |\{h\}, \{\sigma\}\rangle \quad (\text{C.15})$$

definiert. Der Translationsoperator T_g^j bewirkt eine Verschiebung der Plätze im Ortsraum und wirkt sich sowohl auf den Lochzustand als auch auf den Spinzustand aus. Abhängig von der Größe N des Systemes und der Anordnung der Löcher ergeben sich bei der Ausführung der Translation T_g^j aufgrund der fermionischen Eigenschaften der Elektronen zusätzliche Vorzeichen. Aufgrund der Translationsinvarianz reicht es, z. B. bei $N = 21$ elf und bei $N = 27$ dreizehn unterschiedliche Lochzustände mit zwei Löchern zu betrachten.

n_h	S_z	$N = 21$		$N = 27$	
		$\dim H_{t,J}$	Spinzustände	$\dim H_{t,J}$	Spinzustände
0	$\frac{1}{2}$	352.716	352.716	20.058.300	20.058.300
1	0	184.756	184.756	10.400.600	10.400.600
2	$\frac{1}{2}$	1.016.158	92.738	67.603.900	5.200.300
3	0	3.111.680	48.620		2.704.156
4	$\frac{1}{2}$	6.928.350	24.310		1.352.078

Tabelle C.2: In dieser Tabelle sind für $N = 21$ bzw. 27 und verschiedene Lochanzahlen n_h bei gegebener S_z -Komponente des Gesamtspins die Dimension der Zustandsräume $\dim H_{t,J}$ und die Anzahl der Spinzustände pro Lochkonfiguration angegeben. Die Zustandsräume ohne Loch enthalten Zustände zu allen Wellenvektoren \mathbf{k} .

Für eine solche Basis wird nun kurz die Vorgehensweise für die Berechnung der Matrixelemente des t - J Modelles beschrieben. Jeder Summand des Heisenbergtermes ändert nur den Spinzustand durch paarweises Umklappen von antiparallel ausgerichteten Spins. Der Lochzustand bleibt invariant.

Die Matrixmultiplikation des Hüpftermes ist dagegen mit größerem Aufwand verbunden. Zuerst wird aus der gegebenen Lochkonfiguration ein Lochzustand berechnet, bei dem eines der Löcher den Hüpfprozess vollzogen hat. Aus einer zuvor angelegten Tabelle wird dann ermittelt, welchem Lochzustand in der translationsinvarianten Basis und welchem Translationsvektor $\Delta\delta_l$ dieser Lochzustand entspricht. Diese Translation bestimmt einen Phasenfaktor $e^{-ik\Delta\delta_l}$ für das Hamiltonmatrixelement des Hüpftermes. Zusätzlich werden durch das Hüpfen und die Translation abhängig von der Lochkonfiguration zusätzliche Vorzeichen erzeugt. Der neue Spinzustand der Ziellochkonfiguration wird zunächst durch Verschieben des Elektrons auf den bisherigen Lochplatz ermittelt. Danach wird dieser Spinzustand gemäß der ermittelten Translation $\Delta\delta_l$ verschoben.

C.5.1 Parallelisierung der Matrixmultiplikation

Die Dimension der zu diagonalisierenden Matrix für verschiedene Lochanzahlen in dem Unterraum mit geringstem Betrag der S_z -Gesamtspinkomponente ist in Tabelle C.2 angegeben. Die Matrizen haben nur wenige nichtverschwindende Einträge mit die einer geringen Zahl von unterschiedlichen Werten. Da aus Rechenzeitgründen die Matrix nicht für jede Matrixmultiplikation neu berechnet werden kann, ist der Speicherbedarf insgesamt so hoch, daß das Programm nur auf einem Parallelrechner in vertretbarer Zeit ausführbar ist und daher parallelisiert werden muß. Diese Parallelisierung wurde auf eine Cray T3e mit 128 MB Hauptspeicher pro Prozessor optimiert.

Für $N = 21$ ist es möglich eine Lochkonfiguration mit allen Spinzuständen komplett auf einem Prozessor zu halten. Die Matrixmultiplikation für den Heisenbergterm kann dann lokal ohne Kommunikation zwischen den Prozessoren durchgeführt werden. Für den Hüpfterm wird der benötigte andere Lochzustand des Eigenvektors $|c_0\rangle$ einschließlich aller zugehörigen Spinzustände in einem Block vom anderen Prozessor angefordert, da jeder Spinzustand dieser Lochkonfiguration bei der Matrixmultiplikation genau einmal verwendet wird.

