

Diplomarbeit

Feldtheorie für gekoppelte Ketten:  
Übergang von einer zu zwei  
Dimensionen

von  
Elmar Vogel

Hauptberichter:  
Prof. Dr. A. Muramatsu  
Institut für Theoretische Physik III

Mitberichter:  
Prof. Dr. U. Weiß  
Institut für Theoretische Physik II

Universität Stuttgart

14. April 1998



# Inhalt

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Eigenschaften von Hochtemperatur-Supraleitern</b>	<b>3</b>
1.1 Kristallstruktur und Kristallchemie	3
1.2 Phasendiagramm	5
1.3 Supraleitung	6
1.4 Magnetische Eigenschaften	7
1.5 Ketten und Leitern	9
<b>2 Mikroskopische Modelle</b>	<b>13</b>
2.1 Kupferoxid-Ketten und Leitern	13
2.2 Spin-Fermion-Modell für eine Kette	14
2.3 Spin-Fermion-Modell für eine Leiter	16
2.4 Mit Experimenten konsistenter Parametersatz	17
<b>3 Kontinuumsübergang bei einer Kette</b>	<b>18</b>
3.1 Kontinuumsübergang für die Spins	18
3.2 Kombinationszustände	25
3.3 Bandstruktur der Fermionen in statischer Näherung	31
3.4 Gewichte der Kombinationszustände im tiefsten Bandzustand	34
3.5 Kontinuumsübergang für die Fermionen	36
3.6 $CP^1$ -Darstellung	45
3.7 Wirkung in Form eines Weyl-Feldes	48
<b>4 Kontinuumsübergang bei einer Leiter</b>	<b>51</b>
4.1 Kontinuumsübergang für die Spins	51
4.2 Kombinationszustände	56
4.3 Kontinuumsübergang für die Fermionen	59
<b>5 Abgeleitete Feldtheorien</b>	<b>67</b>
5.1 Zusammenstellung beider Theorien	67
5.2 Betrachtung von Grenzfällen	70
5.3 Physikalisches Szenario	70
<b>Zusammenfassung</b>	<b>73</b>
<b>Anhang</b>	<b>76</b>
A Ansichten von Kristallen	76
B Zur Notation	79

C	Mikroskopische Modelle	80
D	Feldtheoretische Modelle	82
E	Zum magnetischen Monopol	83
F	Zum topologischen Term	84
G	Transformation vom Orts- in den Impulsraum	85
H	Fourier-Transformation diskret und kontinuierlich	86
I	Transformation vom Impuls- in den Ortsraum	87
J	Zur $CP^1$ -Darstellung	88
K	Innere Symmetrien und Ströme	90
L	Stromdefinition beim nichtlinearen $\sigma$ -Modell	91
	<b>Literatur</b>	<b>92</b>

# Einleitung

Durch die Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleiter von J. G. Bednorz und K. A. Müller [1] im Jahre 1986 wurden einige Fragen in der Festkörperphysik neu gestellt. Im Gegensatz zu den metallischen Supraleitern kann die Cooper-Paar-Bildung [2] in diesen keramischen Materialien, der Kuprate nicht unbedingt durch phononische Prozesse erklärt werden. Vielmehr scheinen magnetische Anregungen eine wesentliche Rolle zu spielen [3]. Damit weisen die Kuprate Eigenschaften auf, die dem klassischen Bild der Supraleitung unmittelbar widersprechen. Dazu gehört v.a. der Übergang von einem antiferromagnetischen Isolator zu einem supraleitenden Metall, abhängig von der Dotierung.

Auch heute ist noch kein entscheidender Durchbruch bei der theoretischen Erklärung der Kuprate gelungen. Das liegt vor allem daran, daß es sich um stark korrelierte Systeme handelt, die sich einer störungstheoretischen Behandlung entziehen. Von der theoretischen Seite betrachtet, hat man es mit zweidimensionalen Problemstellungen zu tun. In den letzten Jahren ist es gelungen Kuprate unter hohem Druck so zu synthetisieren, daß sich quasi eindimensionale Strukturen, sogenannte Ketten und Leitern ausbilden. Diese haben einige besondere magnetische Eigenschaften und zeigen zum Teil auch Supraleitung. Weil sich eindimensionalen Problemstellungen theoretisch oft exakt lösen lassen, besteht hier die Hoffnung, mehr über die besonderen Eigenschaften der Kuprate zu lernen.

Chakravarty, B. I. Halperin und D. R. Nelson (CHN) haben mit Hilfe der Renormierungs-Gruppen-Theorie gezeigt, daß die Spin-Fluktuationen der undotierten Kuprate durch das nichtlineare  $\sigma$ -Modell gut beschrieben werden [4]. Bei diesem Modell handelt es sich um eine feldtheoretische Beschreibung von antiferromagnetischen Spin-Fluktuationen. Inzwischen sind Möglichkeiten bekannt, aus mikroskopischen Modellen von Antiferromagneten durch einen Kontinuumsübergang dieses feldtheoretische Modell abzuleiten [5] und so die Brücke zwischen mikroskopischen Materialgrößen und makroskopischen zu schlagen. Es liegt also nahe, aus mikroskopischen Modellen, die zusätzlich auch Ladungsträger berücksichtigen, ein entsprechend erweitertes feldtheoretisches Modell abzuleiten. In dieser Arbeit wird solch ein Kontinuumsübergang für realistische mikroskopische Modelle von dotierten Spin-Ketten und Spin-Leitern durchgeführt.

Das erste Kapitel bespricht zunächst die wesentlichen Eigenschaften der "normalen" Hochtemperatur-Supraleiter, wie sie sich aus Experimenten ergeben. Danach folgt eine Zusammenstellung der inzwischen vielschichtig vorhandenen quasi eindimensionalen Kuprate und deren besondere Eigenschaften.

Das zweite Kapitel stellt die mikroskopischen Modelle vor, von denen diese Arbeit ausgeht. Im Dritten wird detailliert der Kontinuumsübergang für eine dotierte Spin-Kette

durchgeführt und im vierten auf zwei gekoppelte dotierte Spin-Ketten, d.h. eine dotierte Spin-Leiter erweitert. Im fünften Kapitel befindet sich schließlich eine Zusammenstellung der beiden abgeleiteten Feldtheorien und eine qualitative Diskussion der Aussagen, die mit ihnen getroffen werden können.

# 1 Eigenschaften von Hochtemperatur-Supraleitern

## 1.1 Kristallstruktur und Kristallchemie

Die meisten Forscher auf dem Gebiet der Hochtemperatur-Supraleitung akzeptieren ein bestimmtes mikroskopisches Bild der Hochtemperatur-Supraleiter [3]. Das geht davon aus, daß für die besonderen physikalischen Eigenschaften hauptsächlich die Kupferoxid-Ebenen verantwortlich sind. Je nach Material sind diese durch verschieden aufgebaute nichtmagnetische Zwischenschichten getrennt. Anhand  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  lassen sich die wesentlichen Eigenschaften des mikroskopischen Bildes am besten erläutern.

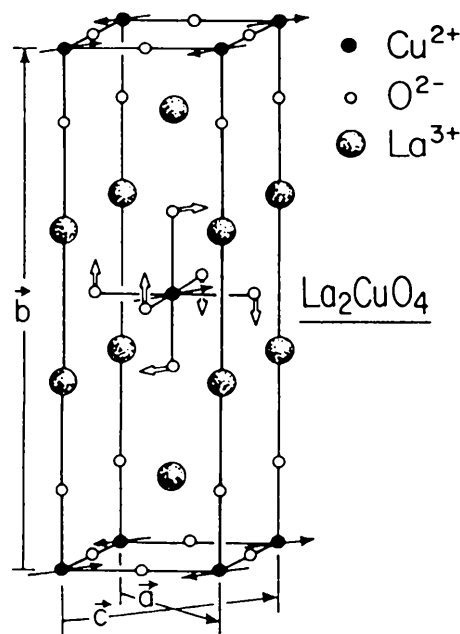


Abb. 1.1: Kristall und magnetische Struktur von  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Die doppelten Pfeile deuten schematisch die Rotation des  $\text{CuO}_6$ -Komplexes in der orthorhombischen Phase an.

Bei reinem  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  handelt es sich um einen antiferromagnetischen Isolator. Hier sind die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen durch nichtmagnetische Zwischenschichten aus  $\text{La}_2\text{O}_2$  getrennt. Mit Stöchiometrieüberlegungen läßt sich die Elektronenkonfiguration der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen bestimmen: Aufgrund der Elektronegativität besitzt das Sauerstoffion  $\text{O}^{2-}$  die Elektronenkonfiguration von Neon, das Lanthanion  $\text{La}^{3+}$  die von Xenon. Berücksichtigt man die

Ladungsneutralität des Festkörpers, muß das Kupferion die Ladung  $2^+$  tragen. Die Elektronenkonfiguration von  $\text{Cu}^{2+}$  ist  $[\text{Ar}]3d^9$ , was ein  $3d$ -Loch bei den Kupferplätzen bedeutet. Aufgrund der umgebenden Sauerstoffionen liegt das zugehörige Orbital  $3d_{x^2-y^2}$  in der  $\text{CuO}_2$ -Ebene, es besitzt Spin  $s = \frac{1}{2}$ .

Die Annahme von Nächste-Nachbar-Hüpfprozessen zwischen den Kupferplätzen führt auf Tight-Binding-Modelle<sup>1</sup>. Berechnet man damit die Bandstruktur, sollte  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  ein nichtmagnetisches Metall sein. Das widerspricht den Experimenten [6]. Berücksichtigung starker Elektronenkorrelationen, d.h. große Coulomb-Abstoßung zweier Elektronen auf einem Kupferplatz, führt dagegen auf Hubbard-Modelle<sup>2</sup> [7]. Aus diesen folgt, daß reines  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  ein antiferromagnetischer Isolator ist. Daß diese Modelle geeignet sind, unterstützen spektroskopische Beobachtungen, nach denen die Elektronenkonfiguration  $[\text{Ar}]3d^{10}$  beim Kupfer nicht vorkommt [8].

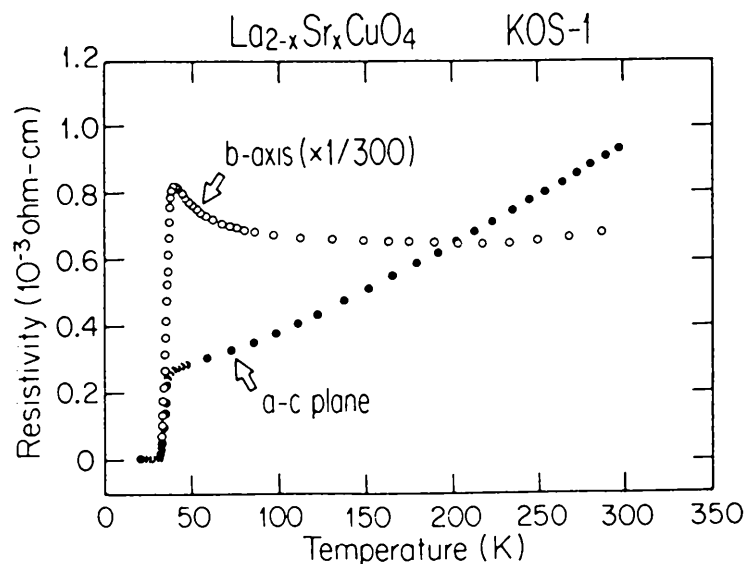


Abb. 1.2: Widerstandsverhalten in Richtung der  $\text{CuO}_2$ -Ebenen (a-c-Ebene) und senkrecht dazu (b-Achse).

Ersetzen von z.B. 7% Lanthan  $\text{La}^{3+}$  durch Strontium  $\text{Sr}^{2+}$  ergibt 0,07 zusätzliche Löcher pro Einheitszelle. Durch diese Dotierung erhält man aber nicht etwa 7%  $\text{Cu}^{3+}$ , sondern zum überwiegenden Teil zusätzliche Löcher bei den Sauerstoffplätzen in den  $\text{CuO}_2$ -Ebenen. Spektroskopie<sup>3</sup> [9] bestätigt auch, daß die Elektronenkonfiguration der Sauerstoffionen  $1s^2 2s^2 2p^5$  ist und damit die zusätzlichen Löcher  $2p$ -Charakter haben. In einem mikroskopischen Modell muß deshalb die Korrelationsenergie größer als die Energiedif-

<sup>1</sup> zum Begriff "Tight-Binding-Modell" siehe Anhang C

<sup>2</sup> Der Begriff "Hubbard-Modell" ist ebenfalls im Anhang C erklärt.

<sup>3</sup> Messungen des Energieverlusts schneller Elektronen



ferenz zwischen den Kupfer 3d und den Sauerstoff 2p Orbitalen sein. Weiterhin bewegen sich die zusätzlichen Löcher überwiegend in den  $\text{CuO}_2$ -Ebenen, was sich im anisotropen Widerstandsverhalten widerspiegelt [10].

Oberhalb der Sprungtemperatur ist die Anisotropie der Temperaturabhängigkeit des Widerstands besonders auffallend. In Richtung der Ebenen liegt, wie bei einem Metall, ein linearer Zusammenhang zwischen dem Widerstand und der Temperatur vor. Senkrecht zu den Ebenen ergibt sich dagegen ein Verlauf wie bei einem Halbleiter.

Im Gegensatz zu  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  sind viele andere Hochtemperatur-Supraleiter selbstdotierend. Das bedeutet, daß die Löcherkonzentration auf den Sauerstoffplätzen einfach durch Änderung der Sauerstoffkonzentration variiert werden kann. Alle zusammen besitzen sie aber immer  $\text{CuO}_2$ -Ebenen mit der gleichen Elektronenkonfiguration.

## 1.2 Phasendiagramm

Das Phasendiagramm [3] von  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  zeigt zunächst einen strukturellen Phasenübergang zwischen einer tetragonalen und einer orthorhombischen Phase.

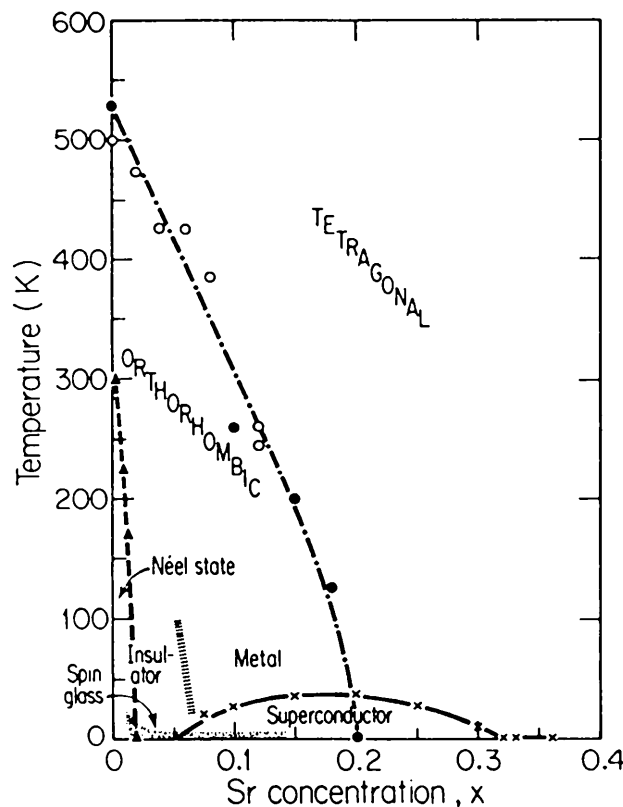


Abb. 1.3: Phasendiagramm von  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

Dies bezieht sich auf die verkippte Anordnung der in  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  vorkommenden Oktaeder-Komplexe bei tiefen Temperaturen. Es wird nicht angenommen, daß dieser Effekt fundamental zur Supraleitung beiträgt.

Bei sehr kleinen Strontium-Konzentrationen  $x \leq 0,02$  und kleinen Temperaturen ist  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  ein antiferromagnetischer Isolator.

Im Bereich  $0,02 \leq x \leq 0,05$  liegt eine ungeordnete magnetische Struktur wie bei Spingläsern vor. Dieser Bereich könnte von nicht genügend reinen Kristallen verursacht sein.

Für  $0,05 \leq x \leq 0,3$  ist  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  ein supraleitendes Metall mit einer Sprungtemperatur bis zu 40 K, die unter Druck auf 60 K angehoben werden kann.

Hat man schließlich  $0,3 \leq x$  erreicht, liegt ein Metall vor, das keine Supraleitung mehr aufweist.

### 1.3 Supraleitung

Zwischen manchen Eigenschaften konventioneller Supraleiter und Hochtemperatur-Supraleiter (HTC) bestehen große Übereinstimmungen, andere unterscheiden sich dagegen fundamental.

Ohne externes Magnetfeld zeigen beide bei hinreichend kleinen Temperaturen einen verschwindenden elektrischen Widerstand [1]. Durch starkes Flußpinning hervorgerufen, zeigen HTC nur bei extrem reinen Proben und schwachen Feldern eine Meißner-Phase, die mit der konventioneller, metallischer Supraleiter vergleichbar ist [11]. Alle HTC sind Typ II Supraleiter. Untersuchungen von Josephson-Tunnelkontakten [12] ergeben ein Flußquant von  $hc/2e$ . Deswegen ist anzunehmen, daß auch hier gebundene Elektronenpaare für die besonderen Transporteigenschaften verantwortlich sind. Schwierig durchzuführende Messungen der Energielücke [11] liefern statt  $E_g \approx 3,5k_B T$  bei konventionellen Supraleitern Werte zwischen  $E_g \approx 2k_B T$  und  $E_g \approx 8k_B T$ .

Daß sich der Kopplungsmechanismus der Elektronenpaare bei den HTC's fundamental von dem bei konventionellen Supraleitern unterscheidet, zeigen folgende beide Tatsachen:

Das Ersetzen von  $^{16}\text{O}$  durch  $^{18}\text{O}$  scheint eine Erniedrigung der Sprungtemperatur  $T_C$  um  $0,3\text{K}$  unabhängig von  $T_C(^{16}\text{O})$  hervorzurufen [10]. Vom Isotopeneffekt  $T_C \sim \sqrt{M}$  her würde man aber bei  $T_C = 110\text{K}$  eine Änderung von  $\Delta T_C \approx 6,3\text{K}$  erwarten. Tauscht man in  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  einige Prozent der  $\text{Cu}^{2+}$  Ionen mit Spin  $s = 1/2$  gegen  $\text{Zn}^{2+}$  Ionen mit  $s = 0$  oder  $\text{Ni}^{2+}$  Ionen mit  $s = 1$  aus, verschwindet die Supraleitung [13].

Es ist also ein Kopplungsmechanismus zu erwarten, welcher von der antiferromagnetischen Struktur der Materialien abhängt und der nicht wie bei den konventionellen Supraleitern von Phononen hervorgerufen wird.

Ob die Supraleitung der HTC durch eine Art BCS-Theorie mit einem neuen Paarungsmechanismus oder eine völlig anders geartete Theorie beschrieben werden kann, ist noch

offen. Einfache Molekularfeld-Theorien sind allerdings ungeeignet. Die Gründe hierfür sind im nächsten Kapitel aufgeführt.

## 1.4 Magnetische Eigenschaften

Betrachtet man das Phasendiagramm Abb. 1.3, lassen sich aus Untersuchungen von reinem  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  die magnetischen Eigenschaften in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmen. In diesem Fall hat man es mit einem antiferromagnetischen Isolator zu tun, der u.a. durch das Heisenberg-Modell beschrieben werden kann.

N. D. Mermin und H. Wagner [14] haben gezeigt, daß aus einem zweidimensionalen Heisenberg-Modell keine langreichweitige magnetische Ordnung bei nicht verschwindenden Temperaturen resultiert. Die Korrelationslänge  $\xi$  sollte bei klassischen Spins exponentiell für  $T \rightarrow 0$  divergieren [15]:

$$\xi/a \propto e^{2\pi JS^2/k_B T}$$

Es genügt aber schon eine kleine Kopplung zwischen den  $\text{CuO}_2$ -Ebenen, um auch bei nicht verschwindenden Temperaturen langreichweitige Ordnung zu erhalten.

Aus Neutronen-Streuexperimenten [16] geht hervor, daß sich die Spins in  $\text{CuO}_2$ -Ebenen unterhalb der Néel-Temperatur dreidimensional und somit langreichweitig anordnen. Hierbei ist die Kopplung zwischen den Ebenen von entscheidender Bedeutung. Über der Néel-Temperatur entfällt diese Kopplung und es liegen nur zweidimensionale Systeme vor. S. Chakravarty, B. I. Halperin und D. R. Nelson (CHN) haben aus einer Untersuchung des nichtlinearen  $\sigma$ -Modells<sup>4</sup> mit Hilfe der Renormierungs-Gruppen-Theorie [17] die zweidimensionale Spin-Spin-Korrelationslänge bestimmt [4]. Diese divergiert für  $T \rightarrow T_N$  exponentiell. Aus einem Fit der Theorie von CHN mit experimentellen Daten folgt die Kopplungskonstante  $J \approx 0,13 \text{ eV}$ . Das stimmt gut mit experimentellen Ergebnissen inelastischer Neutronenstreuung [18] und zwei Magnonen-Raman-Streuung [19] überein.

---

<sup>4</sup> Was man unter einem "nichtlinearen  $\sigma$ -Modell" versteht, ist im Anhang D beschrieben.

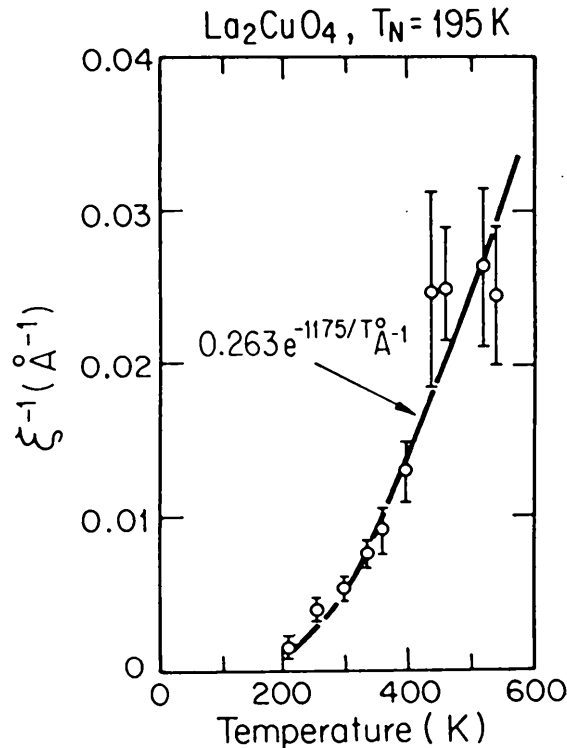


Abb. 1.4: Inverse Spin-Spin-Korrelationslänge in Abhängigkeit von der Temperatur bei La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>. Die durchgezogene Linie ergibt sich aus der renormierten Theorie von CHN.

Die zweidimensionalen Spin-Fluktuationen werden also durch das nichtlineare  $\sigma$ -Modell gut beschrieben.

Das Phasendiagramm Abb. 1.3 zeigt bei La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub> und Dotierungen um  $x = 0,04$  einen Phasenübergang von antiferromagnetischem zu einem Spinglas-Verhalten. Aus Neutronen-Streuexperimenten [10] folgt, daß durch zunehmende Dotierung ebenfalls die antiferromagnetische Kopplung zwischen den CuO<sub>2</sub>-Ebenen unterbunden wird. Hier hat man es also auch mit zweidimensionaler und damit kurzreichweitiger Spin-Ordnung zu tun. Dies spiegelt sich in der instantanen Spin-Spin-Korrelationslänge Abb. 1.5 wieder [10].

Untersuchungen der supraleitenden Kohärenzlänge [11] der HTC ergeben eine Größenordnung von 15 Å. Das ist aber nicht sehr von der Spin-Spin-Korrelationslänge von ungefähr 10 Å verschieden. Wegen der Kleinheit dieser Größen sind Molekularfeld-Theorien zur Erklärung der Hochtemperatur-Supraleitung weniger gut geeignet<sup>5</sup>.

<sup>5</sup> Molekularfeld-Theorien vernachlässigen Fluktuationen zugunsten langreichweitiger Ordnungen.

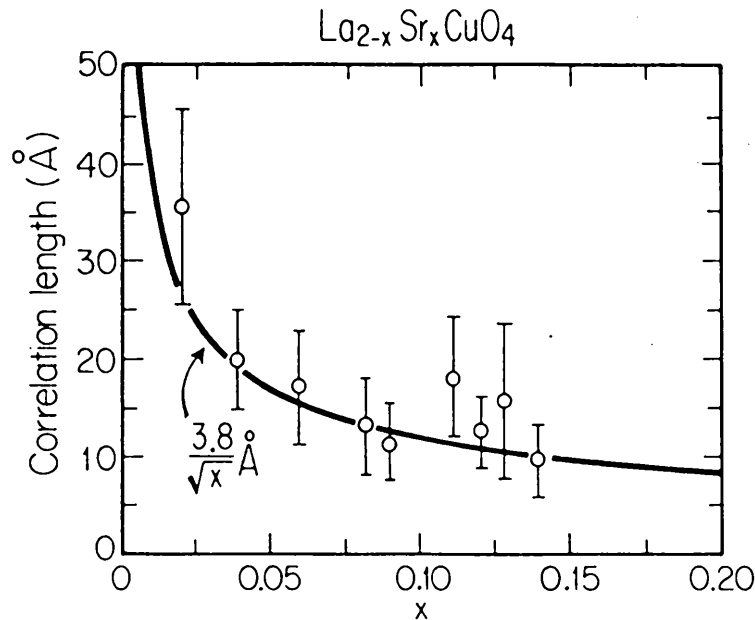


Abb. 1.5: Instantane Spin-Spin-Korrelationslänge von  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  in Abhängigkeit von der Strontium-Konzentration  $x$ .

Ein weiteres Detail soll an dieser Stelle noch erwähnt werden: Aus Experimenten [3,10] folgt, daß die Nahordnung der Spins in der supraleitenden Phase nicht exakt antiparallel ist. Benachbarte Spins schließen vielmehr einen Winkel von ca.  $155^\circ$  ein. Inwieweit dieser Effekt zur Supraleitung beiträgt, wird noch untersucht [21].

## 1.5 Ketten und Leitern

Da die besonderen Transporteigenschaften der Kuprate durch die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen hervorgerufen werden, hat man es in der Theorie vereinfacht mit zweidimensionalen Problemen zu tun. Unter bestimmten Gesichtspunkten sind eindimensionale Probleme theoretisch besser zu handhaben als zweidimensionale. Bei einer neuen Klasse von Kupraten sind die  $\text{CuO}_2$  Ebenen in eindimensionale Ketten und Leitern unterteilt. Hier besteht die Hoffnung, anhand dieser Materialien mehr über stark korrelierte Systeme und evtl. den Mechanismus der Hochtemperatur-Supraleitung zu lernen.

E. Dagotto et al. und T. M. Rice et al. haben vorgeschlagen, daß Spin-Leitern aus zwei Ketten eine Energielücke im Anregungsspektrum aufweisen sollten [23 - 26]. Weiterhin haben sie vorausgesagt, daß bei leichter Dotierung dieser Kuprate die Energielücke bestehen bleibt und Supraleitung auftritt. Sie haben dabei angenommen, daß jeweils zwei Löcher auf einer Sprosse zusammen ein Spin-Singulett und somit eine Art Cooper-Paar bilden.

Das erste Material, das man nach diesen Voraussagen auf die Existenz einer Energielücke im Anregungsspektrum der Spins (Spin-Gap) hin untersucht hat, war  $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ <sup>6</sup>. Mit inelastischer Neutronenstreuung wurde eine Energielücke von 3,7 meV nachgewiesen [27].

Bei einigen unter hohem Druck synthetisierten Kupraten kann man in den  $\text{CuO}_2$  Ebenen Frustrationslinien erkennen. Entlang dieser Linien sind die  $\text{Cu}^{2+}$  Ionen um  $-a/2\mathbf{e}_x - a/2\mathbf{e}_y$  gegen ihre normale Lage in den  $\text{CuO}_2$  Ebenen versetzt. Dadurch liegen jeweils drei ungefähr gleich weit entfernte lokalisierte Spins entlang einer Linie vor. Diese können entlang der Linie keine antiferromagnetische Ordnung bilden, sie sind frustriert. Je nachdem, wie dicht die Linien aufeinander folgen, teilen diese Frustrationslinien so die  $\text{CuO}_2$  Ebenen in eindimensionale zwei- oder mehrholmige Spinleitern.

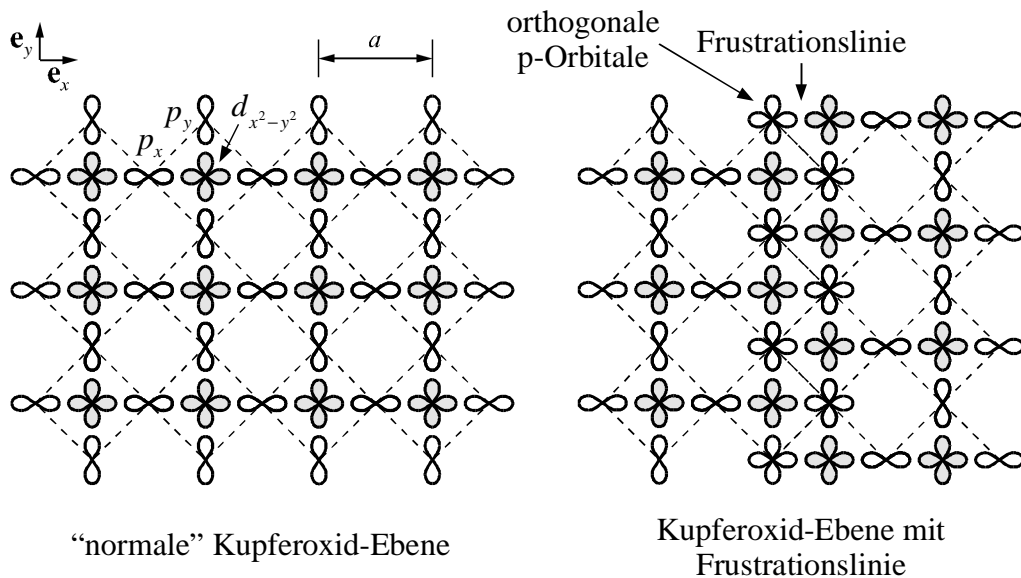


Abb. 1.6: Bei unter hohem Druck synthetisierten Kupraten existieren sogenannte Frustrationslinien. Entlang diesen sind die  $\text{Cu}^{2+}$  Ionen um  $-a/2\mathbf{e}_x - a/2\mathbf{e}_y$  gegen ihre normale Lage in der Kupferoxid-Ebene verschoben, dort kann sich keine antiferromagnetische Ordnung ausbilden, die Spins sind frustriert.

Diesen Sachverhalt kann man auch wie folgt verstehen: In einer "normalen" Kupferoxid-Ebene kommt die Spin-Spin-Wechselwirkung zweier benachbarter Kupfer-Spins durch einen Super-Austausch-Prozess der beteiligten lokalisierten Elektronen über das dazwischen liegende Sauerstoff-Orbital zustande. Das setzt voraus, daß ein Überlapp von einem Kupfer-Orbital zum Sauerstoff-Orbital vorliegt, das seinerseits mit dem zweiten Kupfer-Orbital überlappen muß. Entlang einer Frustrationslinie existiert zwar ein Überlapp zwischen Kupfer-Orbitalen und Sauerstoff-Orbitalen. Aufgrund der Orthogonalität

<sup>6</sup> Ansichten der hier diskutierten Kristalle finden sich im Anhang A.

der Sauerstoff  $p_x$  und  $p_y$ -Orbitale findet aber in erster Ordnung kein Super-Austausch-Prozeß über die Linie hinweg statt. Die Spin-Konfiguration auf der einen Seite der Frustrationslinie ist deshalb unabhängig von derjenigen der anderen Seite.

Materialien bei denen genau das der Fall ist, sind  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$  und  $(\text{Sr,Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ . Die beiden Materialien mit zweiholmigen Leitern  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$  und  $(\text{Sr,Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  weisen wie erwartet ein Spin-Gap auf [28,29,30]. Die dreiarmligen Leitern in  $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$  besitzen dagegen kein Spin-Gap [29].

Es existieren aber auch Materialien, bei denen die eindimensionalen Strukturen nicht durch Frustrationslinien in den  $\text{CuO}_2$  Ebenen entstehen, sondern einfach durch genügend große Zwischenräume. Dazu gehören  $\text{Ca}_2\text{CuO}_3$ ,  $\text{SrCuO}_2$ ,  $\text{LaCuO}_{2,5}$  und die Ketten in  $(\text{Sr,Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ . Von  $\text{Ca}_2\text{CuO}_3$  und  $\text{Ca}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  liegen bis jetzt noch keine genauen Messungen in bezug auf das magnetische Verhalten der darin enthaltenen Ketten vor. Interessanterweise besitzt aber die Kette in  $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  entgegen den Erwartungen ein Spin-Gap [30,31,32].  $\text{LaCuO}_{2,5}$  besteht aus zweiholmigen Leitern und zeigt unterhalb von  $T_N \approx 110 \text{ K}$  eine antiferromagnetische Ordnung. Dafür dürfte die große Kopplung zwischen den einzelnen Leitern verantwortlich sein [33]. Ebenfalls eine antiferromagnetische Ordnung zeigen die Zickzack-Ketten in  $\text{SrCuO}_2$  [20], hier aber erst ab einer wesentlich geringeren Temperatur von  $T_c \approx 2 \text{ K}$ .

Aufgrund der Voraussage von Supraleitung bei dotierten zweiholmigen Leitern wurden diese untersucht. Bei  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$  bleibt bei Dotierung mit Lanthan das Spin-Gap erhalten und es tritt keine Supraleitung auf [29]. Bei  $\text{LaCuO}_{2,5}$  zerstört die Dotierung mit Strontium die antiferromagnetische Ordnung [33]. Dotierung von  $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  mit Yttrium führt zur Verkleinerung des Spin-Gaps [32]. Das erste Material, das zweiholmige Leitern enthält und bei Dotierung supraleitend wird, ist  $\text{Ca}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  [22]. Die Sprungtemperaturen liegen bei Dotierung mit Strontium zwischen  $T_c \approx 9 \text{ K}$  und  $T_c \approx 12 \text{ K}$ .

Um den Überblick über die Vielfalt der Materialien und deren Eigenschaften nicht zu verlieren, ist es sinnvoll, diese in einer Tabelle zusammenzustellen.

Mit dem Begriff Plakette ist immer ein Kupferatom und die vier umgebenden Sauerstoffatome gemeint.

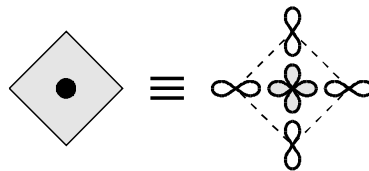

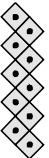
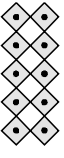
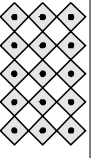
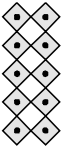






Abb. 1.7: Symbolische Darstellung einer Plakette. Diese besteht aus einem Kupferatom und vier umgebenden Sauerstoffatomen.

Material	Typ	Plaketten-anordnung	Magnetische Eigenschaften	Verhalten bei Dotierung
$(VO)_2P_2O_7$	zweiholmige Leiter	kein Kuprat	Spin-Lücke mit $\sim 3,7$ meV	kein Kuprat
$Ca_2CuO_3$	lineare Kette		?	?
$SrCuO_2$	zickzack Kette		antiferromagnetische Ordnung unter $T_c \sim 2$ K	?
$SrCu_2O_3$	zweiholmige Leiter		Spin-Lücke mit $\sim 680$ K	mit La, Spin-Lücke bleibt, keine Supraleitung
$Sr_2Cu_3O_5$	dreiholmige Leiter		keine Spin-Lücke	?
$LaCuO_{2.5}$	zweiholmige Leiter		antiferromagnetische Ordnung unter $T_N \sim 110$ K	mit Sr, zerstört antiferromagnetische Ordnung
$Sr_{14}Cu_{24}O_{41}$	lineare Kette		Spin-Lücke mit $\sim 11$ meV	mit Y, Spin-Lücke verschwindet
	zweiholmige Leiter		Spin-Lücke mit $\sim 35$ meV	
$Ca_{14}Cu_{24}O_{41}$	lineare Kette		?	mit Sr, Supraleitung tritt auf mit $T_c \sim 9 - 12$ K
	zweiholmige Leiter		?	



## 2 Mikroskopische Modelle

### 2.1 Kupferoxid-Ketten und Leitern

Die einfachsten, realistischen mikroskopischen Modelle, die auch Ladungsträger auf den Sauerstoffatomen berücksichtigen, sind die Kupferoxid-Kette und die zweiholmige Kupferoxid-Leiter. Die in Abb. 2.1 dargestellte Kupferoxid-Kette ist z.B. in  $\text{Ca}_2\text{CuO}_3$  realisiert. Zweiholmige Kupferoxid-Leitern der dargestellten Form existieren in mehreren Materialien.

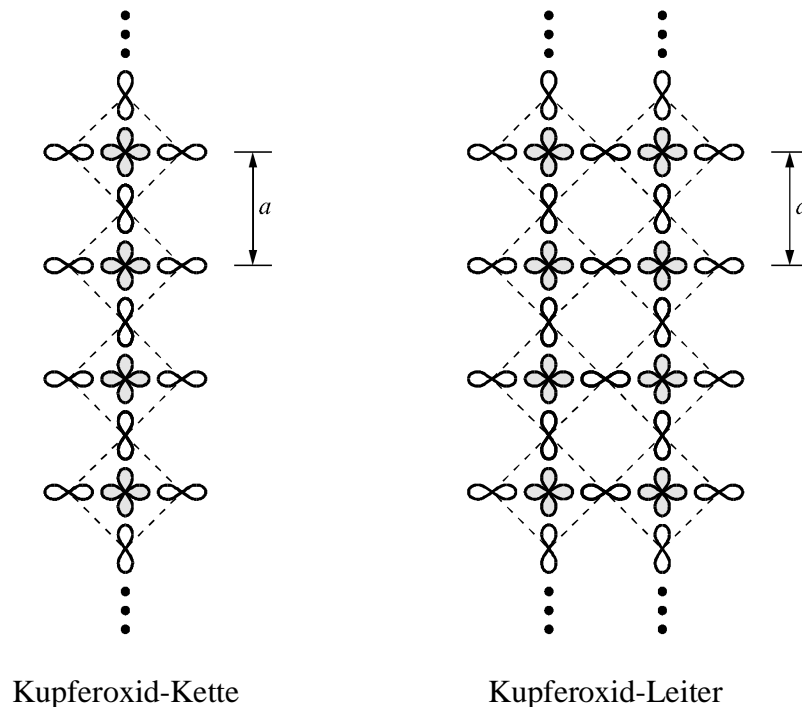


Abb. 2.1: Die beiden einfachsten realistischen Modelle, die auch dotierte Systeme aus Kupferoxid-Ketten und Kupferoxid-Leitern beschreiben.

Hierbei stellt die Kupferoxid-Kette den typischen Vertreter von Spin-Fermion-Leitern mit ungerader Kettenzahl dar. Entsprechend ist die in Abb. 2.1 abgebildete Spin-Fermion-Leiter der typische Vertreter von gekoppelten Spin-Fermion-Ketten mit gerader Kettenzahl.

Es sei darauf hingewiesen, daß die Kupferoxid-Ketten in  $(\text{Sr,Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  eine andere Struktur aufweisen, als die in dieser Arbeit betrachtete Kette.

## 2.2 Spin-Fermion-Modell für eine Kette

Als Ausgangspunkt der Betrachtungen soll wie bei der Behandlung von Kupferoxid-Ebenen [36] das Dreiband-Hubbard-Modell dienen. Es lautet für eine Kupferoxid Kette

$$\begin{aligned}
 H = & \varepsilon_p \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \varepsilon_d \sum_{i,\sigma} d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + \\
 & + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (d_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.) + \sum_{\langle j,j' \rangle} \bar{t}_{j'j} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow}^d n_{i,\downarrow}^d
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Hierbei sind  $d_{i,\sigma}^\dagger$  und  $d_{i,\sigma}$  Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Löcher auf den Kupferplätzen sowie  $c_{j,\sigma}^\dagger$  und  $c_{j,\sigma}$  Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Löcher auf den Sauerstoffplätzen.  $n_{i,\sigma}^d = d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma}$  ist der Anzahloperator für Löcher auf den Kupferplätzen. Der dritte Term des Modells beschreibt ein Hüpfen zwischen direkt benachbarten Kupfer- und Sauerstoffplätzen und der vierte ein Hüpfen zwischen direkt benachbarten Sauerstoffplätzen. Weitere Hüpfprozesse führen zu übernächsten Nachbarn, sie sollen deshalb nicht berücksichtigt werden. Unter Beachtung der Phasen, der an den Hüpfprozessen beteiligten Orbitale

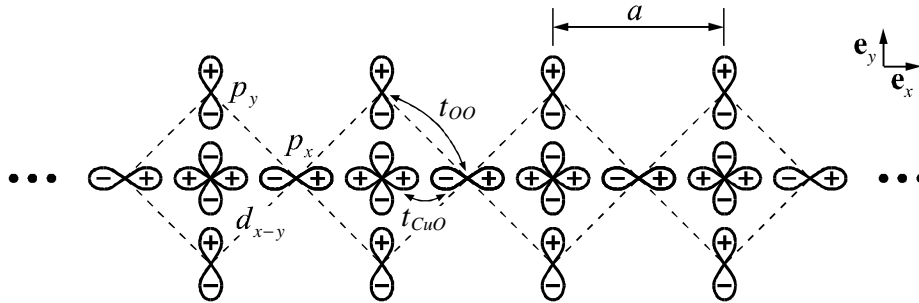


Abb. 2.2: Relative Phasen der bei den Hüpfprozessen beteiligten Kupfer- und Sauerstoff-Orbitale.

ergeben sich folgende Ausdrücke für die Hüpfmatrixelemente:

$$\begin{aligned}
 t_{ij} &= (-1)^{\alpha_{ij}} t_{CuO} \\
 \bar{t}_{j'j} &= (-1)^{\beta_{j'j}} t_{OO}
 \end{aligned}$$

Die hierbei auftretenden Phasenfaktoren sind

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } j = i + \frac{1}{2} a \mathbf{e}_x \text{ oder } j = i - \frac{1}{2} a \mathbf{e}_y \\ 2 & \text{für } j = i - \frac{1}{2} a \mathbf{e}_x \text{ oder } j = i + \frac{1}{2} a \mathbf{e}_y \end{cases}$$

$$\beta_{jj'} = \begin{cases} 1 & \text{für } j' = j - \frac{1}{2}a \mathbf{e}_x - \frac{1}{2}a \mathbf{e}_y \quad \text{oder} \quad j' = j + \frac{1}{2}a \mathbf{e}_x + \frac{1}{2}a \mathbf{e}_y \\ 2 & \text{für } j' = j + \frac{1}{2}a \mathbf{e}_x - \frac{1}{2}a \mathbf{e}_y \quad \text{oder} \quad j' = j - \frac{1}{2}a \mathbf{e}_x + \frac{1}{2}a \mathbf{e}_y \end{cases}$$

Der letzte Term von (2.1) trägt der starken Korrelation, d.h. der Coulomb-Abstoßung zweier Löcher auf einem Kupferplatz Rechnung.

Die für eine störungstheoretische Behandlung wichtigen Eigenschaften des Modells sind folgende: Bei halber Bandfüllung, d.h. im undotierten Fall sind alle Löcher auf den Kupferplätzen lokalisiert, was durch eine große Hubbard-Wechselwirkung erreicht wird<sup>7</sup>. Bei Dotierung ändert sich dieses Verhalten nicht, deshalb entstehen an den Sauerstoffplätzen Löcher, das bedeutet  $U \gg \varepsilon_p > \varepsilon_d$ . Weil die charge-transfer Energie  $\Delta = \varepsilon_p - \varepsilon_d$  groß gegenüber der kinetischen Energie  $t$  ist [37], kann eine Entwicklung nach  $t^2/\Delta$  durchgeführt werden.

Mit den zwei entarteten Zuständen  $|i, \uparrow\rangle$  und  $|i, \downarrow\rangle$  bei den Kupferatomen als Modellraum [38] folgt mit  $U \gg \Delta \gg t$  bei Entwicklung bis zur Ordnung  $\mathcal{O}(t^4)$  das Spin-Fermion-Modell [39,40].

$$H = \sum_{\substack{\langle j,j' \rangle \\ \sigma}} \bar{t}_{jj'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} + \tilde{t} \sum_{\substack{\langle j,j':i \rangle \\ \sigma}} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} + J_K \sum_i \mathbf{R}_i \mathbf{S}_i + J_H \sum_{\langle i,i' \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i'} \quad (2.2)$$

Hierbei ist

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} d_{i,\sigma}^\dagger \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} d_{i,\sigma'}$$

der Spin-Operator und

$$\mathbf{R}_i = \sum_{\substack{\langle j,j':i \rangle \\ \sigma,\sigma'}} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j,\sigma}^\dagger \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{j',\sigma'} \quad (2.3)$$

Die Matrixelemente des Spin-Fermion-Modells, durch die des Dreiband-Hubbard-Modells ausgedrückt, sind

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= \frac{t_{CuO}^2}{2} \left( \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{U - \Delta} \right) \\ J_K &= t_{CuO}^2 \left( \frac{1}{\Delta} + \frac{1}{U - \Delta} \right) \\ J_H &= 4 t_{CuO}^4 \left( \frac{1}{\Delta^3} + \frac{2}{\Delta^2 U} \right). \end{aligned}$$

<sup>7</sup> Hierbei ist  $\varepsilon_p > \varepsilon_d$  zu beachten.

Der erste Term des Spin-Fermion-Modells beschreibt ein Hüpfen von Löchern von einem Sauerstoff-Platz zum nächsten. Beim zweiten Term bewegen sich die Löcher dagegen nur innerhalb der einzelnen Plaketten.

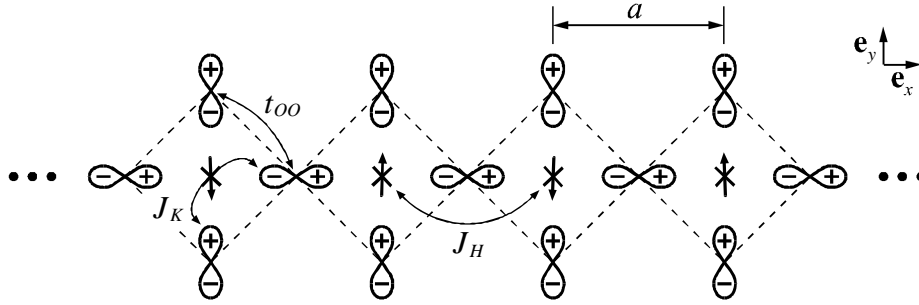


Abb. 2.3: Hüpf- und Wechselwirkungsprozesse des Spin-Fermion-Modells.

Hüpfen Löcher von einem zum nächsten Sauerstoffplatz, können sie auch einen Spin-Umklapp erfahren. Dieser Spin-Umklapp-Prozeß hängt von der Richtung des lokalisierten Spins im Zentrum der Plakette ab. Eine Wechselwirkung von hüpfenden Fermionen mit lokalisierten Spins nennt man Kondo-Wechselwirkung.

Beim vierten Term von (2.2) handelt es sich um eine Spin-Spin-Wechselwirkung zwischen direkt benachbarten lokalisierten Spins, also eine Heisenberg-Wechselwirkung.

Verschwindet die Dotierung, entfallen alle Terme mit fermionischen Anteilen. Dann ist das Spin-Fermion-Modell gleich dem Heisenberg-Modell.

Im folgenden werden die Begriffe Löcher und Fermionen synonym verwendet.

## 2.3 Spin-Fermion-Modell für eine Leiter

Bei zwei gekoppelten Kupferoxid-Ketten könnte man natürlich auch wieder vom Dreiband-Hubbard-Modell (2.1) ausgehen. Aus diesem wäre dann mit Hilfe der Störungstheorie das Spin-Fermion-Modell für zwei gekoppelte Ketten, d.h. eine Leiter abzuleiten. Dieser Schritt soll hier aber übersprungen werden. Ausgangspunkt der Betrachtungen ist folgender Hamilton-Operator:

$$H = \sum_{\langle j,j' \rangle} \bar{t}_{j,j'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} + \tilde{t} \sum_{\langle j,j';i \rangle} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} + J_K \sum_i \mathbf{R}_i \mathbf{S}_i + \sum_{\langle i,i' \rangle} J_{ii'} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i'}$$

Hierbei läuft  $i$  über alle Kupferplätze in beiden Ketten, und die Kopplungskonstante des Heisenberg-Terms ist

$$J_{ii'} = \begin{cases} J_{\parallel} & \text{für } i \text{ und } i' \text{ in der selben Kette} \\ J_{\perp} & \text{für } i \text{ und } i' \text{ in verschiedenen Ketten.} \end{cases}$$

Im Normalfall sollte man davon ausgehen können, daß die Spin-Spin-Kopplung entlang der Ketten und quer zu den Ketten gleich ist. Für theoretische Untersuchungen ist es aber trotzdem sinnvoll beide Kopplungskonstanten vorerst separat zu behandeln.

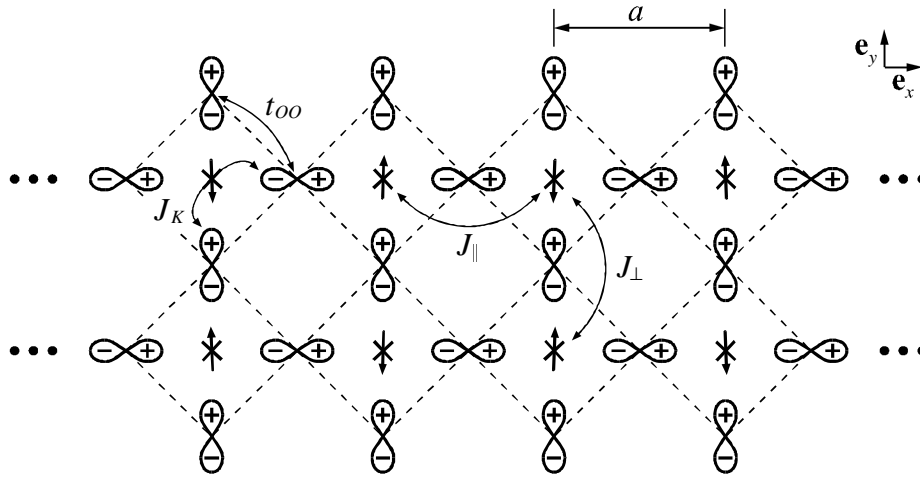


Abb. 2.4: Hüpf- und Wechselwirkungsprozesse des Spin-Fermion-Modells bei einer Leiter.

## 2.4 Mit Experimenten konsistenter Parametersatz

Aus dem direkten Vergleich von Quanten-Monte-Carlo Resultaten bei 4x4 Elementarzellen, d.h. 48 Plätzen, mit experimentellen Werten der charge-transfer Energie  $\Delta = \varepsilon_p - \varepsilon_d$  in den Kupferoxid-Ebenen von "normalen" HTC's, folgt ein Parametersatz für das Dreiband-Hubbard-Modell [37]. Dieser lautet

$$U = 6 t_{CuO} \quad \Delta = 4 t_{CuO} \quad t_{OO} = -0,5 t_{CuO} \quad (2.4)$$

wobei  $t_{CuO} \approx 1,3 \text{ eV}$  beträgt. Für die Parameter des Spin-Fermion-Modells bedeutet das

$$\tilde{t} = -\frac{1}{8} t_{CuO} \approx -0,1 t_{CuO} \quad J_K = \frac{3}{4} t_{CuO} \approx 0,7 t_{CuO} \quad J_H = \frac{5}{48} t_{CuO} \approx 0,1 t_{CuO}.$$

In der vorliegenden Arbeit wird bei Bandberechnungen angenommen, daß diese Werte auch die hier behandelten eindimensionalen Systeme einigermaßen gut beschreiben.

## 3 Kontinuumsübergang bei einer Kette

### 3.1 Kontinuumsübergang für die Spins

Das klassische nichtlineare  $\sigma$ -Modell beschreibt nach S. Chakravarty, B. I. Halperin und D. R. Nelson [4] die zweidimensionalen Spin-Fluktuationen sehr gut<sup>8</sup>. Eine Möglichkeit aus dem zweidimensionalen Heisenberg-Modell das nichtlineare  $\sigma$ -Modell abzuleiten, haben A. Angelucci und G. Jug ausgearbeitet [5]. Ihre Methode wurde von C. Kübert [36] so auf das zweidimensionale Spin-Fermion-Modell erweitert, daß sich nicht nur das nichtlineare  $\sigma$ -Modell ergibt, sondern auch die Kopplung von diesem mit den Fermionen. Hier soll nun mit der selben Methode das eindimensionale nichtlineare  $\sigma$ -Modell und dessen Kopplung mit den Fermionen hergeleitet werden.

Die Zustandssumme für das Spin-Fermion-Modell

$$H = \overbrace{\sum_{\substack{\langle j,j' \rangle \\ \sigma}} \bar{t}_{jj'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} + \tilde{t} \sum_{\substack{\langle j,j':i \rangle \\ \sigma}} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}}^{\equiv H_F} + \overbrace{J_K \sum_i \mathbf{R}_i \mathbf{S}_i}^{\equiv H_{FS}} + \overbrace{J_H \sum_{\langle i,i' \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i'}}^{\equiv H_S}$$

kann wegen der Faktorierbarkeit wie folgt angeschrieben werden:

$$Z = \text{Tr}_{\{FS\}} e^{-\beta H} = \text{Tr}_{\{FS\}} e^{-\beta(H_F + H_{FS} + H_S)} = \text{Tr}_{\{F\}} \left( e^{-\beta H_F} \text{Tr}_{\{S\}} e^{-\beta(H_{FS} + H_S)} \right)$$

Die erste Spur über die fermionischen Zustände schreibt man einfach in ein Pfadintegral um [41,42]. Bei der zweiten Spur über die Spin-Zustände entkoppelt man den Heisenberg-Term durch eine Hubbard-Stratonovich Transformation. Dazu schreibt man den Heisenberg-Term  $H_S$  wie folgt an

$$H_S = -\frac{J_H}{2} \sum_{\langle i,i' \rangle} (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_{i'})^2 + \text{const.}$$

und transformiert in den Impulsraum, was

$$H_S = -2 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \quad \text{mit} \quad f(\mathbf{k}) = J_H (1 - \cos k a)$$

ergibt. Jetzt kann die Hubbard-Stratonovich Transformation, bei der es sich um eine Gaußsche Integration [41] handelt, für kleine  $\varepsilon$  ausgeführt werden.

---

<sup>8</sup> siehe hierzu auch Kapitel 1.4

$$\begin{aligned} \exp\left\{\varepsilon 2 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{-\mathbf{k}}\right\} &= \\ &= \int D\underline{\phi} \exp\left\{-\varepsilon 2 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \underline{\phi}_{\mathbf{k}} \underline{\phi}_{-\mathbf{k}} - \varepsilon 4 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \underline{\phi}_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{-\mathbf{k}}\right\} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Keht man in den Ortsraum zurück, folgt die Identität

$$\begin{aligned} \exp\left\{\varepsilon \frac{J_H}{2} \sum_{\langle i, i' \rangle} J_{ii'} (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_{i'})^2\right\} &= \\ &= \int D\underline{\phi} \exp\left\{-\varepsilon \frac{J_H}{2} \sum_{\langle i, i' \rangle} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'})^2 - 2\varepsilon J_H \sum_{\langle i, i' \rangle} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'}) \mathbf{S}_i\right\}. \end{aligned}$$

Dadurch erhält man zusätzlich ein Funktionalintegral über ein sogenanntes Hubbard-Stratonovich-Feld  $\underline{\phi}$ , an das jetzt die einzelnen Spins koppeln. Insgesamt kann man so die Zustandssumme als Funktionalintegral schreiben.

$$Z = \int D\underline{\phi} Dc^\dagger Dc e^{-S}$$

$$S = -\int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger \frac{\partial}{\partial \tau} c_{j,\sigma} - H_F - \frac{J_H}{2} \sum_{\langle i, i' \rangle} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'})^2 + \sum_i \ln Z_i \right]$$

Hierbei ist die Einteilchen-Zustandssumme durch

$$Z_i = \text{Tr} \left[ T \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \left( 2J_H \sum_{\langle i', i \rangle} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'}) + J_K \mathbf{R}_i \right) \mathbf{S}_i \right\} \right]$$

mit dem Zeitordnungsoperator  $T$  gegeben.