Bei $N = 27$ ist der Speicherbedarf so groß, daß ein Lochzustand auf 38 Prozessoren verteilt wird. Insgesamt werden 494 Prozessoren für die 13 unabhängigen Lochkonfigurationen verwendet. Für die Multiplikation des Heisenberganteils der Hamiltonmatrix wird der verteilte Lanczosvektor $|c_0\rangle$ einer Lochkonfiguration von dem Prozessor der Lochkonfiguration blockweise abgerufen und die Matrixmultiplikation mit den enthaltenen Zuständen durchgeführt. Dieses ist vorteilhaft, da jeder Basiszustand bei Anwendung des Heisenbergtermes etwa 40 andere Spinzustände der gleichen Lochkonfiguration durch Spinflips erzeugt und daher jeder Zustand im Durchschnitt einmal auf jedem Prozessor

benötigt wird. Gegenüber einer Implementierung mit Anforderung jedes einzelnen Zustandes des Lanczosvektors bei Auftreten in der Matrixmultiplikation halbiert sich etwa die Ausführungszeit des Programmes. Aus jedem Basiszustand erzeugt der Hüpfterm bis zu zwölf weitere Basiszustände, die in der Regel auf allen anderen Prozessoren vorliegen. Hier wird, wenn der Zustand aus $|c_0\rangle$ benötigt wird, über eine Kommunikationsroutine dieser Wert einzeln von anderen Prozessoren angefordert.

Anhang D

Gitterzellen und Brillouinzone für das Dreiecksgitter

In diesem Anhang sind die Gitterzellen und Brillouinzone für das t - J -Modell auf dem Dreiecksgitter mit periodischen Randbedingungen angegeben. Die Plätze der Gitterzellen sind von 0 bis $N - 1$ durchnummeriert. Die Vektoren \mathbf{L}_1 und \mathbf{L}_2 sind die Periodizitätsvektoren mit denen das unendlich ausgedehnte Dreiecksgitter parkettiert wird. In der Brillouinzone werden die bezüglich der Energie äquivalenten Punkte durch gleiche Symbole markiert.