Mit der Methode der verallgemeinerten Berry-Phasen<sup>9</sup> [5] bestimmt man diese. Unter Verwendung der Abkürzung

$$\underline{\Phi}_i = \underline{\Psi}_i + J_K \mathbf{R}_i = 2J_H \sum_{\langle i', i \rangle} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'}) + J_K \mathbf{R}_i \quad (3.2)$$

handelt es sich dabei formal um die Zustandssumme eines Spins  $\mathbf{S}_i$  in einem äußeren Magnetfeld  $\underline{\Phi}_i$ . Im Grenzfall tiefer Temperaturen bekommt man die Wirkung

<sup>9</sup> zur "Berry-Phase" siehe [43]

$$\begin{aligned}
S = - \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger \frac{\partial}{\partial \tau} c_{j,\sigma} - H_F - \frac{J_H}{2} \sum_{\langle i,i' \rangle} (\phi_{\underline{i}} - \phi_{\underline{i}'})^2 + \right. \\
\left. + s \sum_i |\underline{\Phi}_i|^2 - i s \sum_i A_i^\alpha [\underline{\Phi}_i] \frac{d \Phi_i^\alpha}{d \tau} - s \sum_i M_i^{\alpha\beta} [\underline{\Phi}_i] \frac{d \Phi_i^\alpha}{d \tau} \frac{d \Phi_i^\beta}{d \tau} + \dots \right].
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Das Vektorpotential  $A^\alpha [\underline{\Phi}]$  in der Berry-Phase gehorcht der Bestimmungsgleichung des diracschen Monopol-Potentials<sup>10</sup>

$$\frac{\delta A^\beta [\underline{\Phi}]}{\delta \Psi^\alpha} - \frac{\delta A^\alpha [\underline{\Phi}]}{\delta \Psi^\beta} = \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \frac{\Phi^\gamma}{|\underline{\Phi}|^3}.$$

Die Matrix der ersten verallgemeinerten Berry-Phase ist durch

$$M^{\alpha\beta} = \frac{1}{2|\underline{\Phi}|^3} (\delta^{\alpha\beta} - e^\alpha e^\beta) \quad \text{mit} \quad e^\alpha = \frac{\Phi^\alpha}{|\underline{\Phi}|}$$

gegeben. Wie man zu diesen Beziehungen gelangt, ist in [5] und v.a. [36] dargestellt. Die Ausdrücke in der Wirkung, die den Faktor (3.2) enthalten, können jetzt nach Potenzen von  $J_K \mathbf{R}_i$  entwickelt werden. Alle Potenzen von  $\mathbf{R}_i$  höher als zwei verschwinden wegen der Eigenschaften der Grassmann-Variablen. Siehe hierzu auch [36]. Das Resultat dieser Entwicklung ist deshalb eine exakte Umformung von (3.3).

$$S = - \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger \frac{\partial}{\partial \tau} c_{j,\sigma} - H_F \right] - S_q - S_{st} - S_1 - S_2 + \dots$$

$$S_q = \frac{J_H}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_{\langle i,i' \rangle} (\phi_{\underline{i}} - \phi_{\underline{i}'})^2$$

$$S_{st} = -s \int_0^\beta d\tau \sum_i |\underline{\Phi}_i|^2 = -s \int_0^\beta d\tau \sum_i |\underline{\Psi}_i| \left( 1 + J_K \frac{(\underline{\Psi}_i \cdot \mathbf{R}_i)}{|\underline{\Psi}_i|^2} + \frac{J_K^2 |\mathbf{R}_i|^2}{3 |\underline{\Psi}_i|^2} \right)$$

$$S_1 = i s \int_0^\beta d\tau \sum_i A_i^\alpha [\underline{\Phi}_i] \frac{d \Phi_i^\alpha}{d \tau}$$

<sup>10</sup> zum magnetischen Monopol siehe Anhang E



$$S_1 = i s \int_0^\beta d\tau \sum_i \left( A_i^\alpha [\underline{\Psi}_i] \frac{d \underline{\Psi}_i^\alpha}{d\tau} - J_K \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \frac{R_i^\alpha \underline{\Psi}_i^\beta}{|\underline{\Psi}_i|^3} \frac{d \underline{\Psi}_i^\gamma}{d\tau} + \frac{J_K^2}{2} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \frac{\underline{\Psi}_i^\alpha}{|\underline{\Psi}_i|^3} R_i^\beta \frac{d R_i^\gamma}{d\tau} \right)$$

Bei der Wirkung  $S_2$  ist es hilfreich, den Anteil, in dem nur Terme mit gerader Anzahl  $\underline{\Psi}_i^\alpha$  vorkommen, von dem Anteil der Terme mit ungerader Anzahl  $\underline{\Psi}_i^\alpha$  zu unterscheiden.

$$S_2 = s \int_0^\beta d\tau \sum_i M_i^{\alpha\beta} [\underline{\Phi}_i] \frac{d \Phi_i^\alpha}{d\tau} \frac{d \Phi_i^\beta}{d\tau} = S_2^g + S_2^u$$

$$\begin{aligned} S_2^g = s \int_0^\beta d\tau \sum_i & \left( \frac{1}{2|\underline{\Psi}_i|^3} \left( \delta^{\alpha\beta} - \frac{\underline{\Psi}_i^\alpha \underline{\Psi}_i^\beta}{|\underline{\Psi}_i|^2} \right) \left( \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) + \frac{J_K^2}{2|\underline{\Psi}_i|^3} \left( \frac{d \mathbf{R}_i}{d\tau} \frac{d \mathbf{R}_i}{d\tau} \right) + \right. \\ & + \frac{J_K^2 |\mathbf{R}_i|^2}{3|\underline{\Psi}_i|^5} \left( \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) - \frac{3J_K^2}{|\underline{\Psi}_i|^5} (\underline{\Psi}_i \mathbf{R}_i) \left( \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \frac{d \mathbf{R}_i}{d\tau} \right) - \\ & - \frac{J_K^2}{|\underline{\Psi}_i|^5} \left( \underline{\Psi}_i \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) \left( \mathbf{R}_i \frac{d \mathbf{R}_i}{d\tau} \right) - \frac{J_K^2}{|\underline{\Psi}_i|^5} \left( \underline{\Psi}_i \frac{d \mathbf{R}_i}{d\tau} \right) \left( \mathbf{R}_i \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) - \\ & \left. - \frac{5J_K^3}{|\underline{\Psi}_i|^7} (\underline{\Psi}_i \mathbf{R}_i) \left( \underline{\Psi}_i \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) \left( \mathbf{R}_i \frac{d \mathbf{R}_i}{d\tau} \right) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_2^u = s \int_0^\beta d\tau \sum_i & \left( \frac{J_K}{|\underline{\Psi}_i|^3} \left( \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \frac{d \mathbf{R}_i}{d\tau} \right) - \frac{J_K}{2|\underline{\Psi}_i|^5} (\underline{\Psi}_i \mathbf{R}_i) \left( \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) - \right. \\ & - \frac{J_K}{|\underline{\Psi}_i|^5} \left( \underline{\Psi}_i \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) \left( \underline{\Psi}_i \frac{d \mathbf{R}_i}{d\tau} \right) - \frac{J_K}{|\underline{\Psi}_i|^5} \left( \underline{\Psi}_i \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) \left( \mathbf{R}_i \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) + \\ & \left. + \frac{5J_K}{2|\underline{\Psi}_i|^7} (\underline{\Psi}_i \mathbf{R}_i) \left( \underline{\Psi}_i \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) \left( \underline{\Psi}_i \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} \right) \right) \end{aligned}$$

Die klassische Wirkung des Hubbard-Stratonovich-Feldes

$$\begin{aligned} S &= \int_0^\beta d\tau L \\ L &= \frac{J_H}{2} \sum_{\langle i, i' \rangle} (\phi_{\underline{i}} - \phi_{\underline{i}'})^2 - s \sum_i |\underline{\Psi}_i| = \frac{J_H}{2} \sum_{\langle i, i' \rangle} (\phi_{\underline{i}} - \phi_{\underline{i}'})^2 - s \sum_i \left| \sum_{(i':i)} 2 J_H (\phi_{\underline{i}} - \phi_{\underline{i}'}) \right| \end{aligned}$$

liefert eine Bewegungsgleichung. Deren niederenergetischste Lösung ist eine antiferromagnetische Anordnung

$$\underline{\phi}_i = s(-1)^i \mathbf{n}_i \quad \text{mit} \quad |\mathbf{n}_i|^2 = 1,$$

mit  $\mathbf{n}_i$  als Ordnungsparameter des Feldes. Unter der Annahme, daß nur langwellige Fluktuationen der Kupfer-Spins vorkommen, entwickelt man den Ordnungsparameter bis zur dritten Ordnung  $\mathcal{O}(a^3)$  der Gitterkonstanten.

$$\mathbf{n}_{i'} = \mathbf{n}_i + a_{ii'} \frac{\partial \mathbf{n}_i}{\partial x} + \frac{1}{2!} a_{ii'}^2 \frac{\partial^2 \mathbf{n}_i}{\partial x^2} + \mathcal{O}(a^3) \quad ; \quad a_{ii'} = (\theta(i'-i) - \theta(i-i'))a$$

Mit dieser Entwicklung ersetzt man in den oben abgeleiteten Wirkungen das Hubbard-Stratonovich-Feld  $\underline{\phi}_i$ . Für  $\underline{\Psi}_i$  gilt dabei

$$\underline{\Psi}_i = 2 J_H \sum_{(i';i)} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'}) = (-1)^i 4 J_H s z \mathbf{n}_i \left( 1 + \frac{a^2}{2z} \frac{\mathbf{n}_i \partial_x^2 \mathbf{n}_i}{|\mathbf{n}_i|^2} \right) + \mathcal{O}(a^3).$$

Es ist sinnvoll, die Kopplungskonstanten durch Geschwindigkeiten auszudrücken, da diese beim Kontinuumsübergang  $a \rightarrow 0$  konstant bleiben.

$$v_H = J_H a = \text{const.}$$

$$v_K = J_K a = \text{const.}$$

Danach genügt es, nur Terme bis zur ersten Ordnung in der Gitterkonstanten zu berücksichtigen. Hierbei ist zu beachten, daß

$$\sum_{(i';i)} 1 = z \quad \sum_{(i';i)} a_{ii'} = 0 \quad \sum_{(i';i)} a_{ii'}^2 = 2a^2.$$

Wegen  $|\mathbf{n}_i|^2 = 1$  zeigt der Ordnungsparameter  $\mathbf{n}_i$  immer auf die Oberfläche der Einheitskugel, deshalb gilt

$$\mathbf{n}_i \frac{d \mathbf{n}_i}{d\tau} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \underline{\Psi}_i \frac{d \underline{\Psi}_i}{d\tau} = 0,$$

was zu einem weiteren Wegfall von Termen führt. Für die ersten beiden Wirkungen folgt so

$$S_q = v_H s^2 a \int_0^\beta d\tau \sum_i \left[ \frac{2z}{a^2} |\mathbf{n}_i|^2 - \left( \frac{d \mathbf{n}_i}{d x} \right)^2 \right] + \mathcal{O}(a^2)$$

$$S_{st} = 2v_H s^2 a \int_0^\beta d\tau \sum_i \left[ -\frac{2}{a^2} |\mathbf{n}_i|^2 + \left( 1 - \frac{1}{3} \frac{v_K^2 |\mathbf{R}_i|^2}{(4v_H s z)^2} \right) \left( \frac{d\mathbf{n}_i}{d\tau} \right)^2 - \frac{1}{2a^2} \frac{v_K}{v_H s} (-1)^i (\mathbf{n}_i \mathbf{R}_i) - \frac{1}{6a^2} \frac{v_K^2 |\mathbf{R}_i|^2}{(2v_H s)^2 z} \right] + \mathcal{O}(a^3).$$

Die ersten Terme von  $S_q$  und  $S_{st}$  liefern beim Pfadintegral einen konstanten Faktor, der keine physikalische Relevanz hat<sup>11</sup>. Man läßt sie deshalb weg. Der letzten Term von  $S_{st}$  stellt eine repulsive Wechselwirkung

$$S_{st} = -\frac{1}{a} \frac{v_K^2}{12v_H z} \int_0^\beta d\tau \sum_i |\mathbf{R}_i|^2 = \frac{8}{a} \frac{v_K^2}{v_H z} \int_0^\beta d\tau \sum_i \tilde{c}_{i,\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{i,\uparrow} \tilde{c}_{i,\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{i,\downarrow}$$

$$\tilde{c}_{i,\mu}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{(j;i)} (-1)^{\alpha_{ij}} c_{j,\mu}^\dagger$$

zwischen Fermionen am gleichen Gitterplatz  $i$  dar, die wegen ihrer  $1/a$  Abhängigkeit sehr stark ist. Bei schwacher Dotierung kann man auf alle Fälle davon ausgehen, keine zwei Fermionen am gleichen Gitterplatz anzutreffen. Aus diesem Grund kann man alle Terme in den Wirkungen  $S_1$  und  $S_2$  vernachlässigen, in denen mehr als ein Faktor der Form  $\mathbf{R}_i$  oder  $d\mathbf{R}_i/d\tau$  gleichzeitig vorkommt. Bis auf Faktoren, die beim Pfadintegral Konstante liefern, folgt so für  $S_2$ :

$$S_2^g = \frac{a}{8v_H z} \int_0^\beta d\tau \sum_i \left( \frac{d\mathbf{n}_i}{d\tau} \right)^2 + \mathcal{O}(a^2, R^2)$$

$$S_2^u = \mathcal{O}(a^2, R^2)$$

Die Wirkung  $S_1$  besteht aus einem alternierenden  $S_1^{alt}$  und einem nicht alternierenden  $S_1^{n.alt}$  Anteil

$$S_1 = S_1^{alt} + S_1^{n.alt} + \mathcal{O}(a^2, R^2)$$

$$S_1^{alt} = i s \int_0^\beta d\tau \sum_i A_i^\alpha [\Psi_i] \frac{d\Psi_i^\alpha}{d\tau} = i s \int_0^\beta d\tau \sum_i (-1)^i A_i^\alpha [\mathbf{n}_i] \frac{d\mathbf{n}_i}{d\tau}$$

$$S_1^{n.alt} = -i s \frac{v_K}{a} \int_0^\beta d\tau \sum_i \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \frac{R_i^\alpha \Psi_i^\beta}{|\Psi_i|^2} \frac{d\Psi_i^\gamma}{d\tau} = -i \frac{v_K}{4v_H z} \int_0^\beta d\tau \sum_i \mathbf{R}_i \left( \mathbf{n}_i \times \frac{d\mathbf{n}_i}{d\tau} \right).$$

Aus dem alternierenden Anteil folgt mit einer Gradientenentwicklung des Integranden

<sup>11</sup> bei der Bestimmung von Korrelationsfunktionen kürzen sich solche konstante Faktoren heraus

$$S_1^{alt} = i s a \int_0^\beta d\tau \sum_{i=gerade} \frac{d}{dx} \left( A_i^\alpha [\mathbf{n}_i] \frac{d\mathbf{n}_i}{d\tau} \right) = i s a \int_0^\beta d\tau \sum_{i=gerade} \mathbf{n}_i \left( \frac{d\mathbf{n}_i}{dx} \times \frac{d\mathbf{n}_i}{d\tau} \right)$$

ein topologischer Term, der nur ganzzahlige Vielfache von  $2\pi i s$  annehmen kann<sup>12</sup>. Beim Kontinuumsübergang  $a \rightarrow 0$  wird daraus

$$S_{top} \equiv S_1^{alt} = i s a \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2a} \int dx \mathbf{n} \left( \frac{d\mathbf{n}}{dx} \times \frac{d\mathbf{n}}{d\tau} \right) = 2\pi i s Q_{xt} \quad \text{mit } Q_{xt} \in \mathbb{Z}.$$

Im zweidimensionalen Fall [36] entfällt dieser Term.

Der Kontinuumsübergang

$$\sum_i \dots \rightarrow \frac{1}{a} \int dx \dots \quad (3.4)$$

kann an dieser Stelle noch nicht für das gesamte System ausgeführt werden, da das fermionische System noch nicht entsprechend lokal formuliert ist.

Insgesamt bekommt man jetzt folgende Wirkung:

$$\begin{aligned} S = & - \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger \frac{\partial}{\partial \tau} c_{j,\sigma} - \sum_{\langle j,j' \rangle} \bar{t}_{jj'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} + \tilde{t} \sum_{\langle j,j';i \rangle} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \right. \\ & + \frac{v_K s}{a} \sum_i (-1)^i (\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{R}_i) + \\ & + i \frac{v_K}{4 v_H z} \sum_i \mathbf{R}_i \left( \mathbf{n}_i \times \frac{d\mathbf{n}_i}{d\tau} \right) - \\ & - v_H s^2 a \sum_i \left( \left( \frac{d\mathbf{n}_i}{dx} \right)^2 + \left( \frac{d\mathbf{n}_i}{v_S d\tau} \right)^2 \right) - \\ & \left. - i s a \sum_{i=gerade} \mathbf{n}_i \left( \frac{d\mathbf{n}_i}{dx} \times \frac{d\mathbf{n}_i}{d\tau} \right) \right] + \mathcal{O}(a^2, R^2) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Nach diesem Kontinuumsübergang für die Spins des Spin-Fermion-Modells hat sich jetzt folgendes Modell ergeben:

<sup>12</sup> Warum das der Fall ist, wird im Anhang F erklärt.

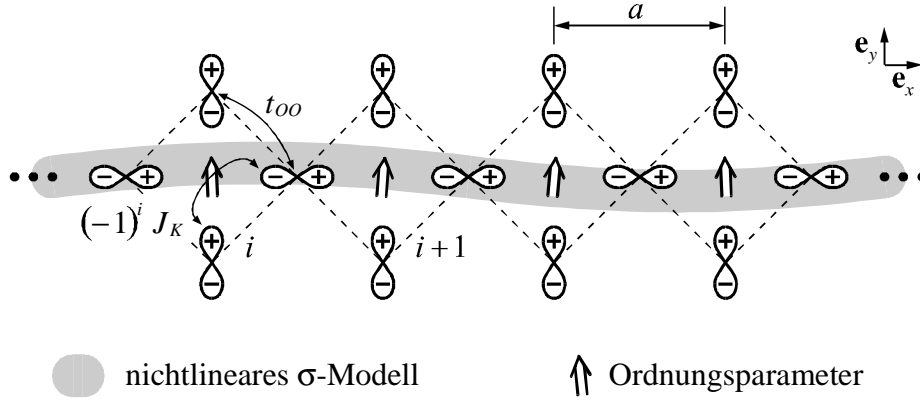


Abb. 3.1: Modell, das nach dem Kontinuumsübergang für die Fermionen folgt.

Die erste Zeile in der Wirkung beschreibt nach wie vor Hüpfprozesse von Fermionen auf den Sauerstoffplätzen. Bei der vierten Zeile handelt es sich um das  $O(3)$  nichtlineare  $\sigma$ -Modell mit der Spinwellen-Geschwindigkeit

$$v_s = 2\sqrt{2} v_H s \sqrt{z}.$$

Bei ihm kann der Kontinuumsübergang (3.4) zu einer Feldtheorie sofort ausgeführt werden. Die Richtung dieses Feldes ist durch den Ordnungsparameter  $\mathbf{n}$  gegeben. Über die Kondo-Wechselwirkung in der zweiten Zeile und die Berry-Phase in der dritten koppelt das nichtlineare  $\sigma$ -Modell an die hüpfenden Fermionen. In der letzten Zeile steht schließlich der topologische Term. Er wird für das Verschwinden der Energielücke im Anregungsspektrum des Spin-Systems verantwortlich gemacht [44].

## 3.2 Kombinationszustände

Schreibt man die Terme der im letzten Kapitel abgeleiteten Wirkung (3.5), die fermionische Anteile enthalten, mit (2.3) explizit an, folgt

$$H_F = \sum_{\substack{\langle j,j' \rangle \\ \sigma}} \bar{t}_{jj'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} + \tilde{t} \sum_{\substack{\langle j,j';i \rangle \\ \sigma}} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma}$$

$$H_K = -s J_K \sum_{\substack{\langle j,j';i \rangle \\ \sigma,\sigma'}} (-1)^i (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j,\sigma}^\dagger \mathbf{n}_i \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{j',\sigma'}$$

$$H_B = -i \frac{J_K}{4 J_H z} \sum_{\substack{\langle j,j';i \rangle \\ \sigma,\sigma'}} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j,\sigma}^\dagger \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} (\mathbf{n}_i \times \partial_\tau \mathbf{n}_i) c_{j',\sigma'}$$

Hierbei ist leicht zu erkennen, daß die Wechselwirkungen zwischen den Fermionen und dem Spinanteil im abgeleiteten Modell nicht lokal sind. Beim Kontinuumsübergang für die Fermionen bereitet das mathematische Schwierigkeiten. Es besteht aber eine physikalisch wohlbegründete Möglichkeit diese Terme auf eine lokale Form zu bringen: Innerhalb jeder Plakette können vier Linearkombinationen aus den Sauerstoff-Orbitalen gebildet werden. Eine dieser Kombinationen ist symmetrisch, die anderen drei nichtsymmetrisch. Wie im Kapitel 3.4 noch gezeigt wird, ist es sinnvoll, nicht die Fermionen auf den einzelnen Sauerstoff-Orbitalen, sondern auf den symmetrischen Zuständen als Ladungsträger zu betrachten.

Schon F. C. Zhang und T. M. Rice [45] sind bei ihrer Herleitung des t-J-Modells aus dem Einband-Hubbard-Modell ähnlich vorgegangen. Nicht die Fermionen selbst seien die Ladungsträger, vielmehr sollen symmetrische Kombinationen der Sauerstoffzustände gebildet werden, welche mit dem Spin auf dem Kupferatom zusammen ein Spin-Singulett ergeben. Diese bilden so "Löcher" im Spin-Gitter der Kupferatome, was genau dem t-J-Modell entspricht.

Mit der symmetrischen Kombination

$$\begin{aligned}\tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} &= \frac{1}{2} \sum_{(j:i)} (-1)^{\alpha_{ij}} c_{j,\sigma}^{\dagger} \\ \tilde{c}_{i,\sigma'}^1 &= \frac{1}{2} \sum_{(j':i)} (-1)^{\alpha_{j'i}} c_{j',\sigma'}\end{aligned}$$

kann man die Wechselwirkungen im vorliegenden Modell sofort auf eine lokale Form umschreiben

$$\begin{aligned}H_K &= -4s J_K \sum_{\substack{i \\ \sigma, \sigma'}} (-1)^i \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \mathbf{n}_i \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} \tilde{c}_{i,\sigma'}^1 \\ H_B &= -i \frac{J_K}{J_H z} \sum_{\substack{i \\ \sigma, \sigma'}} \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} (\mathbf{n}_i \times \partial_\tau \mathbf{n}_i) \tilde{c}_{i,\sigma'}^1.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Für den zweiten Term von  $H_F$  bekommt man

$$\tilde{t} \sum_{\substack{(j,j':i) \\ \sigma}} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{j'i}} c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{j',\sigma} = 4\tilde{t} \sum_{i,\sigma} \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i,\sigma}^1.$$

Beim ersten Term von  $H_F$  muß man aber doch etwas vorsichtiger vorgehen. Dazu ist es notwendig die Linearkombination der vier Sauerstoff-Orbitale genauer zu betrachten. Als erstes muß festgestellt werden, daß die Zustände

$$\tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} |Vac\rangle = \frac{1}{2} \sum_{(j:i)} (-1)^{\alpha_{ij}} c_{j,\sigma}^{\dagger} |Vac\rangle$$

im Gegensatz zu den Zuständen

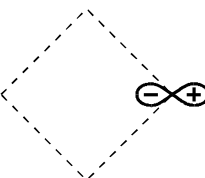
$$c_{j,\sigma}^{\dagger} |Vac\rangle$$

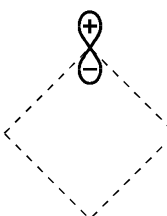
nicht mehr orthogonal zueinander sind, da die Sauerstoff-Orbitale zwischen zwei Kupferatomen zwei Plaketten gleichzeitig angehören. Der Überlapp zwischen zwei benachbarten Zuständen ist

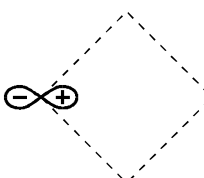
$$\langle Vac | \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i'+e_x,\sigma}^{\dagger 1} |Vac\rangle = -\frac{1}{4} \langle Vac | \tilde{c}_{j=i+a e_x/2,\sigma}^{\dagger 1} c_{j=i'-a e_x/2,\sigma}^{\dagger 1} |Vac\rangle = -\frac{1}{4}.$$

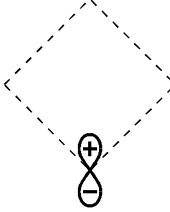
Er wurde bei obigen Umformungen der Wechselwirkungen vernachlässigt. Vernachlässigt man diesen Überlapp zunächst auch weiterhin, kann aus der Transformationsvorschrift  $\tilde{c} \rightarrow c$  die Umkehrung  $c \rightarrow \tilde{c}$  konstruiert werden.

Aus den vier Basiszuständen einer Plakette

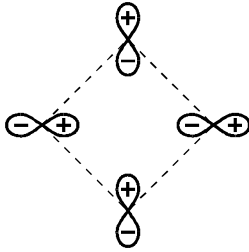
$$(-1)^{\alpha_{ij}} c_{i+a e_x/2,\sigma}^{\dagger} |Vac\rangle = c_{i,\sigma}^{\dagger 1} |Vac\rangle =$$


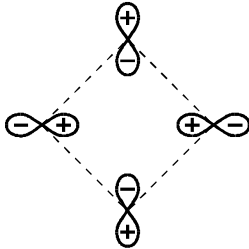
$$(-1)^{\alpha_{ij}} c_{i+a e_x/2,\sigma}^{\dagger} |Vac\rangle = c_{i,\sigma}^{\dagger 2} |Vac\rangle =$$


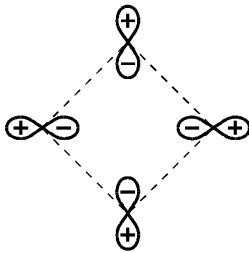
$$(-1)^{\alpha_{ij}} c_{i-a e_x/2,\sigma}^{\dagger} |Vac\rangle = c_{i,\sigma}^{\dagger 3} |Vac\rangle =$$


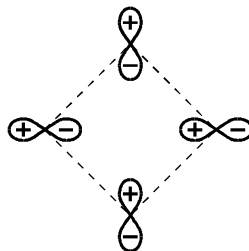
$$(-1)^{\alpha_{ij}} c_{i-a\mathbf{e}_y/2,\sigma}^\dagger |Vac\rangle = c_{i,\sigma}^{\dagger 4} |Vac\rangle =$$


können vier neue linear kombiniert werden. Diese vier Zustände kann man entweder mit Methoden der Gruppentheorie [46] ableiten oder unter Beachtung, daß sie alle paarweise orthogonal zueinander sein müssen, erraten.

$$\tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} |Vac\rangle = \frac{1}{2} (c_{i,\sigma}^{\dagger 1} + c_{i,\sigma}^{\dagger 2} + c_{i,\sigma}^{\dagger 3} + c_{i,\sigma}^{\dagger 4}) |Vac\rangle = \frac{1}{2}$$


$$\tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 2} |Vac\rangle = \frac{1}{2} (-c_{i,\sigma}^{\dagger 1} + c_{i,\sigma}^{\dagger 2} + c_{i,\sigma}^{\dagger 3} - c_{i,\sigma}^{\dagger 4}) |Vac\rangle = \frac{1}{2}$$


$$\tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 3} |Vac\rangle = \frac{1}{2} (c_{i,\sigma}^{\dagger 1} + c_{i,\sigma}^{\dagger 2} - c_{i,\sigma}^{\dagger 3} - c_{i,\sigma}^{\dagger 4}) |Vac\rangle = \frac{1}{2}$$


$$\tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 4} |Vac\rangle = \frac{1}{2} (c_{i,\sigma}^{\dagger 1} - c_{i,\sigma}^{\dagger 2} - c_{i,\sigma}^{\dagger 3} + c_{i,\sigma}^{\dagger 4}) |Vac\rangle = \frac{1}{2}$$


In Form einer Matrix stellt sich der Basiswechsel wie folgt dar:



$$\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} c_{i,\sigma}^\dagger \quad (3.2)$$

Aus der inversen Matrix folgt die Umkehrabbildung. Wegen der Orthonormalität der Zeilen bekommt man die Inverse durch Spiegelung an der Diagonalen.

$$c_{i,\sigma}^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger$$

Im Gegensatz zu allen anderen Termen beschreibt der erste Term von  $H_F$  Hüpfprozesse zwischen direkt benachbarten Sauerstoffatomen, Hüpfprozesse über Kupferatome hinweg sind nicht enthalten. Der Term läßt sich aber unter Berücksichtigung der Phasenfaktoren

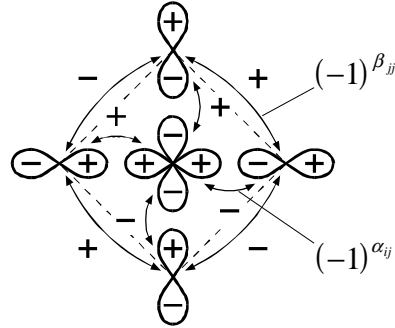


Abb. 3.1: Phasenfaktoren der Hüpfprozesse innerhalb einer Plakette.

wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} \sum_{\langle j,j' \rangle} \bar{t}_{jj'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} &= -t_{00} \sum_{\langle j,j' \rangle} (-1)^{\beta_{jj'}} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} = \\ &= t_{00} \sum_{\langle j,j';i \rangle} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} - \\ &= t_{00} \sum_{i,\sigma} \left\{ (-1)^{\alpha_{i,i+e_y/2} + \alpha_{i,i-e_y/2}} c_{i+a e_y/2,\sigma}^\dagger c_{i-a e_y/2,\sigma} + \right. \\ &\quad \left. + (-1)^{\alpha_{i,i+e_x/2} + \alpha_{i,i-e_x/2}} c_{i+a e_x/2,\sigma}^\dagger c_{i-a e_x/2,\sigma} + h.c. \right\} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Mit der oben abgeleiteten Umkehrtransformation bekommt man für den ersten Term dieses Ausdruckes

$$t_{00} \sum_{\substack{\langle j,j';i \rangle \\ \sigma}} (-1)^{\alpha_j + \alpha_{j'}} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} = 4 t_{00} \sum_{i,\sigma} \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i,\sigma}^1,$$

für den zweiten ergibt sich

$$\begin{aligned} -t_{00} \sum_{i,\sigma} \left\{ c_{i,\sigma}^{\dagger 2} c_{i,\sigma}^4 + c_{i,\sigma}^{\dagger 4} c_{i,\sigma}^2 \right\} = & -\frac{t_{00}}{2} \sum_{i,\sigma} \left\{ \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i,\sigma}^1 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 2} \tilde{c}_{i,\sigma}^2 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 3} \tilde{c}_{i,\sigma}^3 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 4} \tilde{c}_{i,\sigma}^4 + \right. \\ & \left. + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i,\sigma}^4 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 4} \tilde{c}_{i,\sigma}^1 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 2} \tilde{c}_{i,\sigma}^3 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 3} \tilde{c}_{i,\sigma}^2 \right\} \end{aligned}$$

und den dritten schreibt man mit

$$i + \frac{a}{2} \mathbf{e}_x = i + 1 - \frac{a}{2} \mathbf{e}_x$$

um und bekommt dann

$$\begin{aligned} -t_{00} \sum_{i,\sigma} \left\{ (-1)^{\alpha_{i+\mathbf{e}_x/2} + \alpha_{i-\mathbf{e}_x/2}} c_{i+\mathbf{e}_x/2,\sigma}^\dagger c_{i-\mathbf{e}_x/2,\sigma} + h.c. \right\} = \\ = -t_{00} \sum_{\substack{\langle i,i' \rangle \\ \sigma}} \left\{ (-1)^{\alpha_{i-\mathbf{e}_x/2} + \alpha_{i'-\mathbf{e}_x/2}} c_{i-\mathbf{e}_x/2,\sigma}^\dagger c_{i'-\mathbf{e}_x/2,\sigma} \right\} = \\ = -t_{00} \sum_{\substack{\langle i,i' \rangle \\ \sigma}} c_{i,\sigma}^{\dagger 3} c_{i',\sigma}^3 = \tag{3.4} \\ = -\frac{t_{00}}{4} \sum_{\substack{\langle i,i' \rangle \\ \sigma}} \left\{ \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i',\sigma}^1 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 2} \tilde{c}_{i',\sigma}^2 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 3} \tilde{c}_{i',\sigma}^3 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 4} \tilde{c}_{i',\sigma}^4 \right\} - \\ -\frac{t_{00}}{4} \sum_{\substack{\langle i,i' \rangle \\ \sigma}} \left\{ \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i',\sigma}^2 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 3} \tilde{c}_{i',\sigma}^4 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i',\sigma}^3 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 2} \tilde{c}_{i',\sigma}^4 + h.c. \right\} \end{aligned}$$

Insgesamt folgen in der Basis der linear kombinierten Zustände die Terme

$$\begin{aligned}
H_F &= -\frac{t_{00}}{4} \sum_{\substack{\langle i,i' \rangle \\ \sigma}} \left\{ \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i',\sigma}^1 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 2} \tilde{c}_{i',\sigma}^2 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 3} \tilde{c}_{i',\sigma}^3 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 4} \tilde{c}_{i',\sigma}^4 \right\} - \\
&\quad - \frac{t_{00}}{4} \sum_{\substack{\langle i,i' \rangle \\ \sigma}} \left\{ \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i',\sigma}^2 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 3} \tilde{c}_{i',\sigma}^4 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i',\sigma}^3 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 2} \tilde{c}_{i',\sigma}^4 + h.c. \right\} - \\
&\quad - \frac{t_{00}}{2} \sum_{i,\sigma} \left\{ -7 \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i,\sigma}^1 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 2} \tilde{c}_{i,\sigma}^2 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 3} \tilde{c}_{i,\sigma}^3 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 4} \tilde{c}_{i,\sigma}^4 + \right. \\
&\quad \quad \left. + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i,\sigma}^4 + \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 4} \tilde{c}_{i,\sigma}^1 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 2} \tilde{c}_{i,\sigma}^3 - \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 3} \tilde{c}_{i,\sigma}^2 \right\} + \\
&\quad + 4\tilde{t} \sum_{i,\sigma} \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{i,\sigma}^1 \\
H_K &= -4s J_K \sum_{\substack{i \\ \sigma,\sigma'}} (-1)^i \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \mathbf{n}_i \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} \tilde{c}_{i,\sigma'}^1 \\
H_B &= -i \frac{J_K}{J_H \zeta} \sum_{\substack{i \\ \sigma,\sigma'}} \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} (\mathbf{n}_i \times \partial_\tau \mathbf{n}_i) \tilde{c}_{i,\sigma'}^1
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Hierbei ist die lokale Gestalt der Wechselwirkungen von Vorteil.

### 3.3 Bandstruktur der Fermionen in statischer Näherung

Für das weitere Vorgehen ist es notwendig die Bandstruktur der Fermionen einer Spin-Fermion-Kette zu betrachten. Diese läßt sich bei statischer Näherung des nichtlinearen  $\sigma$ -Modells,  $\partial_x \mathbf{n}_i = 0$  und  $\partial_x \mathbf{n}_i = 0$  durch Transformation des Hamilton-Operators in den Impulsraum ermitteln.

O.b.d.A. erhält man mit  $\mathbf{n}_i = \mathbf{e}_z$  den Hamilton-Operator in statischer Näherung

$$\begin{aligned}
H_{Stat} &= H_F + H_K \\
H_F &= \sum_{\substack{\langle j,j' \rangle \\ \sigma}} \bar{t}_{jj'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} + \tilde{t} \sum_{\substack{\langle j,j';i \rangle \\ \sigma}} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} \\
H_K &= -s J_K \sum_{\substack{\langle j,j';i \rangle \\ \sigma,\sigma'}} (-1)^i (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^z c_{j',\sigma'} \quad .
\end{aligned}$$

Wegen der Gestalt der Pauli-Matrix  $\sigma^z$  genügt es, nur die Summanden mit  $\sigma = \uparrow$  zu betrachten, diejenigen mit  $\sigma = \downarrow$  bekommt man daraus einfach durch Ersetzen von  $J_K$  durch  $-J_K$ . Mit den Platznumerierungen

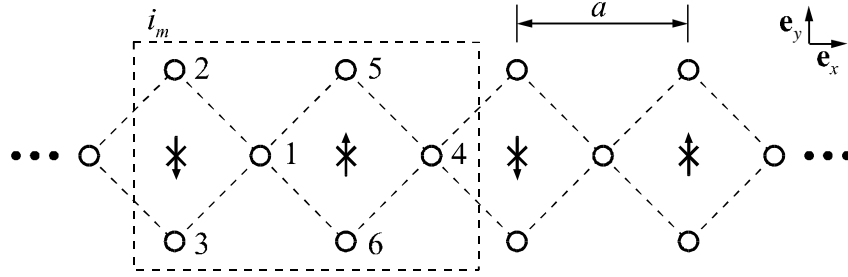


Abb. 3.2: Numerierungen der Sauerstoffplätze in der magnetischen Einheitszelle

und  $i_m$  als Numerierung der Einheitszelle folgt

$$\begin{aligned}
H_{Stat}^{(\sigma=\uparrow)} = & (t_{OO} + \tilde{t} - J_K s) \sum_{i_m} \left\{ -c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{1} c_{\uparrow} \binom{i_m}{2} - c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{1} c_{\uparrow} \binom{i_m}{3} + \right. \\
& \left. + c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{4} c_{\uparrow} \binom{i_m + 2a \mathbf{e}_x}{2} - c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{4} c_{\uparrow} \binom{i_m + 2a \mathbf{e}_x}{3} + h.c. \right\} + \\
& + (\tilde{t} - J_K s) \sum_{i_m} \left\{ -c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{4} c_{\uparrow} \binom{i_m + 2a \mathbf{e}_x}{1} - c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{2} c_{\uparrow} \binom{i_m}{3} + h.c. \right\} + \\
& + (t_{OO} + \tilde{t} + J_K s) \sum_{i_m} \left\{ c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{1} c_{\uparrow} \binom{i_m}{5} - c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{1} c_{\uparrow} \binom{i_m}{6} - \right. \\
& \left. - c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{4} c_{\uparrow} \binom{i_m}{5} - c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{4} c_{\uparrow} \binom{i_m}{6} + h.c. \right\} + \\
& + (\tilde{t} + J_K s) \sum_{i_m} \left\{ -c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{1} c_{\uparrow} \binom{i_m}{4} - c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{i_m}{5} c_{\uparrow} \binom{i_m}{6} + h.c. \right\}
\end{aligned}$$

Dieser Ausdruck ist in den Impulsraum zu transformieren. Hierbei ergibt sich eine Matrix, aus deren Hauptachsen-Transformation die Bandstruktur folgt. Beide Transformationen gleichzeitig ausgeführt

$$\begin{aligned}
c_{\sigma}^{\dagger} \binom{i_m}{\mathcal{K}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k, \lambda} c_{\sigma}^{\dagger} \binom{k}{\lambda} e_{\sigma, \lambda}^{\dagger} \binom{k}{\mathcal{K}} e^{ikx \binom{i_m}{\mathcal{K}}} \\
c_{\sigma} \binom{i_m}{\mathcal{K}'} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k', \lambda'} e_{\sigma, \lambda'} \binom{k'}{\mathcal{K}'} c_{\sigma} \binom{k'}{\lambda'} e^{-ik'x \binom{i_m}{\mathcal{K}'}}
\end{aligned}$$

ergeben den Hamilton-Operator im Impulsraum

$$H_{Stat}^{(\sigma=\uparrow)} = \sum_{\substack{k \\ \lambda, \lambda' \\ \kappa, \kappa'}} c_{\uparrow}^{\dagger} \binom{k}{\lambda} e_{\uparrow, \lambda}^{\dagger} \binom{k}{\kappa} M_{Stat}^{\kappa \kappa'} e_{\uparrow, \lambda'} \binom{k}{\kappa'} c_{\uparrow} \binom{k}{\lambda'}$$

mit

$$\mathbf{M}_{Stat} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}(J_K) & \mathbf{B}(J_K) \\ \mathbf{B}(-J_K) & \mathbf{A}(-J_K) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}(J_K) = \begin{pmatrix} 0 & -(t_{00} + \tilde{t} - J_K s) e^{ika/2} & +(t_{00} + \tilde{t} - J_K s) e^{ika/2} \\ -(t_{00} + \tilde{t} - J_K s) e^{-ika/2} & 0 & -\tilde{t} + J_K s \\ +(t_{00} + \tilde{t} - J_K s) e^{-ika/2} & -\tilde{t} + J_K s & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B}(J_K) = \begin{pmatrix} -2\tilde{t} \cos ka + 2i J_K \sin ka & +(t_{00} + \tilde{t} + J_K s) e^{-ika/2} & -(t_{00} + \tilde{t} + J_K s) e^{-ika/2} \\ +(t_{00} + \tilde{t} - J_K s) e^{ika/2} & 0 & 0 \\ -(t_{00} + \tilde{t} - J_K s) e^{ika/2} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Bei  $\mathbf{e}_{\uparrow, \lambda}$  handelt es sich um den zum Band, bzw. Eigenwert  $\varepsilon_{\lambda}$  der Matrix  $M_{Stat}^{\kappa \kappa'}$  gehörenden Eigenvektor. Der Index  $\lambda$  numeriert die einzelnen Bänder.

Durch numerisches Lösen des Eigenwert-Problems von  $\mathbf{M}_{Stat}$  mit Hilfe des Computer-Algebra-Systems Mathematica und dem Parametersatz (2.4) bekommt man schließlich die Bandstruktur.

Zwei Bänder besitzen eine verschwindende Bandbreite, das ist eine Folge von Hüpfprozessen quer zur Kette, d.h. Hüpfen zwischen den Plätzen 2 und 3 sowie zwischen 5 und 6<sup>13</sup>. Bei geringer Dotierung ist für die Ableitung einer Feldtheorie nur das unterste Band  $\lambda = 0$  von Interesse.

<sup>13</sup> Die zugehörigen Eigenvektoren sind  $\mathbf{e}_{k, \lambda=1, \uparrow} \propto (0, 1, 1, 0, 0, 0)^T$  und  $\mathbf{e}_{k, \lambda=4, \uparrow} \propto (0, 0, 0, 0, 1, 1)^T$

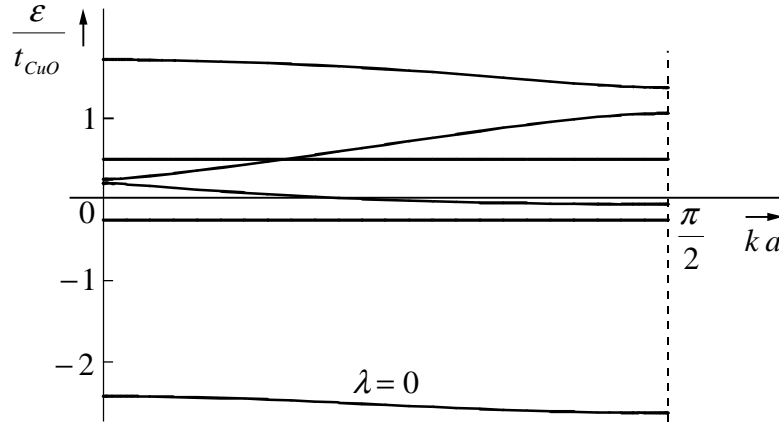


Abb. 3.3: Bandstruktur einer Spin-Fermion-Kette beim Parametersatz  $U = 6t_{CuO}$ ,  $\Delta = 4t_{CuO}$  und  $t_{OO} = -0,5t_{CuO}$ . Die sechs Freiheitsgrade in der Einheitszelle liefern sechs Bänder.

### 3.4 Gewichte der Kombinationszustände im tiefsten Bandzustand

Für die im vorhergehenden Kapitel numerisch ermittelten Bänder lassen sich auch wieder numerisch die Eigenvektoren in Abhängigkeit vom Impuls bestimmen. Der tiefste Bandzustand ist dann durch

$$c_{k,\uparrow,\lambda=0}^\dagger |Vac\rangle = \sum_{\kappa} c_{k,\uparrow,\kappa}^\dagger e_{k,\uparrow,\kappa,\lambda=0}^\dagger |Vac\rangle$$

gegeben. In der magnetischen Einheitszelle hat man es nicht mehr nur mit vier, sondern mit acht Kombinationszuständen zu tun, je nachdem, ob der Fermionenspin antiparallel oder parallel zum Spin der Kupferkette ausgerichtet ist<sup>14</sup>. Allgemein ist die Form dieser acht Kombinationszustände

$$\tilde{c}_{i_m,\uparrow}^{\dagger\alpha} |Vac\rangle = \sum_{\kappa} c_{i_m,\uparrow,\kappa}^\dagger \tilde{e}_{\uparrow,\kappa}^{\dagger\alpha} |Vac\rangle \quad \alpha = 1, \dots, 8,$$

<sup>14</sup> Weil für die Bandberechnung als Richtung des Ordnungsparameters die z-Richtung gewählt wurde, können diese antiparallelen und parallelen Zustände nur in z-Richtung ausgerichtet sein. Von Spin-Singulett und Spin-Triplett Zuständen könnte man sprechen, wenn keine Raumrichtung ausgezeichnet wäre.

wobei die Entwicklungskoeffizienten  $\tilde{z}_{\uparrow,k}^{\dagger\alpha}$  aus (3.2) folgen. Das Gewicht des Kombinationszustandes  $\alpha$  im tiefsten Bandzustand, bzw. die Wahrscheinlichkeit ein Fermion im tiefsten Bandzustand in Kombinationszustand  $\alpha$  anzutreffen, ist

$$G^\alpha = \left| \sum_{\kappa} e_{\kappa, \uparrow, \kappa, \lambda=0}^{\dagger} \tilde{z}_{\uparrow, \kappa}^{\dagger\alpha} \right|^2.$$

Aus der numerischen Bestimmung dieser Gewichte geht hervor, daß für verschwindenden Impuls der symmetrische Kombinationszustand, dessen Spin antiparallel zum Kupfer-Spin auf einer Plakette angeordnet ist, zu 98% mit dem tiefsten Bandzustand übereinstimmt. Bis  $ka = \pi/2$  nimmt diese Übereinstimmung auf 72% ab.

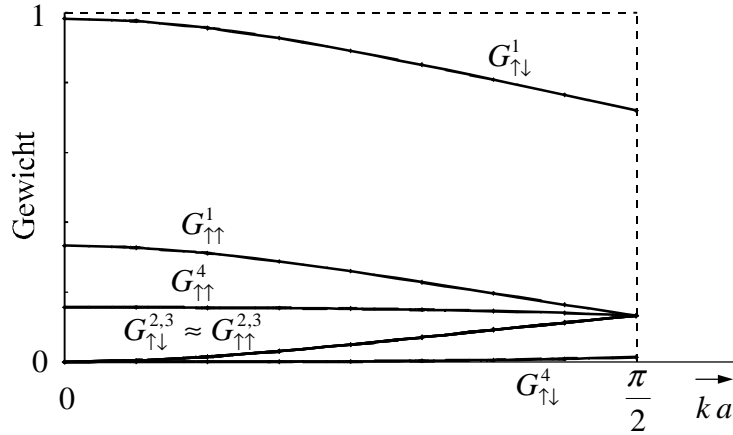


Abb. 3.4: Gewichte der Kombinationszustände im tiefsten Bandzustand. Der obere Index der Gewichte  $G$  bezeichnet den Kombinationszustand. Bei  $\alpha = 1$  handelt es sich um den symmetrischen Zustand und bei  $\alpha = 2, 3, 4$  um die nichtsymmetrischen. Der untere Index gibt an, ob der Spin des Kombinationszustandes antiparallel  $\uparrow\downarrow$  oder parallel  $\uparrow\uparrow$  zum Kupfer-Spin einer Plakette angeordnet ist. Aufgrund des Überlapps zweier benachbarter Kombinationszustände ist die Summe der Gewichte nicht eins.

Weil die Kombinationszustände auf zwei benachbarten Plaketten nicht orthogonal sind, ergeben die Summen der bestimmten Gewichte nicht eins. Die oben genannten Zahlenwerte sind deshalb als Näherungen zu verstehen. Das Resultat rechtfertigt es trotzdem, in den folgenden Betrachtungen bei den Termen (3.5) alle Terme, die nichtsymmetrische Kombinationszustände, d.h.  $\tilde{z}_{i,\sigma}^{\dagger 2,3,4}$  enthalten, zu vernachlässigen.

Die Wirkung, die dann folgt, enthält aber weiterhin den symmetrischen Zustand, dessen Spin parallel zum Kupfer-Spin angeordnet ist. Dieser Zustand stimmt mit einem der höheren Bänder zu einem hohen Prozentsatz überein. Obwohl durch das Weglassen der nichtsymmetrischen Kombinationszustände gerade die höheren Bänder vernachlässigt werden, wird der parallele Zustand zunächst mitgenommen. Beim Kontinuumsübergang

im nächsten Kapitel wird die Dispersionsrelation um die Fermi-Punkte, die sich im tiefsten Band befinden, angenähert. Bei diesem Rechenschritt ist nur das unterste Band von Interesse, hier entfällt dann auch der parallele Zustand.

### 3.5 Kontinuumsübergang für die Fermionen

Die Spin-Fermion-Kette hat nach den Betrachtungen der vorhergehenden Kapitel näherungsweise folgende Gestalt: Fermionen bewegen sich durch direktes Nachbar-Hüpfen entlang der Kette und treten mit der Spin-Struktur nur lokal an den jeweiligen Plätzen in Wechselwirkung.

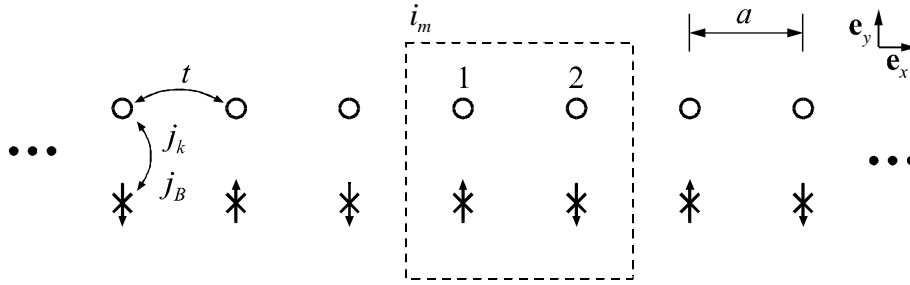


Abb. 3.5: Struktur der Spin-Fermion-Kette mit den Platznumerierungen in der Einheitszelle.

Verwendet man die Bezeichnungen

$$\alpha_{i,\sigma}^\dagger = \tilde{c}_{i,\sigma}^{\dagger 1} \quad \alpha_{i,\sigma} = \tilde{c}_{i,\sigma}^1$$

hat die Wirkung die Form<sup>15</sup>

$$S = -\int_0^\beta d\tau \left( \sum_i \alpha_i^\dagger \partial_\tau \alpha_i - H_F - H_K - H_B \right) - S_{NI\sigma M} - S_{top}$$

$$H_F = t \sum_{\langle i,i' \rangle} \alpha_i^\dagger \alpha_{i'}$$

$$H_K = j_K \sum_i (-1)^i \alpha_i^\dagger \mathbf{n}_i \underline{\sigma} \alpha_i$$

$$H_B = i j_B \sum_i \alpha_i^\dagger \underline{\sigma} (\mathbf{n}_i \times \partial_\tau \mathbf{n}_i) \alpha_i$$

<sup>15</sup> bis auf konstante Summanden



mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} t &= -\frac{t_{00}}{4} \\ j_K &= -4sJ_K \\ j_B &= -\frac{J_K}{J_H z} . \end{aligned}$$

Obwohl es sich beim ersten Term der Wirkung nicht um einen Hamilton-Operator handelt, soll dieser zur Vereinfachung mit

$$H_\tau = \sum_i \alpha_i^\dagger \partial_\tau \alpha_i \quad (3.6)$$

bezeichnet werden.

Um zu einem Kontinuumsübergang zu gelangen, ist es notwendig, durch entsprechende mathematische Umformungen aus dem nichtlokalen Hüpf-Term einen lokalen Term abzuleiten. Alle nun folgenden Rechenoperationen betreffen nur die Terme der Wirkung, die fermionische Anteile enthalten. Deshalb interessieren in diesem Kapitel das nichtlineare  $\sigma$ -Modell  $S_{nl\sigma M}$  und der topologische Term  $S_{top}$  nicht. Sie werden in nächsten Kapitel wieder aufgegriffen.

Bis jetzt sind die Terme mit einer globalen Spin-Quantisierungsachse formuliert. Will man den statischen Anteil  $H_F + H_K$  diagonalisieren, ist zu beachten, daß der Ordnungsparameter  $\mathbf{n}_i$  in jede beliebige Richtung zeigen kann. Bei der Diagonalisierung soll keine Raumrichtung bevorzugt werden. Alle Richtungen bleiben gleichberechtigt, wenn man zunächst zu einem System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse übergeht. In diesem ist dann die  $z$ -Richtung von vornherein ausgezeichnet. Die Bandstruktur des statischen Anteils ist dabei genau die gleiche wie im System mit globaler Spin-Quantisierungsachse, wenn dort für den Ordnungsparameter eine beliebige Richtung herausgegriffen wird.

Die unitäre Transformation in das System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse muß  $\mathbf{n}_i \underline{\sigma}$  durch  $\sigma^z$  ersetzen. Die definierende Eigenschaft ist also wie bei [47,48]

$$U_i^\dagger \mathbf{n}_i \underline{\sigma} U_i = \sigma^z . \quad (3.7)$$

Mit den Eigenschaften dieser Spinor-Transformation beschäftigt sich das Kapitel 3.6. Zunächst genügt es mit den Transformationsvorschriften

$$\begin{aligned} \alpha_i^\dagger &= f_i^\dagger U_i^\dagger \\ \alpha_i &= U_i f_i \end{aligned}$$

die Terme umzuschreiben.

$$\begin{aligned}
H_\tau &= \sum_i f_i^\dagger \left( \partial_\tau + U_i^\dagger \partial_\tau U_i \right) f_i \\
H_F &= t \sum_{\langle i,i' \rangle} f_i^\dagger U_i^\dagger U_{i'} f_{i'} \\
H_K &= j_K \sum_i (-1)^i f_i^\dagger \sigma^z f_i \\
H_B &= j_B \sum_i f_i^\dagger \left( i U_i^\dagger \underline{\sigma} (\mathbf{n}_i \times \partial_\tau \mathbf{n}_i) U_i \right) f_i .
\end{aligned}$$

Wenn sich die Spin-Struktur nur wenig ändert, kann man den Hüpf-Term  $H_F$  wie folgt entwickeln:

$$H_F = t \sum_{\langle i,i' \rangle} f_i^\dagger f_{i'} + \Omega \sum_{\langle i,i' \rangle} \left( \theta(i' - i) - \theta(i - i') \right) f_i^\dagger U_i^\dagger \partial_x U_i f_i + \mathcal{O}(a^2).$$

Hierbei ist zu beachten, daß die Transformation  $U_i$  nicht unabhängig vom Vernichtungspinor  $f_i$  ist. Diese Entwicklung ist das Resultat der Kettenregel, d.h.

$$U_{i'} f_{i'} = U_i f_i + \Omega \left( \theta(i' - i) - \theta(i - i') \right) \partial_x (U_i f_i) + \mathcal{O}(a^2)$$

wobei auch

$$f_{i'} = f_i + \Omega \left( \theta(i' - i) - \theta(i - i') \right) \partial_x f_i + \mathcal{O}(a^2) \quad (3.8)$$

zu berücksichtigen ist<sup>16</sup>. Der Entwicklungskoeffizient  $\Omega$  ist durch den Vorfaktor von  $\partial_x f_i$  nach dem Kontinuumsübergang gegeben. Betrachtet man halbe Bandfüllung, stimmt er mit *ita* überein. Im allgemeinen Fall ist er jedoch von der Wellenzahl bei den Fermi-Punkten abhängig. In der vorliegenden Arbeit wird er durch Vergleich mit dem Vorfaktor von  $\partial_x f_i$ , der sich beim Kontinuumsübergang ergibt, bestimmt.

Der rein fermionische Hamilton-Operator zerfällt jetzt in einen wechselwirkungsfreien und einen wechselwirkenden Anteil:

---

<sup>16</sup> Bei (3.8) ist zu beachten, daß es sich bei  $f_{i'}$  um eine Grassmann-Variable handelt. Die Entwicklung rechtfertigt sich wie folgt: Durch Transformation eines Hüpf-Terms der Form  $H_{F,0}$  in (3.9) in den Impulsraum erhält man nach linearer Entwicklung um die beiden Fermi-Punkte einen Ausdruck der Form (3.13). Nach Rückkehr in den Ortsraum folgt bis auf eine Konstante ein Ausdruck der Form (3.14). Hier wird also im Endeffekt die Dispersionsrelation und damit ein Ausdruck, der aus reellen Zahlen besteht, entwickelt.

$$\begin{aligned}
H_F &= H_{F,0} + H_{F,WW} \\
H_{F,0} &= t \sum_{\langle i,i' \rangle} f_i^\dagger f_{i'} \\
H_{F,WW} &= \Omega \sum_{\langle i,i' \rangle} (\theta(i' - i) - \theta(i - i')) f_i^\dagger U_i^\dagger \partial_x U_i f_{i'}.
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Der wechselwirkungsfreie Anteil  $H_{F,0}$  liefert zusammen mit  $H_K$  die Bandstruktur bei festgehaltener Spin-Struktur, d.h. des statischen Anteils. Um diese zu bestimmen, müssen die einzelnen Terme wieder in den Impulsraum transformiert werden. Dazu schreibt man sie mit  $i_m$  als Numerierung der magnetischen Einheitszellen und  $\kappa$  als Numerierung der Plätze innerhalb der Einheitszellen wie folgt an

$$\begin{aligned}
H_{F,0} &= t \sum_{i_m} \left\{ f_{i_m,1}^\dagger f_{i_m,2} + f_{i_m,2}^\dagger f_{i_m+2a\mathbf{e}_x,1} + h.c. \right\} \\
H_{F,WW} &= \begin{cases} +\Omega \sum_{i_m} \left\{ f_{i_m,1}^\dagger (U^\dagger \partial_x U)_{i_m,1} f_{i_m,1} + f_{i_m,2}^\dagger (U^\dagger \partial_x U)_{i_m,2} f_{i_m,2} \right\} & \text{für } i' > i \\ -\Omega \sum_{i_m} \left\{ f_{i_m,1}^\dagger (U^\dagger \partial_x U)_{i_m,1} f_{i_m,1} + f_{i_m,2}^\dagger (U^\dagger \partial_x U)_{i_m,2} f_{i_m,2} \right\} & \text{für } i' < i \end{cases}
\end{aligned}$$

Für  $H_\tau$ ,  $H_K$  und  $H_B$  ergibt sich

$$\begin{aligned}
H_\tau &= \sum_{i_m} \left\{ f_{i_m,1}^\dagger \partial_\tau f_{i_m,1} + f_{i_m,2}^\dagger \partial_\tau f_{i_m,2} \right\} + \\
&\quad + \sum_{i_m} \left\{ f_{i_m,1}^\dagger (U^\dagger \partial_\tau U)_{i_m,1} f_{i_m,1} + f_{i_m,2}^\dagger (U^\dagger \partial_\tau U)_{i_m,2} f_{i_m,2} \right\} \\
H_K &= j_K \sum_{i_m} \left\{ f_{i_m,1}^\dagger \sigma^z f_{i_m,1} - f_{i_m,2}^\dagger \sigma^z f_{i_m,2} \right\} \\
H_B &= j_B \sum_{i_m} \left\{ f_{i_m,1}^\dagger (iU^\dagger \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n})U)_{i_m,1} f_{i_m,1} + f_{i_m,2}^\dagger (iU^\dagger \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n})U)_{i_m,2} f_{i_m,2} \right\}.
\end{aligned}$$

Durch Fourier-Transformation mit anschließender unitären Transformation<sup>17</sup>

---

<sup>17</sup> Hier werden zwei Schritte auf einmal vollzogen: Zunächst transformiert man in den Impulsraum, wodurch man Terme der Form (3.11) erhält. Anschließend geht man von der Basis, die durch die Plätze gegeben ist, in eine noch zu bestimmende über. Das bedeutet, daß man eine unitäre Transformation durchführt. Diese wählt man sich so, daß der statische Anteil diagonal wird. Aus diesem Grund ist die unitäre Transformation durch die Eigenvektoren des statischen Problems bestimmt. Siehe hierzu auch Anhang G.

$$\begin{aligned}
f_{i_m, \kappa}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k, \lambda} f_{k, \lambda}^\dagger e_{k, \kappa, \lambda}^\dagger \exp(i k x_{i_m, \kappa}) \\
f_{i_m, \kappa'} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k', \lambda'} e_{k', \kappa', \lambda'} f_{k', \lambda'} \exp(-i k' x_{i_m, \kappa'}) \\
w_{i_m, \kappa} &= \sum_q w_q \exp(-i q x_{i_m, \kappa})
\end{aligned} \tag{3.10}$$

bekommt man Terme der Form

$$H = \sum_{\substack{k, k', q \\ \lambda, \lambda' \\ \kappa, \kappa'}} f_{k, \lambda}^\dagger e_{k, \kappa, \lambda}^\dagger M^{\kappa, \kappa'} e_{k', \kappa', \lambda'} f_{k', \lambda'} \tag{3.11}$$

mit den Matrizen

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_\tau &= \left( \delta_{k, k'} \partial_\tau + \delta_{k-q, k'} (U^\dagger \partial_\tau U)_q \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
\mathbf{M}_{F,0} &= 2t \delta_{k, k'} \cos(k' a) \delta_{\sigma\sigma'} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
\mathbf{M}_K &= j_K \delta_{k, k'} \sigma^z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
\mathbf{M}_{F,WW} &= \Omega (\theta(k) - \theta(-k)) \delta_{k-q, k'} (U^\dagger \partial_x U)_q \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
\mathbf{M}_B &= j_B \delta_{k-q, k'} (i U^\dagger \underline{\sigma} (\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n}) U)_q \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Die Diagonalisierung des wechselwirkungsfreien Anteils  $H_{F,0}$  zusammen mit dem Kondo-Anteil  $H_K$ , d.h. des statischen Anteils, definiert die unitäre Transformation in (3.10). Mit dieser werden anschließend auch die beiden wechselwirkenden Anteile  $H_{F,WW}$  und  $H_B$  sowie  $H_\tau$  transformiert.