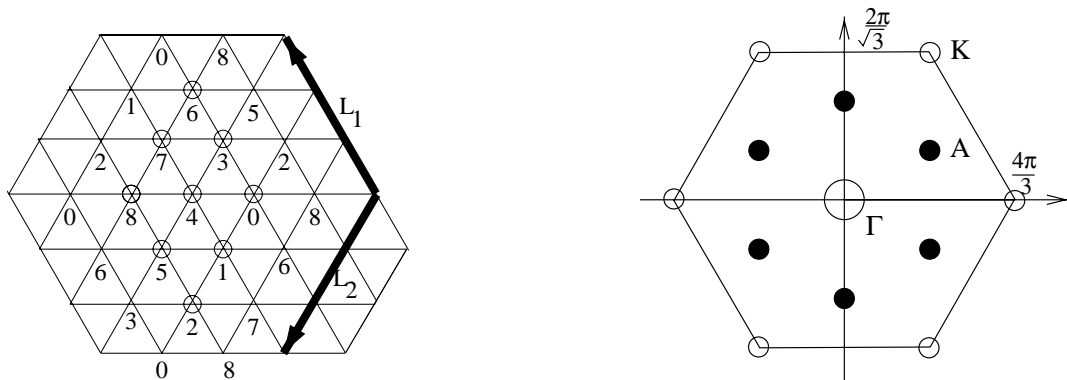


Abbildung D.1: Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 9$

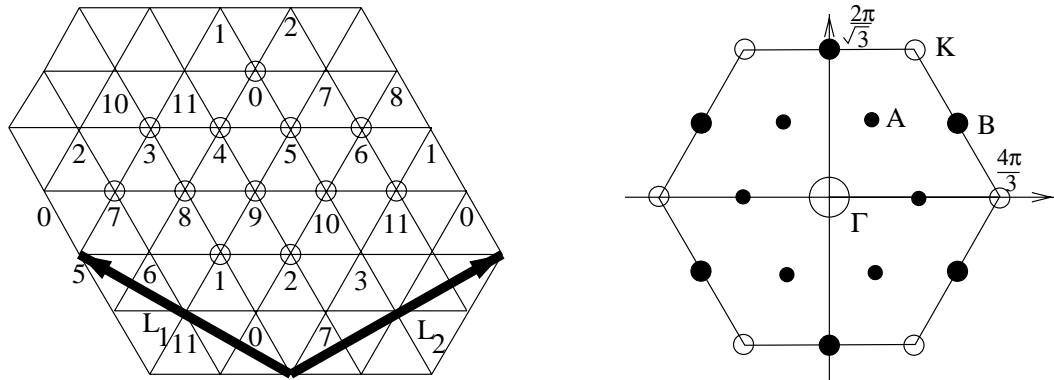


Abbildung D.2: Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 12$

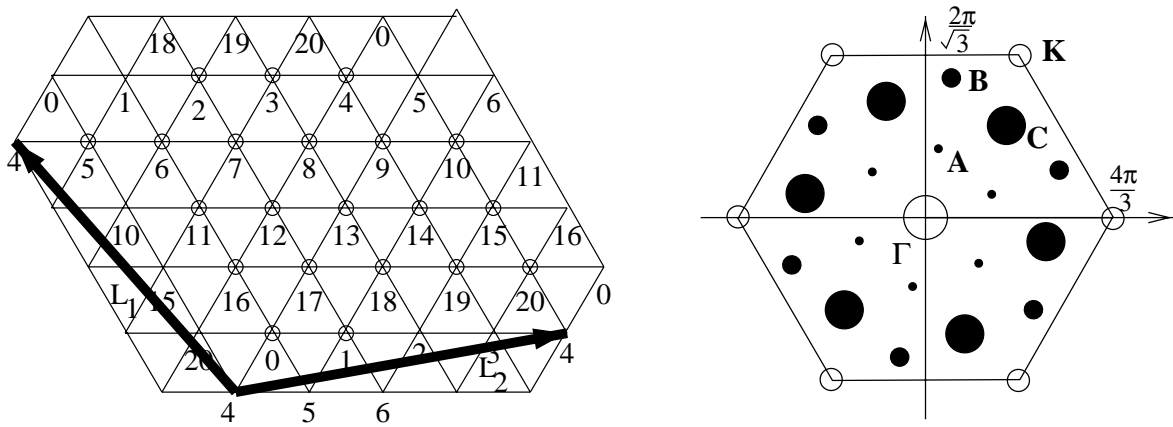


Abbildung D.3: Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 21$

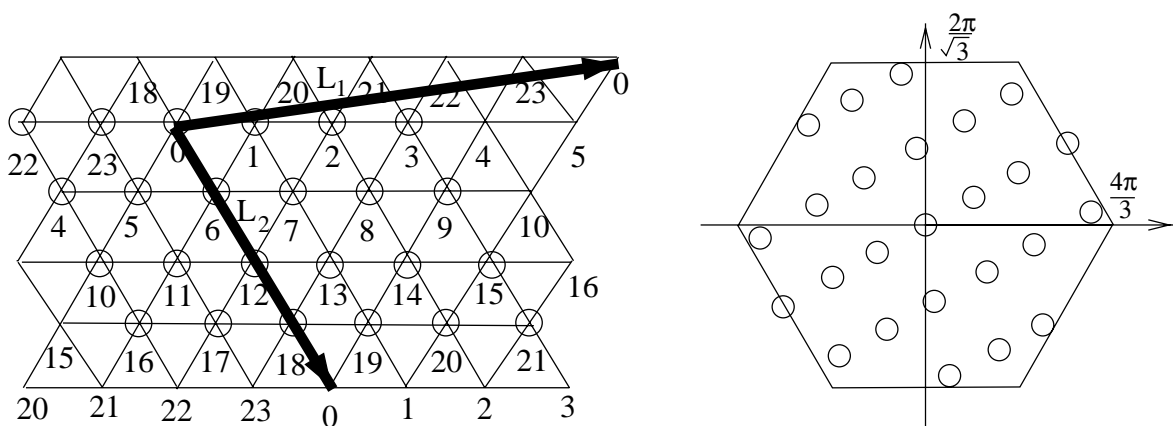
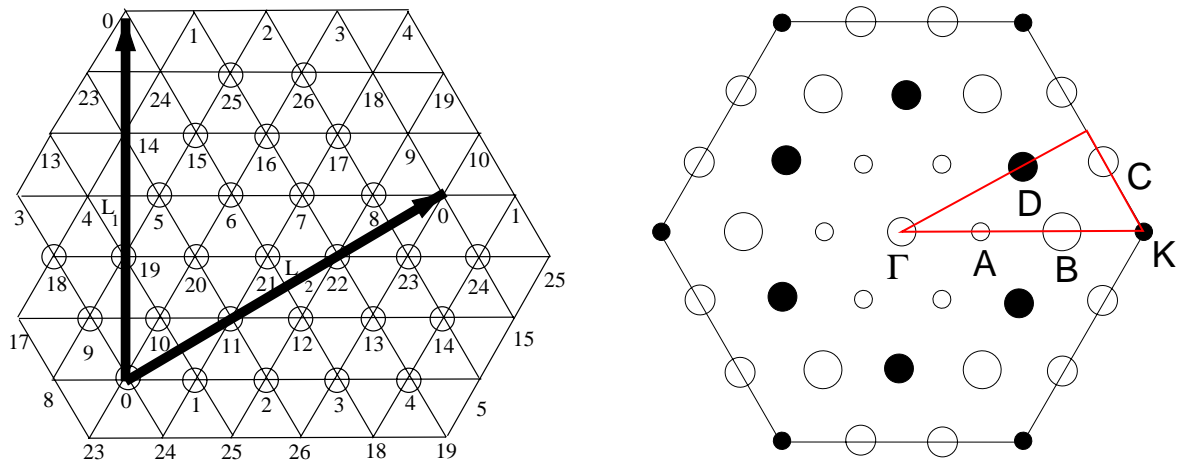