Beim statischen Anteil sind die beiden Fälle  $\sigma = \uparrow$  und  $\sigma = \downarrow$  entartet, weshalb zunächst die Betrachtung von  $\sigma = \uparrow$  genügt. Mit

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{\uparrow\uparrow} & \mathbf{M}_{\uparrow\downarrow} \\ \mathbf{M}_{\downarrow\uparrow} & \mathbf{M}_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}$$

folgt aus dem Eigenwertproblem

$$\det(\mathbf{M}_{F,0,\uparrow\uparrow} + \mathbf{M}_{K,\uparrow\uparrow} - \varepsilon \mathbf{1}) = 0$$

$$\Leftrightarrow \det \begin{pmatrix} j_K - \varepsilon & 2t \cos k a \\ 2t \cos k a & -j_K - \varepsilon \end{pmatrix} = 0$$

die Energie-Dispersionsrelation,

$$\varepsilon_{0,1}(k) = \mp \sqrt{j_K^2 + 4t^2 \cos^2(k a)}$$

bzw. die Bandstruktur des statischen Anteils.

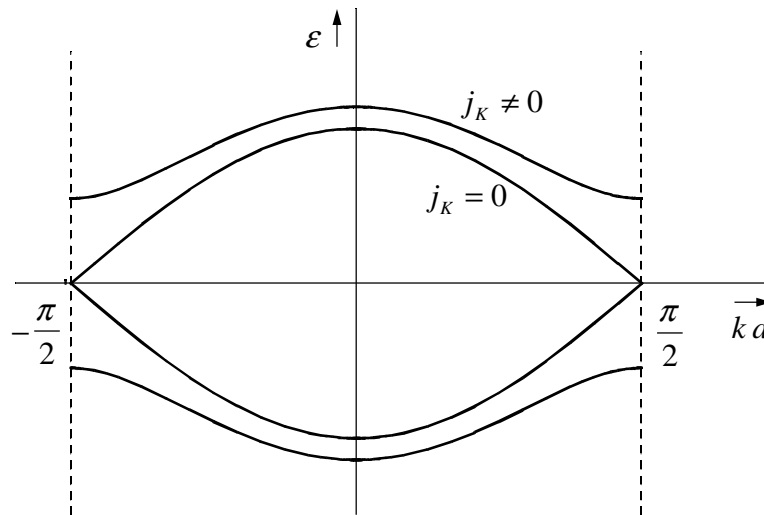


Abb. 3.6: Bandstruktur des statischen Anteils der vereinfachten Spin-Fermion-Kette.

Bei geringer Dotierung und kleinen Anregungsenergien genügt es, nur das untere Band  $\lambda = 0$  zu betrachten. Für das weitere Vorgehen benötigt man deshalb den zum Eigenwert  $\varepsilon_{\lambda=0}(k)$  gehörenden Eigenvektor. Er lautet

$$\mathbf{e}_{k,0,\uparrow}^\dagger = \frac{1}{N(k)} \begin{pmatrix} 1 \\ X(k) \end{pmatrix} = \mathbf{e}_{k,0,\uparrow}$$

mit

$$X(k) = -\frac{j_K + \sqrt{j_K^2 + 4t^2 \cos^2(k a)}}{2t \cos(k a)}$$

$$N(k) = \sqrt{1 + X^2(k)}$$

Wegen der speziellen Form der Pauli-Matrix  $\sigma^z$  und der Matrix  $\mathbf{M}_K$

$$\mathbf{M}_{F,0,\downarrow} + \mathbf{M}_{K,\downarrow} = \begin{pmatrix} -j_K & 2t \cos k a \\ 2t \cos k a & j_K \end{pmatrix}$$

folgt für den Eigenvektor im Fall  $\sigma = \downarrow$

$$\mathbf{e}_{k,0,\downarrow}^\dagger = \frac{1}{N(k)} \begin{pmatrix} X(k) \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{e}_{k,0,\downarrow}.$$

Mit diesen Eigenvektoren ist jetzt die gesamte fermionische Wirkung zu transformieren. Man bekommt dann

$$\begin{aligned} S_F &= \int_0^\beta d\tau (H_\tau - H_F - H_K - H_B) = \\ &= \int_0^\beta d\tau \sum_{\substack{k,k',q \\ \sigma,\sigma'}} f_{k,0,\sigma}^\dagger \mathbf{e}_{k,0,\sigma}^\dagger (\mathbf{M}_{\tau,0,\sigma\sigma'} - \mathbf{M}_{F,0,\sigma\sigma'} - \\ &\quad - \mathbf{M}_{K,\sigma\sigma'} - \mathbf{M}_{F,WW,\sigma\sigma'} - \mathbf{M}_{B,\sigma\sigma'}) \mathbf{e}_{k',0,\sigma'} f_{k',0,\sigma'} \end{aligned}$$

was im einzelnen folgendes bedeutet

$$\mathbf{e}_{k,0,\sigma}^\dagger \mathbf{M}_{\tau,\sigma\sigma'} \mathbf{e}_{k',0,\sigma'} = \left( \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} \partial_\tau + \delta_{k-q,k'} (U^\dagger \partial_\tau U)_{q,\sigma\sigma'} \right) w_{\sigma\sigma'}(k, k')$$

$$\mathbf{e}_{k,0,\sigma}^\dagger (\mathbf{M}_{F,0,\sigma\sigma'} + \mathbf{M}_{K,\sigma\sigma'}) \mathbf{e}_{k',0,\sigma'} = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} \varepsilon_0(k)$$

$$\mathbf{e}_{k,0,\sigma}^\dagger \mathbf{M}_{F,WW,\sigma\sigma'} \mathbf{e}_{k',0,\sigma'} = \Omega(\theta(k) - \theta(-k)) \delta_{k-q,k'} (U^\dagger \partial_x U)_{q,\sigma\sigma'} w_{\sigma\sigma'}(k, k')$$

$$\mathbf{e}_{k,0,\sigma}^\dagger \mathbf{M}_{B,\sigma\sigma'} \mathbf{e}_{k',0,\sigma'} = j_B \delta_{k-q,k'} (iU^\dagger \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n})U)_{q,\sigma\sigma'} w_{\sigma\sigma'}(k, k')$$

mit der konstanten Matrix

$$w_{\sigma\sigma'}(k, k') = \mathbf{e}_{k,0,\sigma}^\dagger \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{e}_{k',0,\sigma'}$$

$$\mathbf{w}(k, k') = \frac{1}{N(k)N(k')} \begin{pmatrix} 1 + X(k)X(k') & X(k) + X(k') \\ X(k) + X(k') & 1 + X(k)X(k') \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Um die beiden Fermi-Punkte kann jetzt die Energie-Dispersionsrelation entwickelt werden. Die Fermionen beim Punkt  $k = k_F$  bewegen sich nach rechts, die beim Punkt  $k = -k_F$  nach links. Betrachtet man nur kleine Impulsüberträge  $|q| = |k - k'| \ll k_F$  können keine nach rechts laufenden Fermionen so gestreut werden, daß sie nach dem Streuprozeß nach links laufen und umgekehrt. Das bedeutet, daß keine Rückwärts-Streuung stattfindet. Aus diesem Grund sind die Fermionen an den beiden Fermi-Punkten unabhängig voneinander. In diesem Sinn hat man es mit zwei verschiedenen Teilchensorten  $R$  und  $L$  zu tun:

$$\begin{aligned}\varepsilon_0^{R,L}(k) &= \varepsilon_0(k_F) + \left. \frac{\partial \varepsilon_0(k)}{\partial k} \right|_{k=\pm k_F} \cdot (k \mp k_F) + \mathcal{O}(k^2) \\ &\equiv \varepsilon_F \pm v_F (k \mp k_F) + \mathcal{O}(k^2)\end{aligned}$$

Das setzt eine unendliche Kettenlänge  $L \rightarrow \infty$  und damit einen kontinuierlichen Impulsraum voraus. Deswegen führt man an dieser Stelle den Kontinuumsübergang des Impulsraumes aus. Durch die erste Ableitung der Dispersionsrelation nach der Wellenzahl  $k$  ist die Fermi-Geschwindigkeit gegeben

$$v_F = \frac{2t^2 a \sin(2k_F a)}{\sqrt{j_K^2 + 4t^2 \cos^2(k_F a)}}.$$

Weil bei kleinen Impulsüberträgen keine Rückwärts-Streuung stattfindet, sind für  $k$  und  $k'$  in (3.12), nur die beiden Näherungen

$$k \approx k' \approx k_F \quad \text{und} \quad k \approx k' \approx -k_F$$

zulässig. Hier ist zu beachten, daß die Terme, in denen  $\mathbf{w}(k, k')$  vorkommt, keine Hüpfprozesse der Fermionen beschreiben. Weil sie schon lokal formuliert sind, kann bei ihnen der Kontinuumsübergang unmittelbar ausgeführt werden. Es wäre also falsch  $\mathbf{w}(k, k')$  wie die Energie zu entwickeln, da Terme mit dem Faktor  $(k \mp k_F)$  nach der Rücktransformation in den Ortsraum kinetische Terme der Art  $f^+ \partial_x f$  ergeben. Wegen den Symmetrien  $X(k) = X(-k)$  und  $N(k) = N(-k)$  folgt

$$\begin{aligned}\mathbf{w}(k, k') \approx \mathbf{w} &= \begin{pmatrix} 1 & w_{\uparrow\downarrow} \\ w_{\uparrow\downarrow} & 1 \end{pmatrix} \\ w_{\uparrow\downarrow} &= \frac{2X(k_F)}{1+X^2(k_F)} = -\frac{2t \cos(k_F a)}{\sqrt{j_K^2 + 4t^2 \cos^2(k_F a)}}.\end{aligned}$$

Nach all diesen Umformungen werden die einzelnen Terme

$$\begin{aligned}
(H_\tau)_{\sigma\sigma'}^{R,L} &= \frac{L^2}{4\pi^2} \int dk \int dq f_\sigma^{\dagger R,L}(k) \partial_\tau f_\sigma^{R,L}(k) + \\
&\quad + \frac{L^2}{4\pi^2} \int dk \int dq f_\sigma^{\dagger R,L}(k) \left\{ w_{\sigma\sigma'} (U^\dagger \partial_\tau U)_{\sigma\sigma'}(q) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(k-q) \\
(H_{F,0} + H_K)_{\sigma\sigma'}^{R,L} &= \frac{L}{2\pi} \int dk f_\sigma^{\dagger R,L}(k) \delta_{\sigma\sigma'} \left\{ \varepsilon_F \pm v_F (k \mp k_F) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(k) \quad (3.13) \\
(H_{F,WW})_{\sigma\sigma'}^{R,L} &= \pm \Omega \frac{L^2}{4\pi^2} \int dk \int dq f_\sigma^{\dagger R,L}(k) \left\{ w_{\sigma\sigma'} (U^\dagger \partial_x U)_{\sigma\sigma'}(q) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(k-q) \\
(H_B)_{\sigma\sigma'}^{R,L} &= j_B \frac{L^2}{4\pi^2} \int dk \int dq f_\sigma^{\dagger R,L}(k) \cdot \\
&\quad \cdot \left\{ w_{\sigma\sigma'} (iU^\dagger \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n})U)_{\sigma\sigma'}(q) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(k-q).
\end{aligned}$$

Durch die Transformation in den Ortsraum mit gleichzeitiger Phasentransformation, die im Anhang I zu finden ist, bekommt man

$$\begin{aligned}
(H_\tau)_{\sigma\sigma'}^{R,L} &= \frac{1}{2a} \int dx f_\sigma^{\dagger R,L}(x) \left\{ \delta_{\sigma\sigma'} \partial_\tau + w_{\sigma\sigma'} (U^\dagger \partial_\tau U)_{\sigma\sigma'}(x) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(x) \\
(H_{F,0} + H_K)_{\sigma\sigma'}^{R,L} &= \frac{1}{2a} \int dx f_\sigma^{\dagger R,L}(x) \delta_{\sigma\sigma'} \left\{ \varepsilon_F \pm i v_F \partial_x \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(x) \\
(H_{F,WW})_{\sigma\sigma'}^{R,L} &= \frac{1}{2a} \int dx f_\sigma^{\dagger R,L}(x) \left\{ \pm \Omega w_{\sigma\sigma'} (U^\dagger \partial_x U)_{\sigma\sigma'}(x) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(x) \\
(H_B)_{\sigma\sigma'}^{R,L} &= j_B \frac{1}{2a} \int dx f_\sigma^{\dagger R,L}(x) \left\{ w_{\sigma\sigma'} (iU^\dagger \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n})U)_{\sigma\sigma'}(x) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(x),
\end{aligned}$$

die gesuchte kontinuierliche Form der Terme. Verschiebt man den Energienullpunkt um den konstanten Faktor



$$\frac{1}{2a} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) \delta_{\sigma\sigma'} \varepsilon_F f_{\sigma'}^{R,L}(x) = \text{const},$$

folgt für den rein fermionischen Anteil

$$\left( H_{F,0} + H_K \right)_{\sigma\sigma'}^{R,L} = \frac{1}{2a} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) \delta_{\sigma\sigma'} \{ \pm i v_F \partial_x \} f_{\sigma'}^{R,L}(x). \quad (3.14)$$

Unabhängig von dieser Energie-Nullpunktverschiebung kann jetzt der Entwicklungskoeffizient  $\Omega$  identifiziert werden. Oben wurde festgestellt, daß nach der Diagonalisierung  $\partial_x f$  und  $\partial_x U$  die gleichen Vorfaktoren besitzen müssen. Es gilt also unter Beachtung von  $w_{\sigma=\sigma'} = 1$  der Zusammenhang  $\Omega = i v_F$ .

Als nächstes ist es notwendig, sich mit den Eigenschaften der lokalen unitären Transformation (3.7) und damit auch mit der Gestalt von  $U^{\dagger} \partial_{x,\tau} U$  und  $U^{\dagger} \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_{\tau} \mathbf{n}) U$  zu beschäftigen.

## 3.6 CP<sup>1</sup>-Darstellung

Im vorigen Kapitel wurde die lokale SU(2) Transformation  $U(x, \tau)$  mit der Eigenschaft

$$U^{\dagger} \mathbf{n} \underline{\sigma} U = \sigma^z$$

verwendet. In den Wechselwirkungstermen ergaben sich damit die Ausdrücke

$$\begin{aligned} & U^{\dagger}(x, \tau) \partial_{x,\tau} U(x, \tau) \\ & i U^{\dagger}(x, \tau) \underline{\sigma}(\mathbf{n}(x, \tau) \times \partial_{\tau} \mathbf{n}) U(x, \tau). \end{aligned}$$

Die Transformation läßt sich wie folgt [47,48] schreiben

$$U = \begin{pmatrix} z_1 & -\bar{z}_2 \\ z_2 & \bar{z}_1 \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

wobei die  $z_i$  komplexe Zahlen sind. Diese erfüllen wegen  $U^{\dagger} U = \mathbf{1}$  die Nebenbedingung  $\bar{z}_1 z_1 + \bar{z}_2 z_2 = 1$ . Mit dem Eichfeld

$$A_{x,\tau} = -\frac{i}{2} \bar{Z} \vec{\partial}_{x,\tau} Z \quad (3.16)$$

und den Nebendiagonalelementen

$$\begin{aligned} B_{x,\tau} &= Z \sigma^y \partial_{x,\tau} Z \\ \bar{B}_{x,\tau} &= -\bar{Z} \sigma^y \partial_{x,\tau} \bar{Z}, \end{aligned}$$

wobei  $Z = (z_1, z_2)^T$  ein Spinor ist, folgt

$$\begin{aligned} U^\dagger(x, \tau) \partial_{x,\tau} U(x, \tau) &= i A_{x,\tau} \sigma^z + i B_{x,\tau} \sigma^- + i \bar{B}_{x,\tau} \sigma^+ \equiv i A_{x,\tau} \sigma^z + K_{x,\tau} \\ i U^\dagger(x, \tau) \underline{\sigma}(\mathbf{n}(x, \tau) \times \partial_\tau \mathbf{n}) U(x, \tau) &= -2i (B_\tau \sigma^- + \bar{B}_\tau \sigma^+) = -2 K_\tau. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Die Terme in der Wirkung mit fermionischen Anteilen werden so

$$(H_\tau)^{R,L} = \frac{1}{2a} \int dx f^{\dagger R,L}(x) \left\{ (\partial_\tau + i A_\tau \sigma^z) + w_{\uparrow\downarrow} K_\tau \right\} f^{R,L}(x) \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} (H_{F,0} + H_K)^{R,L} + (H_{F,WW})^{R,L} &= \\ &= \frac{1}{2a} \int dx f^{\dagger R,L}(x) \left\{ \pm i v_F (\partial_x + i A_x \sigma^z) \pm i v_F w_{\uparrow\downarrow} K_x \right\} f^{R,L}(x) \end{aligned}$$

$$(H_B)^{R,L} = j_B \frac{1}{2a} \int dx f^{\dagger R,L}(x) \left\{ -2 w_{\uparrow\downarrow} K_\tau \right\} f^{R,L}(x)$$

Mit der kovarianten Ableitung  $D_{x,\tau} = \partial_{x,\tau} + i A_{x,\tau} \sigma^z$  bekommt der Anteil der Wirkung, der fermionische Anteile enthält, die Form

$$S_F = S_F^R + S_F^L$$

$$S_F^{R,L} = \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2a} \int dx f^{\dagger R,L} \left\{ D_\tau \mp i v_F D_x + w_{\uparrow\downarrow} (K_\tau \mp i v_F K_x) + 2 j_B w_{\uparrow\downarrow} K_\tau \right\} f^{R,L}$$

Bis auf konstante Faktoren und Integrationen lautet das nichtlineare  $\sigma$ -Modell

$$\frac{1}{4} (\partial_{x,\tau} \mathbf{n})^2 = \left| (\partial_{x,\tau} - i A_{x,\tau}) Z \right|^2.$$

Beim topologischen Term steht in der Wirkung

$$\mathbf{n}(\partial_x \mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n}) = 2(\partial_x A_\tau - \partial_\tau A_x).$$

Wie man zu diesen Beziehungen gelangt, wird im Anhang J beschrieben.

Die Wirkungen des nichtlinearen  $\sigma$ -Modells und des topologischen Terms sind damit

$$\begin{aligned}
S_{Ni\sigma M} &= v_H s^2 a \int_0^\beta d\tau \sum_i \left[ (\partial_x \mathbf{n}_i)^2 + \frac{1}{v_S^2} (\partial_\tau \mathbf{n}_i)^2 \right] \\
&\xrightarrow{a \rightarrow 0} v_H s^2 \int_0^\beta d\tau \int dx \left[ (\partial_x \mathbf{n})^2 + \frac{1}{v_S^2} (\partial_\tau \mathbf{n})^2 \right] \\
&= 4 v_H s^2 \int_0^\beta d\tau \int dx \left[ |(\partial_x - i A_x) Z|^2 + \frac{1}{v_S^2} |(\partial_\tau - i A_\tau) Z|^2 \right] \\
\\
S_{top} &= i s \int_0^\beta d\tau \int dx [\partial_x A_\tau - \partial_\tau A_x].
\end{aligned}$$

Die jetzt erhaltene Wirkung des Gesamtsystems  $S = -S_F^R - S_F^L - S_{Ni\sigma M} - S_{top}$  ist im System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse formuliert. Will man in das System mit globaler Spin-Quantisierungsachse zurückkehren, muß man folgendes beachten:

Beim Kontinuumsübergang und dem Übergang zur CP<sup>1</sup>-Darstellung hat man aus dem kinetischen Term (3.6) den Ausdruck (3.18) erhalten. Ein freies fermionisches System liegt bei  $j_K = 0$  vor. Dann gilt

$$\alpha_i^\dagger \partial_\tau \alpha_i \rightarrow f^{\dagger R,L}(x) \{ D_\tau - K_\tau \} f^{R,L}(x) \quad \text{für } j_K = 0,$$

woraus die Übersetzungsvorschrift

$$\begin{aligned}
f^{\dagger R,L}(x) \{ D_{x,\tau} - K_{x,\tau} \} f^{R,L}(x) &= \alpha^{\dagger R,L}(x) \partial_{x,\tau} \alpha^{R,L}(x) \\
\Leftrightarrow \alpha^{\dagger R,L}(x) U(x) \{ D_{x,\tau} - K_{x,\tau} \} U^\dagger(x) \alpha^{R,L}(x) &= \alpha^{\dagger R,L}(x) \partial_{x,\tau} \alpha^{R,L}(x)
\end{aligned}$$

für die Rückübersetzung in das System mit globaler Spin-Quantisierungsachse folgt. Genauso kann man sich anhand der Berry-Phase

$$\alpha_i^\dagger i \underline{\sigma}(\mathbf{n}_i \times \partial_\tau \mathbf{n}_i) \alpha_i \rightarrow f^{\dagger R,L}(x) \{ 2 K_\tau \} f^{R,L}(x) \quad \text{für } j_K = 0$$

überlegen, daß

$$\begin{aligned}
f^{\dagger R,L}(x) K_{x,\tau} f^{R,L}(x) &= \alpha^{\dagger R,L}(x) \frac{i}{2} \underline{\sigma}(\mathbf{n}_i \times \partial_\tau \mathbf{n}_i) \alpha^{R,L}(x) \\
\Leftrightarrow \alpha^{\dagger R,L}(x) U(x) K_{x,\tau} U^\dagger(x) \alpha^{R,L}(x) &= \alpha^{\dagger R,L}(x) \frac{i}{2} \underline{\sigma}(\mathbf{n}_i \times \partial_\tau \mathbf{n}_i) \alpha^{R,L}(x)
\end{aligned}$$

gelten muß. Bei diesen Übersetzungsvorschriften macht sich also auch wieder die Verknüpfung der unitären Transformation mit den Fermionen und dem bei ihnen durchgeführten Kontinuumsübergang bemerkbar. Das Vorzeichen des nichtdiagonalen Anteils des Eichfeldes  $K_{x,\tau}$  hängt explizit davon ab, in welchem Band die Fermi-Punkte liegen, um die man entwickelt.

Für die Wirkung im System mit globaler Spin-Quantisierungsachse bekommt man dann

$$\begin{aligned}
S_F^{R,L} &= \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2a} \int dx f^{\dagger R,L} \left\{ (D_\tau - K_\tau) \mp i v_F (D_x - K_x) + \right. \\
&\quad \left. + (1 + w_{\uparrow\downarrow}) (K_\tau \mp i v_F K_x) + 2 j_B w_{\uparrow\downarrow} K_\tau \right\} f^{R,L} \\
S_F^{R,L} &= \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2a} \int dx \alpha^{\dagger R,L} \left\{ \partial_\tau \mp i v_F \partial_x + \right. \\
&\quad \left. + \frac{i}{2} (1 + w_{\uparrow\downarrow}) (\underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n}) \mp i v_F \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_x \mathbf{n})) + \right. \\
&\quad \left. + i j_B w_{\uparrow\downarrow} \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n}) \right\} \alpha^{R,L}.
\end{aligned}$$

### 3.7 Wirkung in Form eines Weyl-Feldes

Unter einem Weyl-Feld versteht man ein Dirac-Feld für masselose Fermionen. Die in den letzten Kapiteln abgeleitete Wirkung kann in Form eines solchen Feldes geschrieben werden. Dazu ist zunächst die Wick-Rotation  $\tau = -it$  und  $x^0 = v_F t$  sowie  $x^1 = x$  auszuführen. Sie bedeutet, daß man mit

$$\begin{aligned}
\int_0^\beta d\tau \dots &= \frac{1}{i v_F} \int_0^{i v_F \beta} dx^0 \dots & \partial_\tau \dots &= i v_F \partial_0 \dots \\
\int dx \dots &= \int dx^1 \dots & \partial_x \dots &= \partial_1 \dots
\end{aligned}$$

ersetzen muß, um dann

$$\begin{aligned}
S_F^{R,L} &= \frac{1}{2a} \int_0^{i v_F \beta} dx^0 \int dx^1 \alpha^{\dagger R,L}(x) \left\{ \partial_0 \mp \partial_1 + \right. \\
&\quad \left. + \frac{i}{2} (1 + w_{\uparrow\downarrow}) (\underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_0 \mathbf{n}) \mp \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_1 \mathbf{n})) + \right. \\
&\quad \left. + i j_B w_{\uparrow\downarrow} \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_0 \mathbf{n}) \right\} \alpha^{R,L}(x)
\end{aligned}$$

zu erhalten. Mit der Spinor-Definition

$$\psi^\dagger = \begin{pmatrix} \alpha^{\dagger R} \\ \alpha^{\dagger L} \end{pmatrix} ; \quad \psi = \begin{pmatrix} \alpha^R \\ \alpha^L \end{pmatrix}$$

ergibt sich die Wirkung in Form eines Weyl-Feldes

$$S_F = \frac{1}{2a} \int_0^{iv_F \beta} dx^0 \int dx^1 \psi^\dagger \left\{ \gamma^0 \gamma^\mu \partial_\mu + \right. \\ \left. + \frac{i}{2} (1 + w_{\uparrow\downarrow}) \gamma^0 \gamma^\mu \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_\mu \mathbf{n}) + \right. \\ \left. + i j_B w_{\uparrow\downarrow} \gamma^0 \gamma^0 \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_0 \mathbf{n}) \right\} \psi.$$

Die hierbei auftretenden Gamma-Matrizen sind durch

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

gegeben. Sie gehorchen der Algebra der Dirac-Matrizen.

$$[\gamma^\mu, \gamma^\nu]_+ = 2 \eta^{\mu\nu} \mathbf{1} \quad \underline{\eta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Mit dem adjungierten Spinor

$$\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0$$

folgt

$$S_F = -\frac{i}{2a} \int_0^{iv_F \beta} dx^0 \int dx^1 \bar{\psi} \left\{ i \gamma^\mu \partial_\mu + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} (1 + w_{\uparrow\downarrow}) \gamma^\mu \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_\mu \mathbf{n}) + \right. \\ \left. + j_B w_{\uparrow\downarrow} \gamma^0 \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_0 \mathbf{n}) \right\} \psi.$$

Aus der Kontinuität ergibt sich die Form des fermionischen Stromes

$$\partial_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi = 0 \quad \Rightarrow \quad j_F^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi.$$

Hier koppelt aber nicht der U(1) Strom der Fermionen an das nichtlineare  $\sigma$ -Modell, sondern der SU(2) Spin-Strom der Fermionen<sup>18</sup>

$$\mathbf{j}_F^\mu = \bar{\psi} \underline{\sigma} \gamma^\mu \psi .$$

Mit dem Spin-Strom des nichtlinearen  $\sigma$ -Modells

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{S,\tau} &= -\frac{\rho_S}{v_S} (\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n}) & \Rightarrow & \quad \mathbf{j}_{S,0} = -\rho_S \frac{iv_F}{v_S} (\mathbf{n} \times \partial_0 \mathbf{n}) \\ \mathbf{j}_{S,x} &= -\rho_S (\mathbf{n} \times \partial_x \mathbf{n}) & \Rightarrow & \quad \mathbf{j}_{S,1} = -\rho_S (\mathbf{n} \times \partial_1 \mathbf{n}) \end{aligned}$$

erhält man insgesamt eine Strom-Strom-Kopplung zwischen den beiden im Modell vorkommenden Spin-Strömen:

$$\begin{aligned} S_F = -\frac{i}{2a} \int_0^{iv_F \beta} dx^0 \int dx^1 & \left[ \bar{\psi} i \gamma^\mu \partial_\mu \psi - \right. \\ & \left. - \frac{1+w_{\uparrow\downarrow}}{2\rho_S} \mathbf{j}_F \mathbf{j}_{S,1} + \left( \frac{1+w_{\uparrow\downarrow}}{2} + j_B w_{\uparrow\downarrow} \right) \frac{1}{\rho_S} \frac{iv_S}{v_F} \mathbf{j}_F^0 \mathbf{j}_{S,0} \right] \end{aligned}$$

Hierbei wurde  $\rho_S = 2v_H s^2$  verwendet. Der Wechselwirkungsanteil, der von der Berry-Phase herrührt, bricht die Raum-Zeit-Invarianz, da hier nur die Nullkomponenten der Ströme aneinander koppeln.

---

<sup>18</sup> siehe hierzu auch Anhang K

## 4 Kontinuumsübergang bei einer Leiter

### 4.1 Kontinuumsübergang für die Spins

Beim Kontinuumsübergang für die Spins müssen bei einer Spin-Fermion-Leiter häufig die gleichen Rechnungen wie bei einer Spin-Fermion-Kette durchgeführt werden. Deshalb sind in den folgenden Kapiteln nur die Unterschiede und Verknüpfungspunkte zur Ableitung der Feldtheorie einer Spin-Fermion-Kette dargestellt.