Abbildung D.4: Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 24$

Die Brillouinzone für $N = 24$ besitzt im Gegensatz zu den übrigen gezeigten Gitterzellen keine sechsfache Rotationssymmetrie um den Ursprung. Dieses führt zu abweichendem Verhalten in den physikalischen Eigenschaften.

Abbildung D.5: Gitterzelle und Brillouinzone für $N = 27$

Anhang E

Energieeigenwerte für das Dreiecksgitter

Dieser Anhang enthält die Grundzustandsenergien E des t - J -Modells (5.33) auf dem Dreiecksgitter für verschiedene Impulse \mathbf{k} in der Brillouinzone. Zum Vergleich mit den Ergebnissen aus Spinwellentheorie (SCBA) und der Einlochdispersion in Abschnitt 5.2 sind zu den Energieeigenwerten für ein Loch $\frac{J(N-6)}{4}$ bzw. für kein Loch $\frac{JN}{4}$ dazuzuzugieren. Für $N = 21$ ergeben sich dann folgende Korrekturterme für die Energie: $15.75J$ ohne Loch und mit einem Loch $14.25J$. Für $N = 27$ sind $20.25J$ ($n_h = 0$) und $18.75J$ ($n_h = 1$) hinzuzufügen. Das t - J -Modell für $n_h = 0$ (Heisenbergmodell) hat nach (5.33) die folgenden Grundzustandsenergien.

N	21	27
$E(n_h = 0)$	-27.53091J	-35.37597J

Tabelle E.1: Grundzustandsenergien für $n_h = 0$

\mathbf{k}	Γ	A	B	C	K
$t[J]$	(0,0)	$\left(\frac{2\pi}{21}, \frac{6\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	$\left(\frac{4\pi}{21}, \frac{12\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	$\left(\frac{2\pi}{7}, \frac{8\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	$\left(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right)$
-10	-68.59269310	-67.87766865	-67.78417395	-67.58547451	-67.57266119
-5	-45.96062615	-45.27040399	-45.20982054	-45.08155543	-44.97582414
-2	-32.60724025	-32.05047935	-32.01038151	-31.94780051	-31.77208453
-1	-28.34504541	-27.94607864	-28.21077147	-27.93609532	-27.91995810
-0.8	-27.53523638	-27.18498805	-27.54228381	-27.25247811	-27.30970611
-0.6	-26.75508582	-26.48961430	-26.91756335	-26.65433134	-26.78141187
-0.4	-26.01961360	-25.88840046	-26.34309860	-26.14429806	-26.30941490
-0.2	-25.45758890	-25.35838300	-25.83509937	-25.72532732	-25.87278938
-0.1	-25.20700958	-25.31877677	-25.62197118	-25.56556458	-25.66444972
0.0	-25.46228630	-25.46228630	-25.46228630	-25.46228630	-25.46228630
0.1	-25.86215005	-25.67233934	-25.41129597	-25.44217091	-25.36069285
0.2	-26.26484801	-25.91568247	-25.55669100	-25.53264959	-25.76078258
0.4	-27.07509686	-26.45383296	-26.20771492	-26.08359496	-26.56710596
0.6	-27.88943107	-27.02944519	-26.94620344	-26.82752767	-27.37844595
0.8	-28.70648961	-27.62704072	-27.70274811	-27.60050887	-28.15299171
1	-29.52555321	-28.29028114	-28.46764055	-28.38305093	-29.00981101
2	-33.63948514	-32.22562251	-32.34737028	-32.34704373	-33.11390829
5	-46.06270987	-44.21785530	-44.17832021	-44.39290063	-45.50774868
10	-66.86390807	-64.40376699	-65.10979915	-64.63011558	-66.25522329

Tabelle E.2: Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 1$

k	Γ	A	B	C	D	K
$t[J]$	(0,0)	$(\frac{4\pi}{9}, 0)$	$(\frac{8\pi}{9}, 0)$	$(\frac{10\pi}{9}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}})$	$(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}})$	$(\frac{4\pi}{3}, 0)$
-10	-75.78846701	-75.45293320	-75.06772568	-75.15251079	-75.20673296	-75.21896127
-5	-52.81131962	-52.54251294	-52.64911928	-52.69800034	-52.37004660	-52.56006452
-2	-39.80896447	-39.57382871	-39.81414782	-39.98675165	-39.51763215	-39.73973505
-1	-35.92109550	-35.65670217	-35.85648859	-36.18106022	-35.69635249	-35.83841890
-0.8	-35.20894856	-34.93572748	-35.13991600	-35.49450377	-34.99897548	-35.16049402
-0.5	-34.20583464	-33.98677292	-34.22643674	-34.53884872	-34.12446513	-34.36445232
-0.3	-33.59262903	-33.47077676	-33.75455021	-33.96438501	-33.66597094	-33.90231222
-0.2	-33.30818173	-33.23944703	-33.55752222	-33.70325807	-33.47882852	-33.68717110
-0.1	-33.04444488	-33.11501275	-33.39463387	-33.46900642	-33.33989252	-33.48099595
0.0	-33.28396324	-33.28396324	-33.28396324	-33.28396324	-33.28396324	-33.28396324
0.1	-33.67201382	-33.52403291	-33.25337083	-33.25189719	-33.34709199	-33.10127323
0.2	-34.06545292	-33.79218421	-33.33434673	-33.51355463	-33.52134709	-33.64707116
0.3	-34.46208873	-34.07643966	-33.55320661	-33.85701920	-33.76573988	-34.04455374
0.5	-35.26169645	-34.67384251	-34.24641037	-34.56935768	-34.35054120	-34.84549872
0.8	-36.47143036	-35.61367546	-35.40325683	-35.72728715	-35.45615449	-36.05657444
1	-37.28256664	-36.27269257	-36.18970693	-36.49862688	-36.22948829	-36.86826052
2	-41.37006024	-40.19600237	-40.18539548	-40.42422909	-40.14949990	-40.95586337
5	-53.76120048	-52.30854299	-52.38084346	-52.43877920	-52.09728259	-52.52463141
10	-74.54491860	-72.73838551	-72.89879433	-72.69574728	-72.21345800	-73.22824690

Tabelle E.3: Energieeigenwerte für $N = 27$ und $n_h = 1$

k	Γ	A	B	C	K
$t[J]$	(0,0)	$(\frac{2\pi}{21}, \frac{6\pi}{7\sqrt{3}})$	$(\frac{4\pi}{21}, \frac{12\pi}{7\sqrt{3}})$	$(\frac{2\pi}{7}, \frac{8\pi}{7\sqrt{3}})$	$(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}})$
-10	-103.9802683	-104.1118175	-104.4670072	-104.5382813	-103.9364686
-5	-60.81906696	-60.90340659	-61.15089692	-61.75912292	-61.00754238
-2	-35.95170373	-36.28210345	-36.21113895	-36.68447131	-36.32439036
-1	-28.42958653	-28.63930698	-28.57382943	-28.75624003	-28.76155771
-0.8	-27.09721438	-27.26865767	-27.21384889	-27.30647810	-27.41918900
-0.6	-25.84437737	-26.00893125	-25.98172845	-25.97480006	-26.14751281
-0.4	-24.69592405	-24.88683609	-24.87564521	-24.84490075	-24.96344046
-0.2	-23.80258499	-23.89805931	-23.90322197	-23.89308486	-23.91415574
-0.1	-23.48093822	-23.50107613	-23.48741198	-23.49343340	-23.49313356
0.0	-23.28930197	-23.28930197	-23.28930197	-23.28930197	-23.28930197
0.1	-23.46870422	-23.55663239	-23.69156708	-23.69772420	-23.60952869
0.2	-23.74429598	-24.00669068	-24.32788651	-24.33813623	-24.10697682
0.4	-24.95584693	-25.12253395	-25.67207084	-25.69116648	-25.21886072
0.6	-26.28292019	-26.42527166	-27.05619538	-27.08340246	-26.40953069
0.8	-27.67848314	-27.79253289	-28.46121447	-28.49594466	-27.66092752
1.0	-29.09276670	-29.18794299	-29.87948891	-29.92134020	-29.00939225
2	-36.29515883	-36.41227557	-37.07526091	-37.14970930	-36.14735227
5	-58.32015746	-58.47144261	-59.06031832	-59.22307894	-58.03677067
10	-96.05220185	-95.65664765	-96.15052621	-96.46605033	-94.92093908