Zunächst einmal gilt für die Zustandssumme einer Leiter genau das gleiche wie bei einer Kette.

$$Z = \text{Tr}_{\{F\}} \left( e^{-\beta H_F} \text{Tr}_{\{S\}} e^{-\beta(H_{FS} + H_S)} \right)$$

In der zweiten Spur über die Spins soll wieder mit Hilfe der Hubbard-Stratonovich Transformation die Spin-Spin-Wechselwirkung entkoppelt werden. Beim Heisenberg-Term

$$H_S = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i, i' \rangle} J_{ii'} (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_{i'})^2 + \text{const.}$$

führt man unter periodischen Randbedingungen für die y-Richtung, was

$$J_{ii'} = \begin{cases} J_{\parallel} & \text{für x - Richtung} \\ J_{\perp} & \text{für y - Richtung} \end{cases}$$

bedeutet, die Fourier-Transformation in den Impulsraum durch. Das ergibt

$$H_S = -2 \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \quad \text{mit} \quad f(\mathbf{k}) = J_{\parallel} (1 - \cos k_x a) + \frac{J_{\perp}}{2} (1 - \cos k_y a)$$

und

$$k_x = 0, \dots, \frac{2\pi N}{L}$$

$$k_y = 0, \frac{\pi}{a} \quad .$$

Wendet man die Hubbard-Stratonovich Transformation (3.1) an und kehrt wieder in den Ortsraum zurück, folgt

$$\begin{aligned} \exp\left\{\frac{\varepsilon}{2} \sum_{\langle i,i' \rangle} J_{ii'} (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_{i'})^2\right\} &= \\ &= \int D\underline{\phi} \exp\left\{-\frac{\varepsilon}{2} \sum_{\langle i,i' \rangle} J_{ii'} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'})^2 - 2\varepsilon \sum_{\langle i,i' \rangle} J_{ii'} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'}) \mathbf{S}_i\right\}. \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich so für die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z &= \int D\underline{\phi} Dc^\dagger Dc e^{-S} \\ S &= -\int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger \frac{\partial}{\partial \tau} c_{j,\sigma} - H_F - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,i' \rangle} J_{ii'} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'})^2 + \sum_i \ln Z_i \right] \end{aligned}$$

und die Einteilchen-Zustandssumme

$$Z_i = \text{Tr} \left[ T \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \left( 2 \sum_{(i';i)} J_{ii'} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'}) + J_K \mathbf{R}_i \right) \mathbf{S}_i \right\} \right].$$

Mit der Methode der verallgemeinerten Berry-Phasen läßt sich die Einteilchen-Zustandssumme für eine Leiter bestimmen. Unter Verwendung der Abkürzung

$$\underline{\Phi}_i = \underline{\Psi}_i + J_K \mathbf{R}_i = 2 \sum_{(i';i)} J_{ii'} (\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_{i'}) + J_K \mathbf{R}_i \quad (4.1)$$

folgen genau die gleichen Ausdrücke wie bei einer Spin-Fermion-Kette (3.3). Diese lassen sich nach Potenzen von  $J_K \mathbf{R}_i$  entwickeln, was bis auf die Definition (4.1) die schon bekannten Resultate liefert.

Aus der klassischen Wirkung des Hubbard-Stratonovich-Feldes folgt die antiferromagnetische Konfiguration

$$\underline{\phi}_i = s(-1)^i \mathbf{n}_i \quad \text{mit} \quad |\mathbf{n}_i|^2 = 1. \quad (4.2)$$

An dieser Stelle ist es sinnvoll, den Platzindex  $i$  in zwei aufzuteilen:

$p$ : Platzindex in x - Richtung d. h.  $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$q$ : Platzindex in y - Richtung d. h.  $q = 1, 2$

Somit wird aus (4.2)



$$\phi_{-pq} = s(-1)^{p+q} \mathbf{n}_{pq}.$$

Benachbarte Ordnungsparameter  $\mathbf{n}_{p1}$  und  $\mathbf{n}_{p2}$  können mit den Basiswechsel

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_p &= \frac{1}{2N_p} (\mathbf{n}_{p2} + \mathbf{n}_{p1}) \\ \mathbf{m}_p &= \frac{1}{2a} (\mathbf{n}_{p2} - \mathbf{n}_{p1}) \end{aligned}$$

zu einem Ordnungsparameter  $\mathbf{n}_p$  zusammengefaßt werden. Die Umkehrung dieses Basiswechsels lautet

$$\mathbf{n}_{pq} = N_p \mathbf{n}_p + (-1)^q a \mathbf{m}_p. \quad (4.3)$$

Den Faktor  $N_p$  benötigt man zur Normierung von  $\mathbf{n}_p$  auf eins, er ist

$$N_p = \sqrt{1 - a^2 \mathbf{m}_p^2}.$$

Nun ist die Gradientenentwicklung für den Ordnungsparameter in x-Richtung durchzuführen.

$$\mathbf{n}_{p'q} = \mathbf{n}_{pq} + a_{pp'} \frac{\partial \mathbf{n}_{pq}}{\partial x} + \frac{1}{2} a_{pp'}^2 \frac{\partial^2 \mathbf{n}_{pq}}{\partial x^2} + \mathcal{O}(a^3)$$

Die einzelnen Entwicklungskoeffizienten sind

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{n}_{pq}}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} (N_p \mathbf{n}_p) + (-1)^q a \frac{\partial \mathbf{m}_p}{\partial x} = N_p \frac{\partial \mathbf{n}_p}{\partial x} + (-1)^q a \frac{\partial \mathbf{m}_p}{\partial x} + \mathcal{O}(a^2) \\ \frac{\partial^2 \mathbf{n}_{pq}}{\partial x^2} &= N_p \frac{\partial^2 \mathbf{n}_p}{\partial x^2} + (-1)^q a \frac{\partial^2 \mathbf{m}_p}{\partial x^2} + \mathcal{O}(a^2) \end{aligned}$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_{p'q} &= N_p \mathbf{n}_p + (-1)^q a \mathbf{m}_p + a_{pp'} N_p \frac{\partial \mathbf{n}_p}{\partial x} + (-1)^q a a_{pp'} \frac{\partial \mathbf{m}_p}{\partial x} + \\ &+ \frac{1}{2} a_{pp'}^2 N_p \frac{\partial^2 \mathbf{n}_p}{\partial x^2} + \mathcal{O}(a^3) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Setzt man nacheinander (4.2) (4.3) und (4.4) in den quadratische Anteil der Wirkung

$$S_q = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_{\langle i, i' \rangle} J_{ii'} (\phi_{\underline{i}} - \phi_{\underline{i}'})^2$$

ein und beachtet, daß

$$\sum_{(p';p)} 1 = z_{\text{Kette}} = z - 1 = 2 \quad \sum_{(p';p)} a_{pp'} = 0 \quad \sum_{(p';p)} a_{pp'}^2 = 2a^2 \quad (4.5)$$

sowie

$$\sum_q (-1)^q = 0$$

gilt, bekommt man unter Vernachlässigung eines konstanten Faktors das Resultat

$$S_q = \text{const.} - J_{\parallel} a^2 s^2 \int_0^\beta d\tau \sum_{p,q} N_p^2 (\partial_x \mathbf{n}_p)^2 + \mathcal{O}(a^3).$$

Bei den restlichen Termen stellt sich die Aufgabe,  $\underline{\Psi}_i$  durch (4.2) (4.3) und (4.4) auszudrücken:

$$\begin{aligned} \underline{\Psi}_i &= \underline{\Psi}_{pq} = 2s(-1)^i \sum_{(i';i)} J_{ii'} (\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_{i'}) \\ \underline{\Psi}_{pq} &= 2s(-1)^{p+q} \left( \sum_{(p';p)} J_{\parallel} (\mathbf{n}_{pq} + \mathbf{n}_{p'q}) + 2J_{\perp} N_p \mathbf{n}_p \right). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Einsetzen von (4.3) und (4.4) in (4.6) liefert Summen der Art (4.5). Unter Beachtung von  $\mathbf{n}_p \mathbf{m}_p = 0$  folgt

$$\begin{aligned} \underline{\Psi}_{pq} &= (-1)^{p+q} 4s (J_{\parallel} z_{\text{Kette}} + J_{\perp}) N_p \mathbf{n}_p \cdot \\ &\quad \cdot \left( 1 + a^2 \frac{J_{\parallel}}{2(J_{\parallel} z_{\text{Kette}} + J_{\perp})} \frac{\mathbf{n}_p \partial_x^2 \mathbf{n}_p}{|\mathbf{n}_p|^2} \right) + \mathcal{O}(a^3). \end{aligned}$$

Führt man formal die Koordinationszahl  $\tilde{z}$  mit

$$\tilde{z} = z_{\text{Kette}} + \frac{J_{\perp}}{J_{\parallel}}$$

ein, und faßt  $N_p$  und  $\mathbf{n}_p$  zu  $\tilde{\mathbf{n}}_p = N_p \mathbf{n}_p$  zusammen, ergibt sich unter Beachtung von

$$\frac{\partial N_p}{\partial x} = \mathcal{O}(a^3)$$

formal das selbe Resultat wie bei einer einzelnen Spin-Fermion-Kette

$$\underline{\Psi}_{pq} = (-1)^{p+q} 4 \frac{v_H}{a} s \tilde{z} \tilde{\mathbf{n}}_p \left( 1 + \frac{a^2}{2\tilde{z}} \frac{\tilde{\mathbf{n}}_p \partial_x^2 \tilde{\mathbf{n}}_p}{|\tilde{\mathbf{n}}_p|^2} \right) + \mathcal{O}(a^3)$$

mit der Geschwindigkeit  $v_H = J_{\parallel} a = \text{const}$ .

Für die zeitliche Ableitung folgt

$$\frac{\partial \mathbf{n}_{pq}}{\partial \tau} = N_p \dot{\mathbf{n}}_p + \mathcal{O}(a^2)$$

$$\underline{\dot{\Psi}}_{pq} = (-1)^{p+q} 4 \frac{v_H}{a} s \tilde{z} \dot{\tilde{\mathbf{n}}}_p + \mathcal{O}(a^2).$$

Betrachtet man bei der gesamten Näherung also nur Terme bis  $\mathcal{O}(a^2)$  einschließlich, gilt

$$N_p \partial_x \mathbf{n}_p = \partial_x (N_p \mathbf{n}_p) \quad \text{und} \quad N_p \partial_\tau \mathbf{n}_p = \partial_\tau (N_p \mathbf{n}_p).$$

Die Resultate bei der Spin-Fermion-Kette können übernommen werden. Hierzu sind folgende Ersetzungen durchzuführen:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_i &\rightarrow \tilde{\mathbf{n}}_p & \partial_{x,\tau} N_p &= \mathcal{O}(a^2) \\ z &\rightarrow \tilde{z} \\ \sum_i \dots &\rightarrow \sum_{p,q} \dots \\ (-1)^i &\rightarrow (-1)^{p+q} \end{aligned}$$

Beim topologischen Term muß man etwas aufpassen. Wegen  $q = 1, 2$  verschwindet er.

$$\begin{aligned} S_1^{\text{alt}} &= i s \int_0^\beta d\tau \sum_{p,q} (-1)^i A_p^\alpha [\tilde{\mathbf{n}}_p] \frac{d\tilde{\mathbf{n}}_p}{d\tau} \\ &= \sum_q (-1)^q i s a \int_0^\beta d\tau \sum_{p=\text{gerade}} \tilde{\mathbf{n}}_p \left( \frac{\partial \tilde{\mathbf{n}}_p}{\partial x} \times \frac{\partial \tilde{\mathbf{n}}_p}{\partial \tau} \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

An dieser Stelle ist leicht einzusehen, daß der topologische Term nur bei einzelnen Ketten und Leitern aus einer ungeraden Anzahl von Ketten vorkommt.

Insgesamt bekommt man jetzt für die Wirkung folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned}
S = -\int_0^\beta d\tau & \left[ \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger \frac{\partial}{\partial \tau} c_{j,\sigma} - \sum_{\langle j,j' \rangle} \bar{t}_{jj'} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j',\sigma} - \tilde{t} \sum_{\langle j,j';i \rangle} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \right. \\
& + \frac{v_K s}{a} \sum_{p,q} N_p (-1)^{p+q} (\mathbf{n}_p \mathbf{R}_{pq}) + \\
& + i \frac{v_K}{4 v_H \tilde{z}} \sum_{p,q} N_p^2 \mathbf{R}_{pq} \left( \mathbf{n}_p \times \frac{\partial \mathbf{n}_p}{d\tau} \right) - \\
& \left. - v_H s^2 a \sum_i N_p^2 \left( \left( \frac{\partial \mathbf{n}_p}{dx} \right)^2 + \left( \frac{\partial \mathbf{n}_p}{v_S d\tau} \right)^2 \right) \right] + \mathcal{O}(a^2, R^2)
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
\tilde{z} &= z_{\text{Kette}} + \frac{J_\perp}{J_\parallel} = 2 + \frac{J_\perp}{J_\parallel} \\
v_S &= 2\sqrt{2} v_H s \sqrt{\tilde{z}} \\
v_H &= J_\parallel a \\
v_K &= J_K a
\end{aligned}$$

Die Ausdehnung des Spin-Systems in y-Richtung macht sich nur noch im Normierungsfaktor

$$N_p = \sqrt{1 + a^2 \mathbf{m}_p} = 1 + \mathcal{O}(a^2)$$

bemerkbar. Führt man für das Spin-System den Grenzübergang  $a \rightarrow 0$  in y-Richtung aus, können in der abgeleiteten Wirkung alle Normierungsfaktoren  $N_p$  gleich eins gesetzt werden.

Das Spin-System wird nach diesem Kontinuumsübergang durch das nichtlineare  $\sigma$ -Modell, das keine Ausdehnung in y-Richtung aufweist, beschrieben. Mit diesem streng eindimensionalen System wechselwirken die Fermionen.

## 4.2 Kombinationszustände

Beim Kontinuumsübergang für die Spins bei einer Leiter ist man vom Platzindex  $i$  zu den zwei Indizes  $p$  und  $q$  übergegangen. Aus diesem Grund muß auch der rein fermionische Anteil  $H_F$  und  $\mathbf{R}_i$  durch diese Zählweise ausgedrückt werden. Mit der Notation

$$(p, q) = i$$

folgt

$$H_F = \sum_{\substack{\langle j, j' \rangle \\ \sigma}} \bar{t}_{jj'} c_{j, \sigma}^\dagger c_{j', \sigma} + \tilde{t} \sum_{\substack{\langle j, j' \rangle; (p, q) \\ \sigma}} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j, \sigma}^\dagger c_{j', \sigma}$$

$$\mathbf{R}_i = \sum_{\substack{(j, j') \rangle; (p, q) \\ \sigma, \sigma'}} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j, \sigma}^\dagger \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{j', \sigma'} .$$

Mit der symmetrischen Kombination

$$\tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 1} = \frac{1}{2} \sum_{(j; (p, q))} (-1)^{\alpha_{ij}} c_{j, \sigma}^\dagger$$

$$\tilde{c}_{pq, \sigma'}^1 = \frac{1}{2} \sum_{(j'; (p, q))} (-1)^{\alpha_{ij'}} c_{j', \sigma'}$$

bekommt man für die Wechselwirkungen, wie beim Fall einer einzelnen Kette, eine lokale Form

$$H_K = -4s J_K \sum_{\substack{p, q \\ \sigma, \sigma'}} (-1)^i \tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 1} \mathbf{n}_p \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} \tilde{c}_{pq, \sigma'}^1$$

$$H_B = -i \frac{J_K}{J_{\parallel}} \tilde{z} \sum_{\substack{p, q \\ \sigma, \sigma'}} \tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 1} \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} (\mathbf{n}_p \times \partial_\tau \mathbf{n}_p) \tilde{c}_{pq, \sigma'}^1 .$$

Für den zweiten Term von  $H_F$  folgt

$$\tilde{t} \sum_{\substack{\langle j, j' \rangle; (p, q) \\ \sigma}} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j, \sigma}^\dagger c_{j', \sigma} = 4 \tilde{t} \sum_{\substack{p, q \\ \sigma}} \tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{pq, \sigma}^1 .$$

Beim ersten Term von  $H_F$  benötigt man wieder die nichtsymmetrischen Kombinationszustände  $\tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 2}$ ,  $\tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 3}$  und  $\tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 4}$ :

$$\begin{aligned}
\sum_{\langle j, j' \rangle} \bar{t}_{jj'} c_{j, \sigma}^\dagger c_{j', \sigma} &= -t_{00} \sum_{\langle j, j' \rangle} (-1)^{\beta_{jj'}} c_{j, \sigma}^\dagger c_{j', \sigma} = \\
&= t_{00} \sum_{\langle j, j'; i \rangle} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j, \sigma}^\dagger c_{j', \sigma} - \\
&\quad - t_{00} \sum_{i, \sigma} \left\{ (-1)^{\alpha_{i, i+e_y/2} + \alpha_{i, i-e_y/2}} c_{i+a e_y/2, \sigma}^\dagger c_{i-a e_y/2, \sigma} + \right. \\
&\quad \left. + (-1)^{\alpha_{i, i+e_x/2} + \alpha_{i, i-e_x/2}} c_{i+a e_x/2, \sigma}^\dagger c_{i-a e_x/2, \sigma} + h.c. \right\}
\end{aligned}$$

Für den ersten Term hiervon ergibt sich eine Konstante

$$t_{00} \sum_{\langle j, j'; i \rangle} (-1)^{\alpha_{ij} + \alpha_{ij'}} c_{j, \sigma}^\dagger c_{j', \sigma} = 4 t_{00} \sum_{p, q} \tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{pq, \sigma}^1 = const,$$

beim zweiten bekommt man

$$-t_{00} \sum_{p, q} \left\{ c_{pq, \sigma}^{\dagger 2} c_{pq, \sigma}^4 + c_{pq, \sigma}^{\dagger 4} c_{pq, \sigma}^2 \right\} = -\frac{t_{00}}{2} \sum_{p, \sigma} \left\{ \tilde{c}_{p1, \sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{p2, \sigma}^1 + \tilde{c}_{p2, \sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{p1, \sigma}^1 + \dots \right\},$$

wobei die Terme mit nichtsymmetrischen Kombinationszuständen nicht explizit aufgeführt wurden.

Beim dritten Term geht man analog vor.

$$-t_{00} \sum_{p, q} \left\{ c_{pq, \sigma}^{\dagger 1} c_{pq, \sigma}^3 + h.c. \right\} = -t_{00} \sum_{\langle p, p' \rangle} c_{pq, \sigma}^{\dagger 3} c_{p'q, \sigma}^3 = -\frac{t_{00}}{4} \sum_{\langle i, i' \rangle} \left\{ \tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{p'q, \sigma}^1 + \dots \right\}$$

Insgesamt bekommt man so folgende Terme:

$$\begin{aligned}
H_F &= -\frac{t_{00}}{4} \sum_{\langle p, p' \rangle} \left\{ \tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{p'q, \sigma}^1 + \dots \right\} - \frac{t_{00}}{2} \sum_{p, \sigma} \left\{ \tilde{c}_{p1, \sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{p2, \sigma}^1 + \tilde{c}_{p2, \sigma}^{\dagger 1} \tilde{c}_{p1, \sigma}^1 + \dots \right\} - const \\
H_K &= -4 s J_K \sum_{\substack{p, q \\ \sigma, \sigma'}} (-1)^{p+q} \tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 1} \mathbf{n}_p \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} \tilde{c}_{pq, \sigma'}^1 \\
H_B &= -i \frac{J_K}{J_{\parallel} \tilde{z}} \sum_{\substack{p, q \\ \sigma, \sigma'}} \tilde{c}_{pq, \sigma}^{\dagger 1} \underline{\sigma}_{\sigma\sigma'} \left( \mathbf{n}_p \times \partial_{\tau} \mathbf{n}_p \right) \tilde{c}_{pq, \sigma'}^1
\end{aligned}$$

Als nächstes müßte man auch wieder die Bandstruktur des statischen Anteils bestimmen, um dann zu sehen, mit welchem Gewicht der symmetrische Zustand im tiefsten Bandzustand vorkommt. Es ist aber nicht zu erwarten, daß sich eine qualitative Änderung ge-

genüber dem Fall einer einzelnen Kette ergibt. Deshalb sollen im nächsten Kapitel die nichtsymmetrischen Zustände gleich vernachlässigt und mit dem Kontinuumsübergang für die Fermionen fortgefahren werden.

### 4.3 Kontinuumsübergang für die Fermionen

Nach dem Übergang auf Kombinationszustände ist man bei folgendem physikalischen Bild angelangt: Fermionen hüpfen von einem Platz zum nächsten, entlang und zwischen den beiden Ketten. Sie wechselwirken lokal mit der streng eindimensionalen Spin-Struktur. Obwohl die Hüpfmatrixelemente entlang und quer zur Leiterrichtung gleich groß sind, ist es sinnvoll, diese separat zu betrachten. Im Grenzfall  $t_{\parallel} \gg t_{\perp}$  bzw.  $t_{\perp} \rightarrow 0$  sollten die Ausdrücke mit denen bei einer Kette übereinstimmen.

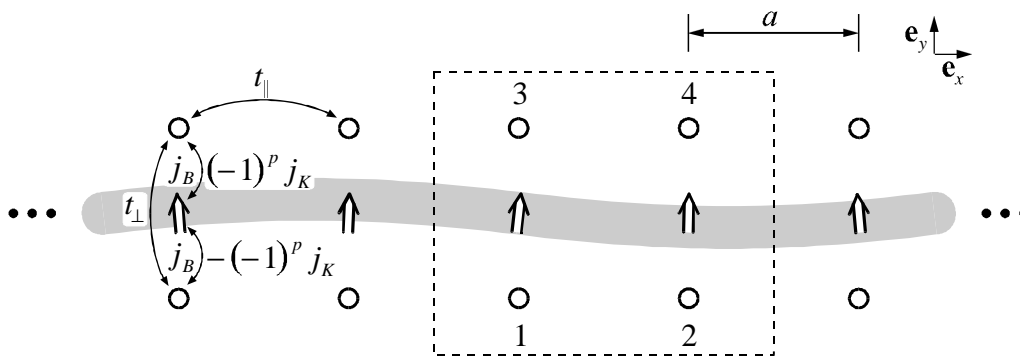


Abb. 4.1: Struktur der Spin-Fermion-Leiter mit den Platznumerierungen in der Einheitszelle.

Verwendet man die Bezeichnungen

$$\alpha_{pq,\sigma}^\dagger = \tilde{c}_{pq,\sigma}^{\dagger 1} \quad \alpha_{pq,\sigma} = \tilde{c}_{pq,\sigma}^1,$$

hat die Wirkung die Form

$$S = -\int_0^\beta d\tau \left( \sum_i \alpha_i^\dagger \partial_\tau \alpha_i - H_{F\parallel} - H_{F\perp} - H_K - H_B \right) - S_{Nl\sigma M}$$

$$\begin{aligned}
H_\tau &= \sum_{p,q} \alpha_{pq}^\dagger \partial_\tau \alpha_{pq} \\
H_{F\parallel} &= t_\parallel \sum_{\substack{\langle p,p' \rangle \\ q}} \alpha_{pq}^\dagger \alpha_{p'q} \\
H_{F\perp} &= 2t_\perp \sum_p \{ \alpha_{p1}^\dagger \alpha_{p2} + h.c. \} \\
H_K &= j_K \sum_{p,q} (-1)^{p+q} \alpha_{pq}^\dagger \mathbf{n}_p \underline{\sigma} \alpha_{pq} \\
H_B &= i j_B \sum_{p,q} \alpha_{pq}^\dagger \underline{\sigma} (\mathbf{n}_p \times \partial_\tau \mathbf{n}_p) \alpha_{pq}
\end{aligned}$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}
t_\parallel &= t_\perp = -\frac{t_{00}}{4} \\
j_K &= -4s J_K \\
j_B &= -\frac{J_K}{J_\parallel \tilde{z}} \quad .
\end{aligned}$$

Die Transformation auf das System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse geschieht mit

$$U_p^\dagger \mathbf{n}_p \underline{\sigma} U_p = \underline{\sigma}^z$$

und

$$\begin{aligned}
\alpha_{pq}^\dagger &= f_{pq}^\dagger U_p^\dagger \\
\alpha_{pq} &= U_p f_{pq} \quad ,
\end{aligned}$$

was folgende Terme ergibt:

$$\begin{aligned}
H_\tau &= \sum_{p,q} f_{pq}^\dagger (\partial_\tau + U_p^\dagger \partial_\tau U_p) f_{pq} \\
H_{F\parallel} &= t_\parallel \sum_{\substack{\langle p,p' \rangle \\ q}} f_{pq}^\dagger U_p^\dagger U_{p'} f_{p'q} \\
H_{F\perp} &= 2t_\perp \sum_p \{ f_{p1}^\dagger f_{p2} + h.c. \} \\
H_K &= j_K \sum_{p,q} (-1)^{p+q} f_{pq}^\dagger \underline{\sigma}^z f_{pq} \\
H_B &= i j_B \sum_{p,q} f_{pq}^\dagger U_p^\dagger \underline{\sigma} (\mathbf{n}_p \times \partial_\tau \mathbf{n}_p) U_p f_{pq} \quad .
\end{aligned}$$



Den Hüpf-Term entlang der Leiter entwickelt man wie bei einer Kette

$$H_{F\parallel} = t_{\parallel} \sum_{\langle p,p' \rangle} f_p^{\dagger} f_{p'} + \Omega \sum_{\langle p,p' \rangle} (\theta(p' - p) - \theta(p - p')) f_p^{\dagger} U_p^{\dagger} \partial_x U_p f_{p'} + \mathcal{O}(a^2),$$

wobei der Entwicklungskoeffizient  $\Omega$  wieder gleich dem Vorfaktor von  $\partial_x f_p$  nach dem Kontinuumsübergang ist. Der Term zerfällt in einen wechselwirkungsfreien und einen wechselwirkenden Anteil.

$$\begin{aligned} H_{F\parallel} &= H_{F\parallel,0} + H_{F\parallel,WW} \\ H_{F\parallel,0} &= t_{\parallel} \sum_{\langle p,p' \rangle} f_p^{\dagger} f_{p'} \\ H_{F\parallel,WW} &= \Omega \sum_{\langle p,p' \rangle} (\theta(p' - p) - \theta(p - p')) f_{pq}^{\dagger} U_p^{\dagger} \partial_x U_p f_{pq} \end{aligned}$$

Als Einheitszelle wählt man den in Abb. 4.1 eingezeichneten Bereich und schreibt dann die einzelnen Terme mit den Platznummern an. Durch Fourier-Transformation mit anschließender unitärer Transformation

$$\begin{aligned} f_{p_m, \kappa}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k, \lambda} f_{k, \lambda}^{\dagger} e_{k, \kappa, \lambda}^{\dagger} \exp(i k x_{p_m, \kappa}) \\ f_{p'_m, \kappa'} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k', \lambda'} e_{k', \kappa', \lambda'} f_{k', \lambda'} \exp(-i k' x_{p'_m, \kappa'}) \\ w_{p_m, \kappa} &= \sum_q w_q \exp(-i q x_{p_m, \kappa}) \end{aligned}$$

erhält man einen Hamilton-Operator der Form

$$H = \sum_{\substack{k, k', q \\ \lambda, \lambda' \\ \kappa, \kappa'}} f_{k, \lambda}^{\dagger} e_{k, \kappa, \lambda}^{\dagger} M^{\kappa, \kappa'} e_{k', \kappa', \lambda'} f_{k', \lambda'},$$

wobei die Matrix  $\mathbf{M}$  vierdimensional ist und sich aus der Addition der folgenden Matrizen ergibt:

$$\mathbf{M}_{F\parallel,0} = 2 t_{\parallel} \delta_{k, k'} \cos(k' a) \delta_{\sigma\sigma'} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{F\perp} = 2t_{\perp} \delta_{k,k'} \delta_{\sigma\sigma'} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{F\parallel, WW} = \Omega(\theta(k) - \theta(-k)) \delta_{k-q, k'} (U^+ \partial_x U)_q \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M}_K = j_K \delta_{k,k'} \sigma^z \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M}_B = j_B \delta_{k-q, k'} (iU^+ \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_{\tau} \mathbf{n}) U)_q \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M}_{\tau} = \left( \delta_{k,k'} \partial_{\tau} + \delta_{k-q, k'} (U^+ \partial_{\tau} U)_q \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Beim statischen Anteil sind die beiden Fälle  $\sigma = \uparrow$  und  $\sigma = \downarrow$  entartet, weshalb für die Bandberechnung die Betrachtung von  $\sigma = \uparrow$  genügt. Das zu lösende Eigenwertproblem lautet

$$\det(\mathbf{M}_{F\parallel, 0, \uparrow\uparrow} + \mathbf{M}_{F\perp, \uparrow\uparrow} + \mathbf{M}_{K, \uparrow\uparrow} - \varepsilon \mathbf{1}) = 0,$$

bzw. ausgeschrieben:

$$\begin{vmatrix} -\varepsilon & 2t_{\parallel} \cos(k'a) & 2t_{\perp} & 0 \\ 2t_{\parallel} \cos(k'a) & -\varepsilon & 0 & 2t_{\perp} \\ 2t_{\perp} & 0 & -\varepsilon & 2t_{\parallel} \cos(k'a) \\ 0 & 2t_{\perp} & 2t_{\parallel} \cos(k'a) & -\varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

Hieraus bekommt man folgende vier Bänder:

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= -\sqrt{j_K^2 + 4t_{\parallel}^2 \left( \cos(k'a) + \frac{t_{\perp}}{t_{\parallel}} \right)^2} & \varepsilon_1 &= -\sqrt{j_K^2 + 4t_{\parallel}^2 \left( \cos(k'a) - \frac{t_{\perp}}{t_{\parallel}} \right)^2} \\ \varepsilon_2 &= +\sqrt{j_K^2 + 4t_{\parallel}^2 \left( \cos(k'a) - \frac{t_{\perp}}{t_{\parallel}} \right)^2} & \varepsilon_3 &= +\sqrt{j_K^2 + 4t_{\parallel}^2 \left( \cos(k'a) + \frac{t_{\perp}}{t_{\parallel}} \right)^2}. \end{aligned}$$

Anhand der Skizze des Bandschemas erkennt man die Änderungen, die sich von der reinen Tight-Binding-Kette über die Tight-Binding-Leiter hin zur hier betrachteten Spin-Fermion-Leiter ergeben. Um das Ganze deutlicher zu machen, wurde in Abb. 4.1 nicht der realistische Wert  $t_{\perp} = t_{\parallel}$ , sondern  $t_{\perp} = 1/2 t_{\parallel}$  gewählt.

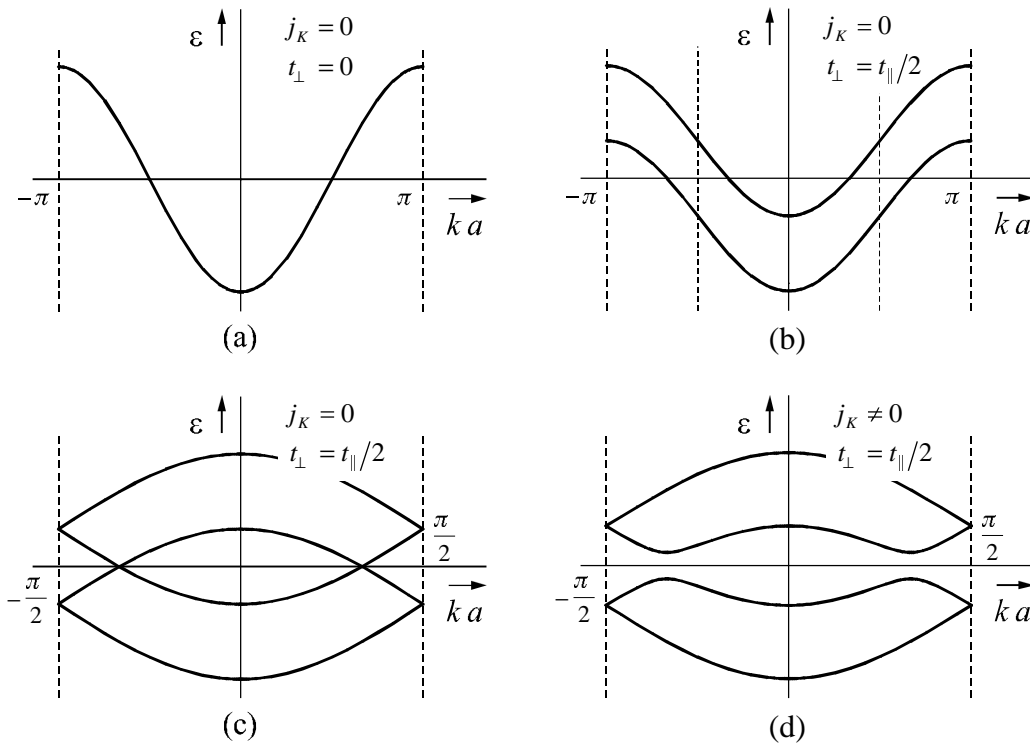


Abb. 4.2: Bandstruktur einer Tight-Binding-Kette (a), einer Tight-Binding-Leiter mit normal großer Einheitszelle (b) und mit doppelt so großer Einheitszelle (c) sowie einer Spin-Fermion-Leiter (d).

Bestimmt man zunächst die Bandstruktur einer Tight-Binding-Kette, ergibt sich ein Kosinus-Band. Koppelt man zwei Tight-Binding-Ketten zu einer Tight-Binding-Leiter, spaltet dieses Kosinus-Band in zwei auf, wobei der Bandabstand durch das Matrixelement der Hüpfprozesse quer zur Leiter bestimmt wird. Er beträgt  $4t_{\perp}$ . Verdoppelt man die Größe der Einheitszelle, werden die Bänder von den Bereichen  $-\pi \leq ka < -\pi/2$  und  $\pi/2 < ka \leq \pi$  in den Bereich der verkleinerten Brillouin-Zone  $-\pi/2 \leq ka \leq \pi/2$  "hineingeklappt". "Schaltet" man nun die Kondo-Wechselwirkung ein, öffnet sich eine Energielücke an der Bandentartung bei  $\varepsilon = 0$  und nicht etwa am Rand der Brillouin-Zone.

Betrachtet man Abb. 4.1 (d) könnte man auf den Gedanken kommen, daß das Bandminimum bei  $k = 0$  des zweituntersten Bandes evtl. unter der Fermi-Energie liegt. Dann hätte man es mit vier statt mit zwei Fermi-Punkten zu tun. Dieser Fall tritt bei  $t_{\parallel} \gg t_{\perp}$  auf. Geht man dagegen vom realistischen Fall  $t_{\parallel} = t_{\perp}$  aus, liegen die Bandminima des zweituntersten Bandes am Rande der Brillouin-Zone und fallen mit den Bandmaxima des untersten Bandes zusammen. Auch eine beliebig groß gewählte Kondo-Wechselwirkung  $j_K$  ändert nichts an dieser Tatsache. Man hat es also immer nur mit zwei Fermi-Punkten zu tun!

Unter Verwendung des mit Experimenten konsistenten Parametersatzes ergibt sich folgendes Bandschema:

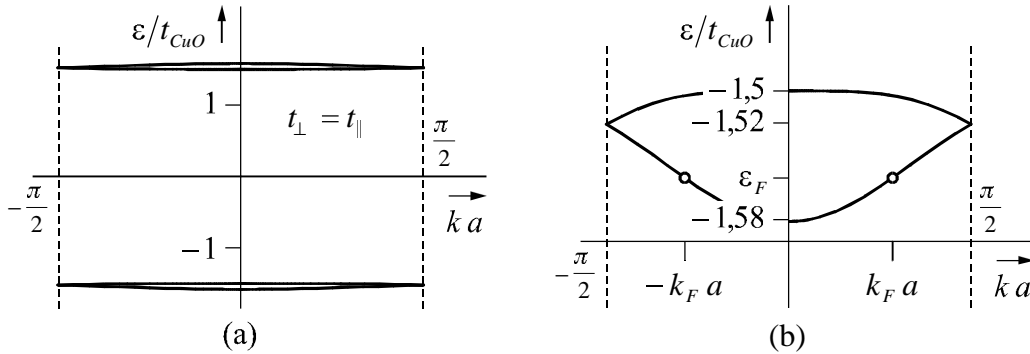


Abb. 4.3: Bandstruktur der vereinfachten Spin-Fermion-Leiter beim Parametersatz  $U = 6t_{CuO}$ ,  $\Delta = 4t_{CuO}$  und  $t_{OO} = -0,5t_{CuO}$  (a). Betrachtet man nur die beiden untersten Bänder (b), sieht man leicht ein, daß nur zwei Fermi-Punkte auftreten.

Bei geringer Dotierung genügt es also, das unterste Band zu betrachten. Der Eigenvektor zum Eigenwert  $\varepsilon_0(k'a)$  ist

$$\mathbf{e}_{k,0,\uparrow}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2} N(k)} \begin{pmatrix} 1 \\ X(k) \\ X(k) \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{e}_{k,0,\uparrow}$$

mit

$$X(k) = -\frac{j_K + \sqrt{j_K^2 + 4t_{\parallel}^2 (\cos(ka) + t_{\perp}/t_{\parallel})^2}}{2t_{\parallel} (\cos(ka) + t_{\perp}/t_{\parallel})} .$$

$$N(k) = \sqrt{1 + X^2(k)}$$

Beim Fall  $\sigma = \downarrow$  erhält man

$$\mathbf{e}_{k,0,\downarrow}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2} N(k)} \begin{pmatrix} X(k) \\ 1 \\ 1 \\ X(k) \end{pmatrix} = \mathbf{e}_{k,0,\downarrow} .$$

Mit diesen Eigenvektoren sind jetzt wieder alle Terme der Wirkung zu transformieren. Das dann folgende Vorgehen ist mit dem bei einer Spin-Fermion-Kette identisch. Bis auf die Fermi-Geschwindigkeit und der Konstante  $w_{\uparrow\downarrow}$  ergeben sich auch genau die gleichen Ausdrücke. Die Fermi-Geschwindigkeit ist

$$v_F = \frac{4t_{\parallel}^2 a (\cos(k_F a) + t_{\perp}/t_{\parallel}) \sin(k_F a)}{\sqrt{j_K^2 + 4t_{\parallel}^2 (\cos(k_F a) + t_{\perp}/t_{\parallel})^2}}$$

und die Konstante der Spin-Umklapp-Prozesse

$$w_{\uparrow\downarrow} = -\frac{2t_{\parallel} (\cos(k_F a) + t_{\perp}/t_{\parallel})}{\sqrt{j_K^2 + 4t_{\parallel}^2 (\cos(k_F a) + t_{\perp}/t_{\parallel})^2}} .$$

Nach der Rücktransformation in den Ortsraum folgt

$$(H_{\tau})_{\sigma\sigma'}^{R,L} = \frac{1}{2a} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) \left\{ \delta_{\sigma\sigma'} \partial_{\tau} + w_{\sigma\sigma'} (U^{\dagger} \partial_{\tau} U)_{\sigma\sigma'}(x) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(x)$$

$$\left(H_{F\parallel,0} + H_{F\perp} + H_K\right)_{\sigma\sigma'}^{R,L} = \frac{1}{2a} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) \delta_{\sigma\sigma'} \left\{ \pm i v_F \partial_x \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(x) + const.$$

$$\left(H_{F\parallel,WW}\right)_{\sigma\sigma'}^{R,L} = \frac{1}{2a} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) \left\{ \pm i v_F w_{\sigma\sigma'} \left( U^{\dagger} \partial_x U \right)_{\sigma\sigma'}(x) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(x)$$

$$\left(H_B\right)_{\sigma\sigma'}^{R,L} = j_B \frac{1}{2a} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) \left\{ w_{\sigma\sigma'} \left( i U^{\dagger} \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_{\tau} \mathbf{n}) U \right)_{\sigma\sigma'}(x) \right\} f_{\sigma'}^{R,L}(x).$$

An dieser Stelle angelangt, kann man zum einen die Feldtheorie in der  $CP^1$ -Darstellung und dann auch im System mit globaler Spin-Quantisierungsachse anschreiben.

## 5 Abgeleitete Feldtheorien

### 5.1 Zusammenstellung beider Theorien

Die in dieser Arbeit abgeleiteten Feldtheorien für Spin-Fermion-Ketten und Spin-Fermion-Leitern lassen sich jeweils auf zwei verschiedene Arten darstellen. In einem System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse, wobei ein Eichfeld auftritt und in einem mehr anschaulichen System mit globaler Spin-Quantisierungsachse.

Im System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse lautet die Wirkung der Feldtheorien

$$S = \frac{1}{2a} \int_0^\beta d\tau \int dx \mathcal{L}$$

mit der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_F^R + \mathcal{L}_F^L + \mathcal{L}_{NI\sigma M} + \mathcal{L}_{top} \quad (5.1)$$

wobei

$$\mathcal{L}_F^{R,L} = f^{+R,L} \left\{ D_\tau \mp i v_F D_x + w_{\uparrow\downarrow} (K_\tau \mp i v_F K_x) + 2 j_B w_{\uparrow\downarrow} K_\tau \right\} f^{R,L}$$

$$\mathcal{L}_{NI\sigma M} = 4a \rho_S \left[ \left| (\partial_x - i A_x) Z \right|^2 + \frac{1}{v_S^2} \left| (\partial_\tau - i A_\tau) Z \right|^2 \right]$$

$$\mathcal{L}_{top} = \begin{cases} 2a i s [\partial_x A_\tau - \partial_\tau A_x] & \text{bei einer Kette} \\ 0 & \text{bei einer Leiter} \end{cases}$$

die einzelnen Anteile der Lagrange-Dichte sind. Die kovariante Ableitung im fermionischen Anteil ist durch

$$D_{x,\tau} = \partial_{x,\tau} + i A_{x,\tau} \sigma^z$$

gegeben.

Im System mit globaler Spin-Quantisierungsachse erhält man dagegen die Wirkung

$$S = -\frac{i}{2a} \int_0^{iv_F \beta} dx^0 \int dx^1 \mathcal{L},$$

mit der Lagrange-Dichte  $\mathcal{L}$ , die sich aus

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_F + \mathcal{L}_{WW} + \mathcal{L}_{Nl\sigma M} + \mathcal{L}_{top} \quad (5.2)$$

zusammensetzt. Im einzelnen:

$$\mathcal{L}_F = \bar{\psi} i \gamma^\mu \partial_\mu \psi$$

$$\mathcal{L}_{WW} = -\frac{1+w_{\uparrow\downarrow}}{2\rho_S} \left( \mathbf{j}_F^1 \mathbf{j}_{S,1} - \frac{iv_S}{v_F} \mathbf{j}_F^0 \mathbf{j}_{S,0} \right) + \frac{J_B w_{\uparrow\downarrow}}{\rho_S} \frac{iv_S}{v_F} \mathbf{j}_F^0 \mathbf{j}_{S,0}$$

$$\mathcal{L}_{Nl\sigma M} = \frac{\rho_S}{2} \frac{a}{v_F} \left[ (\partial_1 \mathbf{n})^2 - \frac{v_F^2}{v_S^2} (\partial_0 \mathbf{n})^2 \right]$$

$$\mathcal{L}_{top} = \begin{cases} sa \mathbf{n} (\partial_0 \mathbf{n} \times \partial_1 \mathbf{n}) & \text{bei einer Kette} \\ 0 & \text{bei einer Leiter.} \end{cases}$$

In den Theorien kommen zwei charakteristische Geschwindigkeiten, nämlich die Spinwellen-Geschwindigkeit und die Fermi-Geschwindigkeit vor. Die Spinwellen-Geschwindigkeit ist gegeben durch

$$v_S = \begin{cases} 2\sqrt{2} J_H a s \sqrt{z_{\text{Kette}}} & \text{bei einer Kette} \\ 2\sqrt{2} J_{\parallel} a s \sqrt{z_{\text{Kette}} + \frac{J_{\perp}}{J_{\parallel}}} & \text{bei einer Leiter.} \end{cases}$$

Im allgemeinen sollte man davon ausgehen können, daß die Spin-Spin-Kopplung quer und längs einer Leiter gleich groß ist und mit der bei einer Kette übereinstimmt  $J_{\parallel} = J_{\perp} = J_H$ .

Die zweite charakteristische Geschwindigkeit ist die Fermi-Geschwindigkeit.



$$v_F = \begin{cases} \frac{2t^2 a \sin(2k_F a)}{\sqrt{j_K^2 + 4t^2 \cos^2(k_F a)}} & \text{bei einer Kette} \\ \frac{4t_{\parallel}^2 a (\cos(k_F a) + t_{\perp}/t_{\parallel}) \sin(k_F a)}{\sqrt{j_K^2 + 4t_{\parallel}^2 (\cos(k_F a) + t_{\perp}/t_{\parallel})^2}} & \text{bei einer Leiter} \end{cases}$$

Beim Übergang auf Kombinationszustände hat sich der Zusammenhang

$$t_{\parallel} = t_{\perp} = t = -\frac{t_{00}}{4}$$

der Hüpfmatrixelemente zum Sauerstoff-Sauerstoff-Hüpfmatrixelement des Spin-Fermion-Modells ergeben. In der Fermi-Geschwindigkeit ist die Konstante  $j_K$  durch

$$j_K = -4sJ_K$$

mit der Stärke der Kondo-Wechselwirkung im Spin-Fermion-Modell verknüpft.

Ansonsten enthalten die Theorien noch weitere drei Konstanten. Die Spin-Steifigkeit beim nichtlinearen  $\sigma$ -Modell lautet

$$\rho_s = \begin{cases} 2J_H a s^2 & \text{bei einer Kette} \\ 2J_{\parallel} a s^2 & \text{bei einer Leiter} \end{cases} \quad \text{i. a. } J_{\parallel} = J_H$$

und die Konstante  $w_{\uparrow\downarrow}$ :

$$w_{\uparrow\downarrow} = \begin{cases} -\frac{2t \cos(k_F a)}{\sqrt{j_K^2 + 4t^2 \cos^2(k_F a)}} & \text{bei einer Kette} \\ -\frac{2t_{\parallel} (\cos(k_F a) + t_{\perp}/t_{\parallel})}{\sqrt{j_K^2 + 4t_{\parallel}^2 (\cos(k_F a) + t_{\perp}/t_{\parallel})^2}} & \text{bei einer Leiter} \end{cases} \quad \text{i. a. } t_{\parallel} = t_{\perp} = t$$

Zum Schluß fehlt noch  $j_B$ . Hierbei handelt es sich um die Abkürzung

$$j_B = \begin{cases} -\frac{J_K}{J_H z_{\text{Kette}}} & \text{bei einer Kette} \\ -\frac{J_K}{J_{\parallel} (z_{\text{Kette}} + J_{\perp}/J_{\parallel})} & \text{bei einer Leiter.} \end{cases}$$

## 5.2 Betrachtung von Grenzfällen

Das Spin-Fermion-Modell beschreibt ein fermionisches System, das über die Kondo-Wechselwirkung mit dem Spin-System wechselwirkt. Setzt man die Kopplungskonstante  $J_K$  gleich Null, hat man es mit zwei freien Systemen zu tun. In den hier abgeleiteten Feldtheorien sollte dann natürlich die Strom-Strom-Wechselwirkung ebenfalls verschwinden. Man überzeugt sich leicht, daß dies auch der Fall ist.

Aufgrund der zwei charakteristischen Geschwindigkeiten, Spinwellen-Geschwindigkeit und Fermi-Geschwindigkeit, ist es nicht möglich, die Theorie beim fermionischen und beim Spin-System gleichzeitig kovariant zu formulieren. Bis auf die Berry-Phase gelingt das im Spezialfall

$$\frac{iv_S}{v_F} = -1.$$

Selbst dann bricht die Berry-Phase die Raum-Zeit-Invarianz.

Die Spin-Fermion-Leiter besteht aus zwei gekoppelten Spin-Fermion-Ketten. Die Kopplung der Spin-Ketten beschreibt das Verhältnis  $J_{\perp}/J_{\parallel}$  und die Kopplung der Tight-Binding-Ketten das Verhältnis  $t_{\perp}/t_{\parallel}$ . Führt man den Grenzprozeß

$$\frac{J_{\perp}}{J_{\parallel}} \rightarrow 0 \quad \frac{t_{\perp}}{t_{\parallel}} \rightarrow 0$$

aus, folgt bis auf den topologischen Term das Resultat einer einzelnen Kette.

## 5.3 Physikalisches Szenario

In diesem Kapitel werden die Feldtheorien, die durch (5.1) und (5.2) gegeben sind, diskutiert. Ähnliche Diskussionen für Theorien in 2+1 Dimensionen findet man bei [48] und [51]. Die hier abgeleiteten Theorien für 1+1 Dimensionen besitzen aber aufgrund des topologischen Terms zusätzliche Eigenschaften.

Betrachtet seien zunächst die Feldtheorien im System mit globaler Spin-Quantisierungsachse (5.2):  $\mathcal{L}_0$  beschreibt die kinetische Energie der Löcher, die durch Dotierung der Ketten und Leitern entstehen. Diese Löcher bewegen sich mit der Fermi-Geschwindigkeit und sind masselos. Bei  $\mathcal{L}_{NI\sigma M}$  handelt es sich um das nichtlineare  $\sigma$ -Modell, es beschreibt die Spin-Fluktuationen der lokalisierten Spins. Je nachdem, ob man es mit einer Kette oder einer Leiter zu tun hat, tritt ein topologischer Term  $\mathcal{L}_{top}$  auf. Er hat die besondere Eigenschaft, nur ganzzahlige Vielfache von  $2\pi i s$  annehmen zu können. Allgemein tritt dieser Term immer bei ungerader Anzahl gekoppelter Ketten auf. Bei gerader Anzahl verschwindet er dagegen. Welchen Einfluß er auf die Lösungen der Theorie hat,

wird bei der Diskussion der Feldtheorien im System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse besprochen. Von besonderem Interesse ist auch  $\mathcal{L}_{ww}$ . Hierbei handelt es sich um eine Kopplung zwischen der lokalen Spin-Dichte der Löcher und der Magnetisierung der lokalisierten Spins. Solch eine Wechselwirkung haben auch schon B. I. Shraiman und E. D. Siggia [49] gefunden. Diese Wechselwirkung führt in zwei Dimensionen auf einen spiralen Zustand der lokalisierten Spins [50]. Welchen Einfluß die Eindimensionalität der hier betrachteten Systeme und der topologische Term auf die Ergebnisse dieser Autoren haben, muß allerdings noch überlegt werden.

Betrachtet man die Feldtheorie im System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse (5.1), stellt man zunächst fest, daß sie invariant unter der Transformation

$$\begin{aligned} Z &\rightarrow e^{i\lambda} Z & A_{x,\tau} &\rightarrow A_{x,\tau} + \partial_{x,\tau} \lambda \\ f_{\sigma=\uparrow} &\rightarrow e^{-i\lambda} f_{\sigma=\uparrow} & K_{x,\tau} = i B_{x,\tau} \sigma^- + i \bar{B}_{x,\tau} \sigma^+ &\rightarrow i e^{2i\lambda} B_{x,\tau} \sigma^- + i e^{-2i\lambda} \bar{B}_{x,\tau} \sigma^+ \\ f_{\sigma=\downarrow} &\rightarrow e^{i\lambda} f_{\sigma=\downarrow} \end{aligned}$$

ist. Es liegt also eine lokale U(1) Eichinvarianz vor und bei Vernachlässigung der Terme mit  $K_{x,\tau}$  reduziert sich die Lagrange-Dichte zu einer Eichtheorie für die Fermionen, die minimal an das Eichfeld  $A_{x,\tau}$  koppeln. Wegen der Kondo-Wechselwirkung zwischen den Sauerstoff-Löchern und den Kupfer-Spins führt der antiferromagnetische Hintergrund zu einer zusätzlichen "Ladung" der Löcher, je nach Spin der Löcher. Die antiferromagnetische Ordnung des Spin-Gitters definiert zwei verschiedene Untergitter. In bezug auf das jeweilige Untergitter sind zwei Spin-Einstellungen der Löcher möglich, in diesem Sinn hat man es mit zwei Sorten Fermionen und somit zwei Einstellmöglichkeiten der zusätzlichen Ladung zu tun. Weil das Eichfeld aus zwei Z-Bosonen zusammengesetzt ist, wird, der Konvention von X. G. Wen [48] folgend, die Ladung mit Z-Ladung bezeichnet. Aus den kovarianten Ableitungen der Fermionen und Bosonen liest man die Z-Ladung der Teilchen ab:

Teilchen	Z-Ladung
$\bar{Z}$	-1
$Z$	1
$f_{\sigma=\uparrow}$	-1
$f_{\sigma=\downarrow}$	1

Tab. 5.1: Z-Ladung der in den Theorien vorkommenden Bosonen und Fermionen.

Fluktuationen des Eichfeldes  $A_{x,\tau}$  werden durch das nichtlineare  $\sigma$ -Modell bestimmt. Der in der Lagrange-Dichte (5.1) zunächst fehlende kinetische Term für das Eichfeld

kann durch eine  $1/N$  Entwicklung [51] erhalten werden. Dabei kommt der topologische Term zum Tragen:

Nach G. Sierra [44] führt ein nichtlineares  $\sigma$ -Modell ohne topologischen Term auf ein durch das Eichfeld  $A_{x,\tau}$  vermitteltes Confinement, d.h. es liegt ein lineares Potential für entgegengesetzte Ladungen vor. Dann können nur Zustände mit verschwindender  $Z$ -Ladung beobachtet werden. Diese sind durch die gebundenen Zustände  $z-z$ ,  $f-z$  und  $f-f$  gegeben. Beim Zustand  $z-z$  handelt es sich um Spin-Wellen mit einer Energielücke im Anregungsspektrum.  $f-z$  gehorcht der Fermi-Statistik und hat Ladung  $e$ , es ist ein spinloses Fermion.  $f-f$  ist schließlich ein gebundener Zustand aus zwei Fermionen ohne Spin aber mit Ladung  $2e$ . Er kann mit einem Cooper-Paar identifiziert werden.

Mit topologischem Term erhält man eine massive Eichtheorie ohne Confinement [44] und damit auch ohne die gerade diskutierten gebundenen Zustände. Bei Abwesenheit des Zustands  $z-z$  verschwindet die Energielücke im Anregungsspektrum des Spin-Systems. Wenn keine Bindungen der Art  $f-z$  und  $f-f$  vorliegen, ist zu vermuten, daß die Fermionen eine Luttinger-Flüssigkeit bilden.

Ob sich das hier vorgestellte Szenario für 1+1 Dimensionen bei Berücksichtigung der nichtdiagonalen Anteile des Eichfeldes  $K_{x,\tau}$  ändert, muß noch untersucht werden. Laut [51] ist das in 2+1 Dimensionen nicht der Fall.

## Zusammenfassung

Ziel der Arbeit war es aus mikroskopischen Modellen von Spin-Fermion-Ketten und Spin-Fermion-Leitern effektive Feldtheorien abzuleiten, um damit Effekte wie das Spin-Gap, Spin-Ladungs-Trennung und Supraleitung untersuchen zu können. Das gesamte Vorgehen sollte dabei transparent geschehen.

Zuerst war die Methode des Kontinuumsübergangs bei einer Spin-Fermion-Kette zu entwickeln. Dabei zerfiel das Problem im wesentlichen in zwei Teilaufgaben, den Kontinuumsübergang für das Spin-System und den Kontinuumsübergang für das fermionische System.

Für den Kontinuumsübergang beim Spin-System wurde zunächst die Heisenberg-Wechselwirkung durch eine Hubbard-Stratonovich Transformation entkoppelt. An das dadurch eingeführte Hubbard-Stratonovich-Feld koppelten jetzt die einzelnen Spins, die andererseits über die Kondo-Wechselwirkung mit den Fermionen wechselwirkten. Beide Kopplungen zusammen waren formal eine Wechselwirkung eines Spins mit einem Magnetfeld. Mit der Methode der verallgemeinerten Berry-Phasen war es möglich, die Spin-Freiheitsgrade in diesem Magnetfeld auszuintegrieren und somit eine direkte Kopplung des Hubbard-Stratonovich Feldes an die Fermionen zu erhalten. Unter Berücksichtigung der antiferromagnetischen Ordnung konnte das Hubbard-Stratonovich Feld unter der Annahme, daß nur niederenergetische Anregungen vorkommen, entwickelt werden, womit sich u.a. für das Spin-System das nichtlineare  $\sigma$ -Modell und ein topologischer Term ergab.

Um den Kontinuumsübergang für das fermionische System ausführen zu können, war es zunächst notwendig, die in der Beschreibung noch enthaltene nichtlokale Wechselwirkung zwischen den hüpfenden Fermionen und dem nichtlinearen  $\sigma$ -Modell in eine lokale Wechselwirkung umzuformen. Dazu wurden die vier fermionischen Zustände innerhalb einer Plakette linear kombiniert. Es ergab sich eine symmetrische und drei nichtsymmetrische Kombinationen. Der Spin eines Fermions im symmetrischen Zustand kann antiparallel oder parallel zum lokalisierten Spin auf dem Kupferplatz ausgerichtet sein. Durch numerisches Bestimmen der Bandstruktur des statischen Problems waren auch numerisch die Eigenvektoren des tiefsten Bandes zugänglich. Bei der Bestimmung des Gewichts der Kombinationszustände im tiefsten Bandzustand, stellte sich heraus, daß der antiparallele Zustand mit der größten Wahrscheinlichkeit im tiefsten Bandzustand vorkommt. So war es gerechtfertigt, das gesamte Problem auf Kombinationszustände umzuschreiben und alle nichtsymmetrischen Zustände zu vernachlässigen. Dabei wurde allerdings zunächst auch der parallele Zustand mitgenommen, er entfiel dann im nächsten Schritt.

Im nächsten Schritt war das statische Problem zu diagonalisieren, um mit den dadurch definierten Eigenvektoren das gesamte System zu transformieren. Weil die Wechselwirkung der Fermionen mit dem Spin-System raumdrehinvariant ist, war es für die Diagona-

lisierung des statischen Anteils zunächst notwendig auf eine lokale Spin-Quantisierungsachse überzugehen. In diesem konnte dann die Bandstruktur des statischen Anteils bestimmt und mit den Eigenvektoren des untersten Bandes das gesamte System transformiert werden. Nach linearer Entwicklung um die beiden Fermi-Punkte und Berücksichtigung, daß bei kleinen Impulsüberträgen keine Rückwärts-Streuung stattfindet, gelangte man zu einer kontinuierlichen Beschreibung im Impulsraum. Die Rücktransformation in den Ortsraum bei gleichzeitiger kanonischer Transformation lieferte schließlich die gesuchte kontinuierliche Beschreibung, d.h. die gesuchte Feldtheorie im System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse.

Der Übergang auf ein System mit lokaler Spin-Quantisierungsachse definiert eine spezielle Darstellung des nichtlinearen  $\sigma$ -Modells, die  $CP^1$ -Darstellung. In dieser tritt ein Eichfeld auf, das an das Spin-System beschreibende Z-Bosonen koppelt. Der diagonale Anteil und die nichtdiagonalen Anteile dieses Eichfeldes koppeln ihrerseits wieder an die Fermionen. Von dieser Darstellung gelangte man auch wieder zu der mit globaler Spin-Quantisierungsachse.