Tabelle E.4: Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 2$

k $t[J]$	Γ (0,0)	A $(\frac{4\pi}{9}, 0)$	B $(\frac{8\pi}{9}, 0)$	C $(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}})$	D $(\frac{10\pi}{9}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}})$	K $(\frac{4\pi}{3}, 0)$
-1.0	-36.313	-36.64923245	-36.54531238	-36.48559223	-36.61931599	-36.681025
-0.3	-32.1105	-32.30064	-32.245018	-32.24650246	-32.2926	-32.30646131
-0.1	-31.34805328	-31.37461226	-31.3610	-31.35717	-31.37698541	-31.345202
0.0	-31.15035404	-31.15035404	-31.15035404	-31.15035404	-31.15035404	-31.15035404
0.1	-31.31498307	-31.392872	-31.56411306	-31.50631349	-31.55662376	-31.44659
0.3	-32.24691355	-32.3939683	-32.90395077	-32.88676866	-32.56644587	-32.63064640
1.0	-37.23178707	-37.33676001	-37.90552410	-37.86548925	-37.41208498	-37.27705513

 Tabelle E.5: Energieeigenwerte für $N = 27$ und $n_h = 2$

k $t[J]$	Γ (0,0)	A $(\frac{2\pi}{21}, \frac{6\pi}{7\sqrt{3}})$	B $(\frac{4\pi}{21}, \frac{12\pi}{7\sqrt{3}})$	C $(\frac{2\pi}{7}, \frac{8\pi}{7\sqrt{3}})$	K $(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}})$
-10	-145.0196008	-144.9210949	-145.1750610	-145.1103604	-145.1236696
-5	-78.47766338	-78.18223152	-78.20309170	-78.39202142	-78.16823730
-2	-41.38585591	-41.07246597	-41.12271142	-41.42682362	-41.16942611
-1	-30.15327912	-29.81547520	-29.80632891	-30.13421760	-29.74648374
-0.5	-25.20642455	-24.83730129	-24.79924655	-25.31220913	-24.76466190
-0.3	-23.42346525	-22.99590616	-23.11711605	-23.50198845	-23.08625851
-0.2	-22.56812134	-22.37626054	-22.41258302	-22.62884580	-22.39638108
-0.1	-21.97439154	-21.96793691	-21.95443108	-21.95688378	-21.93481020
0	-21.79355700	-21.79355700	-21.79355700	-21.79355700	-21.79355700
0.1	-22.08034562	-22.07993743	-22.00710769	-22.05914130	-21.98566926
0.2	-23.06149408	-22.91983090	-22.61159036	-22.96047256	-22.57180565
0.3	-24.12251066	-23.85490289	-23.45846789	-23.96516947	-23.58761645
0.5	-26.28516266	-25.81002725	-25.52815727	-26.04195121	-25.73340714
1	-31.78689290	-30.91293421	-30.86045101	-31.38794492	-31.20583641
2	-42.93385976	-41.66480077	-41.76122865	-42.32152035	-42.30632549
5	-76.68268919	-74.78800102	-74.97921398	-75.70045404	-75.91883489
10	-133.1778798	-130.4532092	-130.7535303	-131.8521460	-132.1720119

 Tabelle E.6: Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 3$

k $t[J]$	Γ (0,0)	A $\left(\frac{2\pi}{21}, \frac{6\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	B $\left(\frac{4\pi}{21}, \frac{12\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	C $\left(\frac{2\pi}{7}, \frac{8\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	K $\left(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right)$
-10	-165.53	-166.352059	-167.9491825	-167.3228527	-166.42839
-5	-87.39009743	-87.54375800	-87.94018976	-87.61544874	-87.60237654
-2	-42.87206912	-42.84497077	-42.89670990	-42.87309951	-42.83171527
-1	-29.45283042	-29.41990532	-29.45477139	-29.57547648	-29.43807689
-0.5	-23.42633140	-23.49138139	-23.50321951	-23.50811055	-23.61061622
-0.3	-21.45042344	-21.48128790	-21.48934577	-21.47456516	-21.52669635
-0.2	-20.59655093	-20.61458374	-20.59941140	-20.59984486	-20.60861874
-0.1	-20.09866852	-20.10093019	-20.10347104	-20.10142461	-20.10238586
0	-19.95311596	-19.95311596	-19.95311596	-19.95311596	-19.95311596
0.1	-20.14776686	-20.17693237	-20.21301172	-20.21552264	-20.24205257
0.2	-20.90612982	-21.15379814	-21.25667291	-21.27015043	-21.29027205
0.3	-21.94925330	-22.34327633	-22.46438572	-22.48593282	-22.48825925
0.5	-24.44119992	-24.85100232	-24.99100526	-25.03070084	-25.01481875
1	-31.05732045	-31.38465247	-31.53427898	-31.62867833	-31.58624677
2	-44.69333732	-44.79831381	-44.93048004	-45.16889382	-45.03404599
5	-86.20180408	-85.63355446	-85.72444014	-86.57044706	-85.86330375
11	-169.7559142	-167.7903520	-167.8406419	-170.0671483	-167.9017991

Tabelle E.7: Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 4$

k $t[J]$	Γ (0,0)	A $\left(\frac{2\pi}{21}, \frac{6\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	B $\left(\frac{4\pi}{21}, \frac{12\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	C $\left(\frac{2\pi}{7}, \frac{8\pi}{7\sqrt{3}}\right)$	K $\left(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\right)$
-10	-187.6035452	-186.5959111	-186.8444817	-186.7676931	-186.6897137
-5	-96.57434971	-96.450702	-96.6043405	-96.561044	-96.58995
-2	-44.85891933	-44.8179	-44.7956	-44.8413184	-44.774163
-1	-29.71025401	-29.42916120	-29.51074046	-29.46556393	-29.392960
-0.5	-22.76859869	-22.64882800	-22.74813109	-22.70565888	-22.67025977
-0.3	-20.19616682	-20.20198304	-20.28698390	-20.25230236	-20.28304002
-0.2	-19.13720257	-19.19391379	-19.23135681	-19.20343101	-19.20147625
-0.1	-18.64682565	-18.65062297	-18.65317183	-18.65222535	-18.65015923
0.0	-18.46810085	-18.46810085	-18.46810085	-18.46810085	-18.46810085
0.1	-18.77006145	-18.75522789	-18.73037552	-18.73951193	-18.71847183
0.2	-20.09345334	-20.00525430	-19.72190683	-19.91789830	-19.65744735
0.3	-21.62118815	-21.49859016	-21.06590937	-21.39009840	-20.99650272
0.5	-24.79530390	-24.62369226	-24.11642658	-24.49958838	-24.08459857
1	-32.95984811	-32.70071635	-32.11764128	-32.61654903	-32.08663355
2	-49.59694912	-49.16009663	-48.49289044	-49.29745173	-48.46913955
5	-100.1477251	-98.98590173	-98.30700350	-99.97558103	-98.26365642
10	-184.8453915	-182.2791841	-181.7103088	-184.7327862	-181.6412556

Tabelle E.8: Energieeigenwerte für $N = 21$ und $n_h = 5$

Literaturverzeichnis

- [1] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- [2] D. N. Sheng, Y. C. Chen, and Z. Y. Weng, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5102 (1996).
- [3] W. O. Putikka, M. U. Luchini, and R. R. P. Singh, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2966 (1998).
- [4] A. Chernyshev, P. Leung, and R. Gooding, *Phys. Rev. B* **58**, 13594 (1998).
- [5] C. Kim *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4245 (1998).
- [6] S. LaRosa *et al.*, *Phys. Rev. B* **56**, R525 (1997).
- [7] M. Ogata, M. Luchini, S. Sorella, and F. F. Assaad, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2388 (1991).
- [8] J. Luttinger, *Phys. Rev.* **119**, 1153 (1960).
- [9] P. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 1049 (1967).
- [10] S. Sorella and A. Parola, *Phys. Rev. B* **57**, 6444 (1998).
- [11] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **121**, 942 (1961).
- [12] B. Bernu, C. Lhullier, and L. Pierre, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2590 (1992).
- [13] P. Azaria, B. Delamotte, and D. Mouhanna, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2483 (1993).
- [14] W. Apel, H.-U. Everts, and U. Körner, *Eur. Phys. J. B* **5**, 317 (1998).
- [15] M. Azzouz and T. Dombre, *Phys. Rev. B* **53**, 402 (1996).
- [16] S. R. White and I. Affleck, *cond-mat/0011098* (2000).
- [17] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer, New York, 1994).
- [18] J. R. Klauder and B. Skagerstam, *Coherent states* (World Scientific, Singapur, 1985).
- [19] J. Schwinger, in *Quantum Theory of Angular Momentum*, edited by L. Biedenharn and H. Van Dam (Academic, New York, 1965).
- [20] J. Hubbard, *Roy. Proc. Soc. London* **281**, 401 (1964).
- [21] C. Itzykson and J.-M. Drouffe, *Statistical field theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 1989), Vol. 1.
- [22] R. Shankar, *Nucl. Phys. B* **330**, 433 (1990).

- [23] S. Schmitt-Rink, C. M. Varma, and A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **60**, 2793 (1988).
- [24] F. Marsiglio, A. E. Ruckenstein, S. Schmitt-Rink, and C. M. Varma, Phys. Rev. B **43**, 10882 (1991).
- [25] C. L. Kane, P. A. Lee, and N. Read, Phys. Rev. B **39**, 6880 (1989).
- [26] S. Chakravarty, B. I. Halperin, and D. R. Nelson, Phys. Rev. B **39**, 2344 (1989).
- [27] J. Solyom, Adv. Phys. **28**, 201 (1979).
- [28] P. W. Leung and R. J. Gooding, Phys. Rev. B **52**, R15711 (1995), erratum **B 54**, 711(1996).
- [29] M. Vojta and E. Dagotto, Phys. Rev. B **59**, R713 (1999).
- [30] H. Weitering *et al.*, Phys. Rev. Lett. **78**, 1331 (1997).
- [31] A. Ramirez, R. Cava, J. Krajewski, and W. Peck, Phys. Rev. B **49**, 16082 (1994).
- [32] T. Jolicoeur and J. C. L. Guillou, Phys. Rev. B **40**, 2727 (1989).
- [33] B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier, and L. Pierre, Phys. Rev. B **50**, 10048 (1994).
- [34] E. Dagotto *et al.*, Phys. Rev. B **41**, 9049 (1990).
- [35] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, Cambridge, 1986).
- [36] Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
- [37] M. Vojta, Phys. Rev. B **59**, 6027 (1999).
- [38] A. Auerbach and B. E. Larson, Phys. Rev. Lett. **66**, 2262 (1991).
- [39] A. Ramšak and P. Horsch, Phys. Rev. B **57**, 4308 (1998).
- [40] H.-Q. Ding, Physica C **203**, 91 (1992).
- [41] J. Behre and S. Miyashita, J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 4745 (1992).
- [42] J. Behre, Ph.D. thesis, Universität Hannover, 1992.
- [43] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2 ed. (Taylor and Francis, London, 1992).
- [44] C.-K. Hu, C.-Y. Lin, and J.-A. Chen, Phys. Rev. Lett. **75**, 193 (1995).
- [45] J. K. Cullum and R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for large Symmetric Eigenvalue Computations*, Vol. 1 Theory, Birkhäuser, Boston (1985).
- [46] R. Haydock, V. Heine, and M. J. Kelly, J. Phys. C **5**, 2845 (1972).
- [47] R. Haydock, V. Heine, and M. J. Kelly, J. Phys. C **8**, 2591 (1975).
- [48] H. Q. Lin, Phys. Rev. B **42**, 6561 (1990).

Danksagung

Hiermit möchte ich Herrn Prof. Dr. H.-U. Everts für die Vergabe des Themas und die Betreuung meiner Dissertation danken. Mein besonderer Dank gilt auch Herrn Privatdozent Dr. W. Apel für viele fruchtbare Diskussionen.

Desweiteren möchte ich dem Regionalen Rechenzentrum Niedersachsen (RRZN) und dem John von Neumann – Institut für Computing in Jülich für die Benutzung der Rechenanlagen für die numerischen Untersuchungen danken.

Lebenslauf

Geburtsdatum/-ort 16.12.1969 in Celle

Schulausbildung

08/1976-07/1980 Grundschule Westercelle 2

08/1980-05/1989 Hölty-Gymnasium Celle
mit Schulabschluß Abitur

Hochschulausbildung

10/1990 Beginn des Physikstudiums an der Universität Hannover

10/1992 Diplomvorprüfung

09/1993-09/1994 Masters Thesis in Theoretical Physics
an der University of Manchester bei Prof. Dr. A. J. Bray
Thema: "Scaling Behaviour of Binary Liquids in the Viscous
Hydrodynamic Regime for a Large n-Potential"

10/1995-09/1996 Diplomarbeit am Institut für Theoretische Physik
der Universität Hannover bei Prof. Dr. H.-U. Everts
Thema: „Einlochzustände im t-J Modell auf dem Dreiecksgitter“

11/1996 Diplomhauptprüfung

seit 04/1997 Mitglied im Graduiertenkolleg Quantenfeldtheoretische Methoden
in der Teilchenphysik, Gravitation und Statistischen Physik

seit 04/2000 Wissenschaftliche Hilfskraft am Institut für Theoretische Physik

Veröffentlichungen

W. Apel, H.-U. Everts, U. Körner
„Effective Hamiltonians for holes in antiferromagnets:
a new approach to implement forbidden double occupancy”,
European Physical Journal B **5**, S. 317 (1998)