Im System mit globaler Spin-Quantisierungsachse wurden die Wirkung der Fermionen in der Form eines Weyl-Feldes geschrieben. Weiterhin zeigte sich, daß die Wechselwirkung zwischen fermionischem und Spin-System durch eine Wechselwirkung zwischen den jeweiligen Spin-Strömen gegeben ist.

Nachdem die Methode für den Kontinuumsübergang bei einer Spin-Fermion-Kette vollständig entwickelt war, konnte die Erweiterung der Methode für eine Spin-Fermion-Leiter vorgenommen werden. Die Hubbard-Stratonovich Transformation ließ sich unter Verwendung von periodischen Randbedingungen sowohl in Richtung der Leiter als auch quer dazu durchführen. Durch das Zusammenfassen der Ordnungsparameter einer Sprosse, war der Kontinuumsübergang für das Spin-System auf den einer einzelnen Kette zurückführbar. Im Gegensatz zur Kette entfiel aber der topologische Term.

Nach dem Umschreiben des Systems auf Kombinationszustände und Vernachlässigung aller nichtsymmetrischen Zuständen gelangte man wieder zu lokalen Wechselwirkungen zwischen fermionischem System und Spin-System. Die Bandstruktur bestand aus vier statt aus zwei Bändern. Unter der physikalisch wohl begründete Annahme, daß die Hüpfmatrixelemente längs und quer zur Leiterrichtung in der gleichen Größenordnung liegen, ergaben sich nur zwei Fermi-Punkte. Um diese konnte auch wieder linear entwickelt werden, was im Endeffekt zu einer im Vergleich zur Kette modifizierten Form der Kopplungskonstanten führte.

Um einen Vergleich zu ermöglichen, wurden die abgeleiteten Theorien zusammengestellt. Betrachtungen von Grenzfällen zeigten, wie beide Feldtheorien untereinander und auch mit den zugrunde liegenden mikroskopischen Theorien zusammenhängen. Hiernach folgte eine Diskussion, des durch die Theorien beschriebenen physikalischen Szenarios. Dabei zeigte sich, daß der Unterschied der magnetischen Eigenschaften von Spin-Ketten und Spin-Leitern oder allgemein von Leitern mit ungerader Anzahl von Ketten und gera-

der Anzahl, durch den einmal vorhandenen und das andere mal verschwindenden topologischen Term erklärbar ist. Entsprechend sind auch Unterschiede bei den Transporteigenschaften dotierter Systeme zu erwarten.

# Anhang

## A Ansichten von Kristallen

Im Kapitel 1.5 sind einige Materialien genannt, die aus Spin-Ketten und Spin-Leitern bestehen. Hier sind perspektivische Ansichten der Kristalle zusammengestellt:

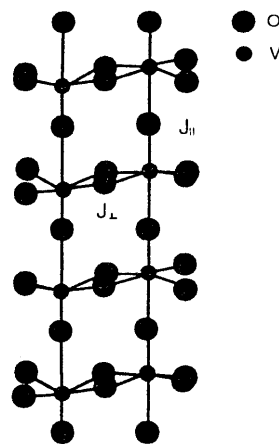


Abb. A.1: Leiter aus magnetischen  $V^{+4}$ -Ionen mit Spin  $s = \frac{1}{2}$  in  $(VO)_2P_2O_7$  zusammen mit den zugehörigen Sauerstoffionen.

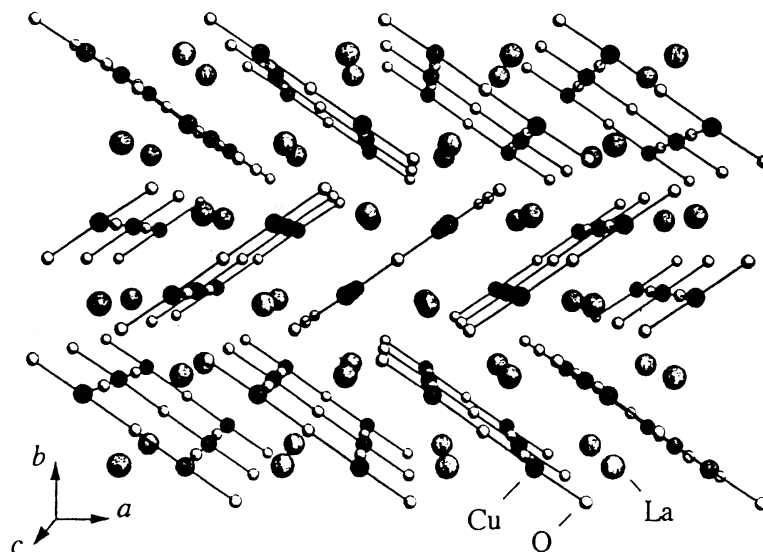


Abb. A.2: Ansicht eines unter hohem Druck synthetisierten  $LaCuO_{2,5}$ -Kristalls, der aus Kupferoxid-Leitern besteht. Die Kupfer-Spins sind hier nicht frustriert.



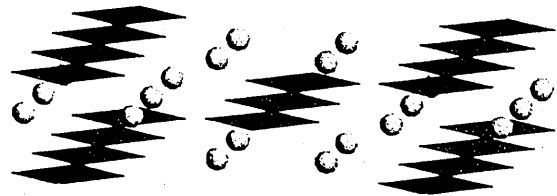
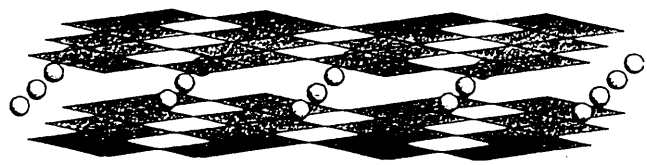
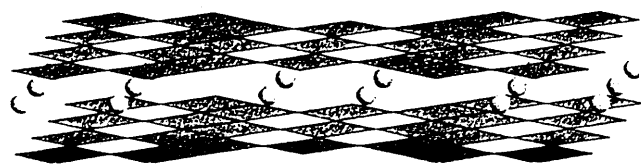
(a)  $\text{Ca}_2\text{CuO}_3$  ( linear chain )(b)  $\text{SrCuO}_2$  ( zigzag chain )(c)  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$  ( two-leg ladder )(d)  $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$  ( three-leg ladder )

Abb. A.3: Kristallstrukturen von  $\text{Ca}_2\text{CuO}_3$  (a) und  $\text{SrCuO}_2$  (b) unter Normaldruck und Hochdruckphasen von  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$  (c) und  $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$  (d). Die Quadrate repräsentieren Plaketten aus einem Kupferion und die vier umgebenden Sauerstoffionen.

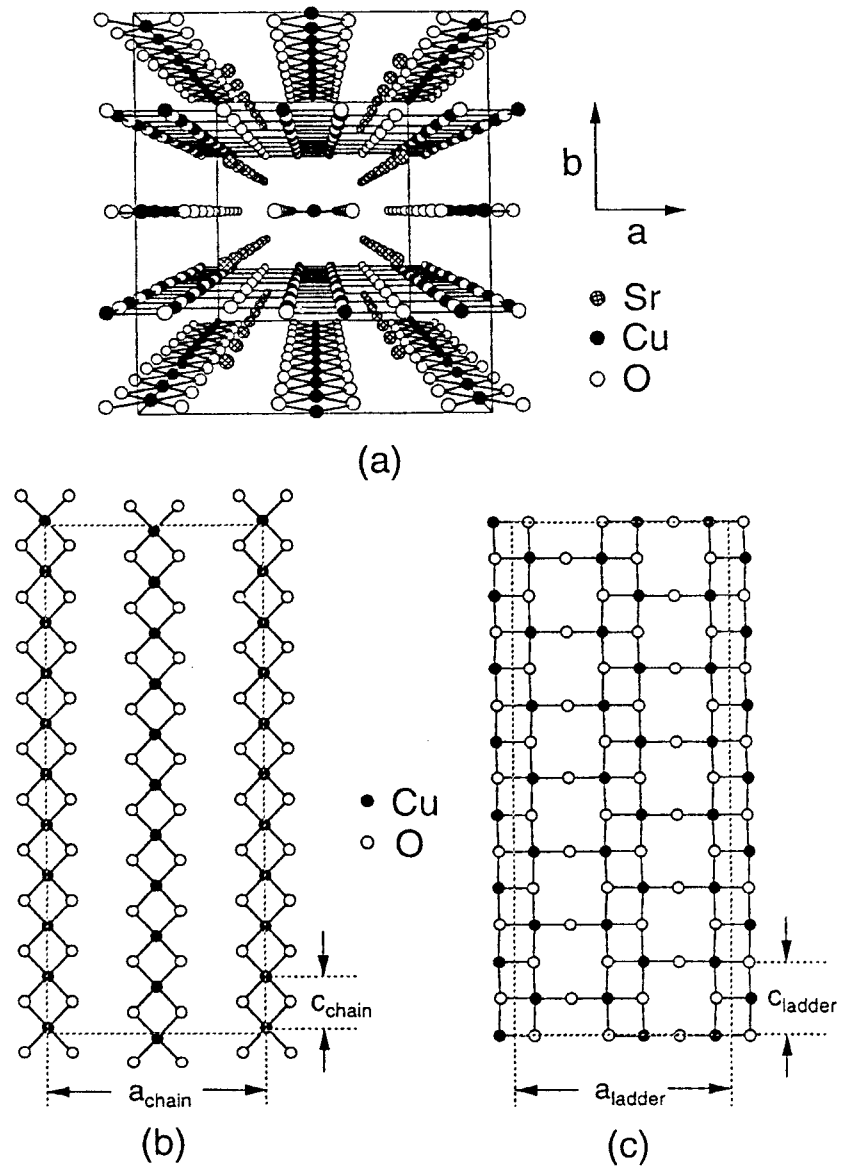


Abb. A.4: Perspektivische Sicht auf die Kristallstruktur von  $(\text{Sr,Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  (a). Diese Materialien bestehen aus Spin-Ketten (b) und aus Spin-Leitern (c), die sich schichtweise abwechseln.

## B Zur Notation

In diesem Abschnitt sollen einige in der Arbeit verwendete Notationen erläutert werden. Eine eckige Klammer bei Summen der Form

$$\sum_{\langle j,j' \rangle} \dots$$

bedeutet, daß nur über alle direkt benachbarten  $j$  und  $j'$  summiert wird. Beim Ausdruck

$$\sum_{(j;i)} \dots$$

summiert man über alle nächsten Nachbarn  $j$  von  $i$ . Entsprechend gilt

$$\begin{aligned} \sum_{\langle j,i \rangle} \dots &= \sum_i \sum_{(j;i)} \dots \\ \sum_{\langle j,j';i \rangle} \dots &= \sum_i \sum_{(j;i)} \sum_{(j';i)} \dots \end{aligned}$$

Zwei Operatoren mit entgegengesetztem Spin in einem Vektor zusammengefaßt, ergeben einen Spinor:

$$c^\dagger \equiv \begin{pmatrix} c_{\sigma=\uparrow}^\dagger \\ c_{\sigma=\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad c \equiv \begin{pmatrix} c_{\sigma=\uparrow} \\ c_{\sigma=\downarrow} \end{pmatrix}$$

Zur übersichtlicheren Darstellung werden die ersten beiden Indizes in manchen Kapiteln in Klammern hinter den Operator oder Vektor geschrieben. Es gilt z.B.

$$c_{i_m, \kappa, \sigma}^\dagger = c_\sigma^\dagger \begin{pmatrix} i_m \\ \kappa \end{pmatrix} \quad c_{k, \lambda, \sigma}^\dagger = c_\sigma^\dagger \begin{pmatrix} k \\ \lambda \end{pmatrix} \quad e_{k, \kappa, \lambda, \sigma}^\dagger = e_{\lambda, \sigma}^\dagger \begin{pmatrix} k \\ \kappa \end{pmatrix}$$

entsprechend für das hermitesch bzw. komplex Konjugierte.

Ein Pfeil auf dem Ableitungszeichen bedeutet, daß zuerst nach dem rechts stehenden Ausdruck und dann mit umgekehrtem Vorzeichen nach dem links stehenden Ausdruck abgeleitet wird.

$$\bar{Z} \overset{\leftarrow}{\partial}_\delta Z \equiv \bar{Z} \partial_\delta Z - Z \partial_\delta \bar{Z}$$

Die Heaviside-Funktion  $\theta(x)$  ist definiert durch

$$\theta(x) \equiv \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x < 0. \end{cases}$$

Das Skalarprodukt zweier Vektoren ist

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_i,$$

bei  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  handelt es sich dagegen um ein dyadisches Produkt. Weiterhin bezeichnet  $\mathbf{a}(\mathbf{b} \times \mathbf{c})$  ein Spatprodukt [52].

## C Mikroskopische Modelle

In der vorliegenden Arbeit werden einige mikroskopische Modelle erwähnt und nicht weiter erklärt. Das soll an dieser Stelle mit der jeweils einfachsten Variante nachgeholt werden:

### Tight-Binding-Modell

Das Tight-Binding-Modell beschreibt Fermionen, die nur Nächste-Nachbar-Hüpfprozesse ausführen:

$$H_{TB} = -t \sum_{\langle i, i' \rangle} c_i^\dagger c_{i'}$$

Aus der Transformation in den Impulsraum folgt als Bandstruktur eine Kosinusfunktion

$$H_{TB} = \sum_k \varepsilon(k) c_k^\dagger c_k \quad \varepsilon(k) = -2t \cos(ka)$$

und bei Halbfüllung  $k_F a = \pi/2$  die Fermi-Geschwindigkeit

$$v_F = \left. \frac{\partial \varepsilon(k)}{\partial k} \right|_{k=\pm k_F} = \pm 2ta.$$

Hierbei ist  $a$  die Gitterkonstante.

### Hubbard-Modell

Berücksichtigt man den Spin der Fermionen, können sich im Tight-Binding-Modell auch zwei Fermionen mit entgegengesetztem Spin auf einem Platz aufhalten. Beim Hubbard-Modell ist das nur unter Aufwendung der Energie  $U$  möglich:

$$H_{Hubbard} = -t \sum_{\substack{\langle i,i' \rangle \\ \sigma}} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i',\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$$

Die Fermionen unterliegen in diesem Modell einer intraatomaren Coulomb-Wechselwirkung. Im Impulsraum lautet der Hamilton-Operator

$$H_{Hubbard} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon(k) c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \frac{U}{W} \sum_{k,k'} c_{k+q,\uparrow}^\dagger c_{k'-q,\downarrow}^\dagger c_{k',\downarrow} c_{k,\uparrow},$$

wobei  $W \propto t$  die Bandbreite ist. Wenn ein Fermion pro Gitteratom vorliegt, kann im fast lokalisierten Grenzfall  $U/W \gg 1$  das Hubbard-Modell auf ein effektives Heisenberg-Modell abgebildet werden.

## Heisenberg-Modell

Ist an jedem Gitterplatz ein Spin  $\mathbf{S}_i$  lokalisiert, der mit seinen direkt benachbarten Spins wechselwirkt, hat man es mit einem Heisenberg-Modell zu tun:

$$H_{Heisenberg} = J_H \sum_{\langle i,i' \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i'}$$

I.a. ist der Zusammenhang zum Hubbard-Modell durch

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} c_{i,\sigma}^\dagger \underline{\sigma}_{\sigma,\sigma'} c_{i,\sigma'}$$

gegeben. Für  $J_H > 0$  folgt ein antiferromagnetischer Grundzustand und für  $J_H < 0$  ein ferromagnetischer.

## t-J-Modell

Ist beim Hubbard-Modell nicht exakt ein Fermion pro Gitterplatz vorhanden, ergibt sich im fast lokalisierten Grenzfall  $U/W \gg 1$  das t-J-Modell

$$H_{tJ} = t_{tJ} \sum_{\substack{\langle i,i' \rangle \\ \sigma}} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i,\sigma}^\dagger c_{i',\sigma} (1 - n_{i',-\sigma}) + J_H \sum_{\langle i,i' \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i'}$$

Zusätzlich zu den wechselwirkenden lokalisierten Spins hat man es mit Fermionen, die Nächste-Nachbar-Hüpfprozesse ausführen, zu tun. Wegen den Faktoren  $(1 - n_{i,-\sigma})$  sind keine zwei Fermionen auf dem selben Platz anzutreffen. Die Spins der hüpfenden Fer-

mionen bilden mit den lokalisierten Spins Singulets, am Platz der Fermionen verschwindet der Spin. Deshalb spricht man auch von Löchern im Spin-Gitter.

## D Feldtheoretische Modelle

Die in der Arbeit vorkommende feldtheoretische Modelle sind zum einen das nichtlineare  $\sigma$ -Modell und das Luttinger-Modell. Diese Modelle sollen hier kurz vorgestellt werden. Die Stellen in der Literatur, wo ihre Eigenschaften ausführlicher diskutiert werden, sind angegeben.

### Nichtlineares $\sigma$ -Modell

Die Lagrange-Dichte des nichtlinearen  $\sigma$ -Modells ist

$$\mathcal{L}_{Nl\sigma M} = \frac{\rho_S}{2} \left[ (\partial_x \mathbf{n})^2 + \frac{1}{v_S^2} (\partial_\tau \mathbf{n})^2 \right]$$

mit der Nebenbedingung  $|\mathbf{n}|^2 = 1$ . Ohne diese Nebenbedingung hätte man es mit der Lagrange-Dichte eines normalen Wellenfeldes zu tun. Hier ist nun die lokale Feldamplitude konstant, wie das bei Rotatoren der Fall ist.

Weil das nichtlineare  $\sigma$ -Modell in zwei Dimensionen im Rahmen von  $1/N$ -Entwicklungen Confinement beschreiben kann, wurde es, zunächst mit der Absicht mehr über die QCD in vier Dimensionen zu lernen, untersucht, siehe hierzu z.B. [53,54,55].

Seit sich herausgestellt hat, daß es auch zweidimensionale Spin-Systeme gut beschreibt [4], ist es auch in der Festkörperphysik interessant geworden.

### Luttinger-Modell

Die Fermi-Flüssigkeits-Theorie kann ein eindimensionales Metall nicht beschreiben. Das liegt an der Peierls-Instabilität und der Spin-Ladungs-Trennung, die eine Bildung von Quasiteilchen verhindern.

Eindimensionale Metalle können durch das exakt lösbare Luttinger-Modell [56] beschrieben werden. Unter Vernachlässigung von Rückwärts-Streuung hat man es mit voneinander unabhängigen, nach rechts und links laufenden Fermionen zu tun, die zusätzlich einer Dichte-Dichte-Wechselwirkung unterliegen.

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{Luttinger} &= \mathcal{L}^R + \mathcal{L}^L + \mathcal{L}_{WW}^R + \mathcal{L}_{WW}^L \\ \mathcal{L}^{R,L} &= c^{\dagger R,L} \left( \partial_\tau \mp i v_F \partial_x \right) c^{R,L} \\ \mathcal{L}_{WW}^{R,L} &= 2 g c^{\dagger R,L} c^{R,L} c^{\dagger R,L} c^{R,L}\end{aligned}$$

Mit  $\psi^\dagger = (c^{\dagger R}, c^{\dagger L})^T$  kann man die Lagrange-Dichte in der Form der eines masselosen Dirac-Feldes, mit Strom-Strom-Wechselwirkung schreiben.

$$\mathcal{L}_{Luttinger} = \bar{\psi} i \gamma^\mu \partial_\mu \psi + g j^\mu j_\mu$$

In dieser Form ist das Modell auch unter dem Namen masseloses Thirring-Modell [57, 58] bekannt. Durch Bosonisierung [59] ist es möglich aus diesem Modell für Fermionen das Sine-Gordon-Modell [60] für Bosonen zu erhalten.

Das Luttinger-Modell wurde nicht nur mit der hier angegebenen Dichte-Dichte-Wechselwirkung bzw. Strom-Strom-Wechselwirkung untersucht, sondern z.B. auch unter hinzunahme von Eichfeldern und anderen Erweiterungen. Eine Zusammenstellung der Ergebnisse findet man bei [61].

## E Zum magnetischen Monopol

Das Feld eines magnetischen Monopols mit Ladung  $g$  wird durch folgenden Ausdruck beschrieben:

$$B_i(\mathbf{r}) = g \frac{r_i}{|\mathbf{r}|^3} \tag{E.1}$$

Damit weiterhin  $\text{div } \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0$  gilt, kann bei (E.1) zur Kompensation des durch den Monopolterm erzeugten Fluß der Term  $-4\pi g \delta_{iz} \delta(r_x) \delta(r_y) \theta(r_z)$ , der einen entlang der z-Achse einfließenden Fluß darstellt, addiert werden [62].

Mit  $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r})$  folgt die Bestimmungsgleichung des magnetischen Monopol-Potentials

$$\left( \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j A_k(\mathbf{r}) = g \frac{r_i}{|\mathbf{r}|^3},$$

die man auch wie folgt schreiben kann:

$$\partial_j A_k(\mathbf{r}) - \partial_k A_j(\mathbf{r}) = \varepsilon_{jki} g \frac{r_i}{|\mathbf{r}|^3}.$$

## F Zum topologischen Term

Der topologische Term

$$S_{top} = i s a \int_0^\beta d\tau \frac{1}{2a} \int dx \mathbf{n} \left( \frac{d\mathbf{n}}{dx} \times \frac{d\mathbf{n}}{d\tau} \right) = 2\pi i s Q_{x\tau} \quad \text{mit } Q_{x\tau} \in \mathbb{Z}$$

kann nur ganzzahlige Vielfache von  $2\pi i s$  annehmen. Das sieht man wie folgt:

Bei Lösungen endlicher Energie für das Ordnungsparameterfeld  $\mathbf{n}(x, \tau)$ , muß die Randbedingung

$$\mathbf{n}(x, \tau) \xrightarrow[\tau \rightarrow 0, \beta]{x \rightarrow \pm\infty} const.$$

gefordert werden. D.h. das Ordnungsparameterfeld hat überall auf dem Rand der  $(x, \tau)$ -Ebene einen gemeinsamen konstanten Wert. Topologisch entspricht das einer Kugeloberfläche. Wegen  $|\mathbf{n}|^2 = 1$  beschreibt  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(x, \tau)$  eine Abbildung einer Kugeloberfläche auf eine andere  $S_{x\tau}^2 \rightarrow S_{\mathbf{n}}^2$ . Dabei kann  $S_{x\tau}^2$  verschieden oft auf  $S_{\mathbf{n}}^2$  abgebildet werden. Die Anzahl dieser Abbildungen ist aber immer diskret. Die Kugeloberfläche  $S_{\mathbf{n}}^2$  läßt sich mit den zwei Winkeln  $\vartheta$  und  $\varphi$  beschreiben. Dabei gilt

$$1 = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta = \frac{1}{Q_{x\tau}} \frac{1}{4\pi} \int_0^\beta d\tau \int_{-\infty}^\infty dx \sin \vartheta \frac{\partial(\vartheta, \varphi)}{\partial(x, \tau)} \quad (\text{F.1})$$

wobei  $Q_{x\tau}$  angibt, wie oft die Oberfläche  $S_{x\tau}^2$  auf die Oberfläche  $S_{\mathbf{n}}^2$  durch  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(x, \tau)$  abgebildet wird. Bei  $\partial(\vartheta, \varphi)/\partial(x, \tau)$  handelt es sich um die Jacobische Determinante.

Daß jetzt

$$Q_{x\tau} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\beta d\tau \int_{-\infty}^\infty dx \mathbf{n} \left( \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \tau} \right)$$

gilt, prüft man durch Einsetzen von  $\mathbf{n} = (\cos \vartheta, \sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi)$  nach [62]. Dabei folgt dann (F.1).

$$\mathbf{n} \left( \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \tau} \right) = \sin \vartheta (\partial_x \vartheta \partial_\tau \varphi - \partial_\tau \vartheta \partial_x \varphi) = \sin \vartheta \frac{\partial(\vartheta, \varphi)}{\partial(x, \tau)}$$



## G Transformation vom Orts- in den Impulsraum

Der Übergang vom Orts- in den Impulsraum kann auf zwei Ersetzungsvorschriften zurückgeführt werden, da nur die folgenden beiden allgemeinen Typen von Summen vorkommen:

$$\sum_{i_m} c_{i_m, \kappa, \sigma}^\dagger c_{i_m, \kappa', \sigma}$$

$$\sum_{i_m} c_{i_m, \kappa, \sigma}^\dagger w_{i_m, \kappa, \sigma \sigma'} c_{i_m, \kappa', \sigma'}$$

Bei  $\kappa$  handelt es sich um die Numerierung der Gitterplätze innerhalb der Einheitszelle  $i_m$ . Durch Fourier-Transformation bekommt man

$$\sum_{i_m} c_{i_m, \kappa, \sigma}^\dagger c_{i_m, \kappa', \sigma} = \sum_{k, k'} c_{k, \kappa, \sigma}^\dagger \delta_{k, k'} \exp(i k' (x_{i_m, \kappa} - x_{i_m, \kappa'})) c_{k', \kappa', \sigma}$$

$$\sum_{i_m} c_{i_m, \kappa, \sigma}^\dagger w_{i_m, \kappa, \sigma \sigma'} c_{i_m, \kappa', \sigma'} = \sum_{k, k', q} c_{k, \kappa, \sigma}^\dagger \delta_{k-q, k'} w_{q, \sigma \sigma'} \exp(i k' (x_{i_m, \kappa} - x_{i_m, \kappa'})) c_{k', \kappa', \sigma'}$$

Diese Beziehungen gelten für jede beliebige Wahl von  $i_m$  und  $\kappa'$ .

Eine räumliche Diagonalisierung bedeutet das Durchführen einer unitären Transformation, wobei im folgenden  $\lambda$  der Bandindex und  $\mathbf{e}_\lambda^\dagger$  sowie  $\mathbf{e}_\lambda$  Eigenvektoren des zu diagonalisierenden Anteils sind:

$$c_{k, \kappa, \sigma}^\dagger = \sum_{\lambda} c_{k, \lambda, \sigma}^\dagger e_{k, \kappa, \lambda, \sigma}^\dagger$$

$$c_{k', \kappa', \sigma'} = \sum_{\lambda} e_{k', \kappa', \lambda', \sigma'} c_{k', \lambda', \sigma'}$$

Führt man beide Transformationen gleichzeitig aus, ergeben sich folgende Ersetzungsvorschriften:

$$\sum_{i_m} c_{i_m, \kappa, \sigma}^\dagger c_{i_m, \kappa', \sigma} =$$

$$= \sum_{k, k'} c_{k, \lambda, \sigma}^\dagger e_{k, \kappa, \lambda, \sigma}^\dagger \delta_{k, k'} \exp(i k' (x_{i_m, \kappa} - x_{i_m, \kappa'})) e_{k', \kappa', \lambda', \sigma} c_{k', \lambda', \sigma}$$

$$\sum_{i_m} c_{i_m, \kappa, \sigma}^\dagger w_{i_m, \kappa, \sigma \sigma'} c_{i_m, \kappa', \sigma'} =$$

$$= \sum_{k, k', q} c_{k, \lambda, \sigma}^\dagger e_{k, \kappa, \lambda, \sigma}^\dagger \delta_{k-q, k'} w_{q, \sigma \sigma'} \exp(i k' (x_{i_m, \kappa} - x_{i_m, \kappa'})) e_{k', \kappa', \lambda', \sigma'} c_{k', \lambda', \sigma'}$$
(G.1)

## H Fourier-Transformation diskret und kontinuierlich

Sobald man Näherungen im Impulsraum in Form von Taylor-Entwicklungen durchführt, ist es sicherlich sinnvoll, nicht nur den Orts-, sondern auch den Impulsraum zu kontinuierisieren.

Mit dem kleinsten Wegelement im Ortsraum  $2a$  und im Impulsraum  $2\pi/L = 2\pi/2Na$  bekommt man die Ersetzungsregeln

$$\begin{aligned} \sum_{i_m} \dots &\rightarrow \frac{1}{2a} \int dx \dots \\ \sum_k \dots &\rightarrow \frac{L}{2\pi} \int dk \dots \end{aligned} \quad (\text{H.1})$$

Aus dem diskreten Zusammenhang

$$\begin{aligned} f_{k,\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i_m} f_{i_m,\sigma}^\dagger e^{-ikx_{i_m}} & f_{i_m,\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k f_{k,\sigma}^\dagger e^{ikx_{i_m}} \\ f_{k,\sigma'} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i_m} f_{i_m,\sigma'} e^{ikx_{i_m}} & f_{i_m,\sigma'} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k f_{k,\sigma'} e^{-ikx_{i_m}} \\ w_{q,\sigma\sigma'} &= \frac{1}{N} \sum_{i_m} w_{i_m,\sigma\sigma'} e^{iqx_{i_m}} & w_{i_m,\sigma\sigma'} &= \sum_q w_{q,\sigma\sigma'} e^{-iqx_{i_m}} \\ \delta_{k,k'} &= \frac{1}{N} \sum_{i_m} e^{i(k-k')x_{i_m}} & \delta_{i_m,i'_m} &= \frac{1}{N} \sum_{i_k} e^{i(x_{i_m} - x'_{i_m})k} \end{aligned} \quad (\text{H.2})$$

ergibt sich der kontinuierliche

$$\begin{aligned} f_\sigma^\dagger(k) &= \frac{1}{\sqrt{2aL}} \int dx f_\sigma^\dagger(x) e^{-ikx} & f_\sigma^\dagger(x) &= \frac{\sqrt{2aL}}{2\pi} \int dk f_\sigma^\dagger(k) e^{ikx} \\ f_{\sigma'}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2aL}} \int dx f_{\sigma'}(x) e^{ikx} & f_{\sigma'}(x) &= \frac{\sqrt{2aL}}{2\pi} \int dk f_{\sigma'}(k) e^{-ikx} \\ w_{\sigma\sigma'}(q) &= \frac{1}{L} \int dx w_{\sigma\sigma'}(x) e^{iqx} & w_{\sigma\sigma'}(x) &= \frac{L}{2\pi} \int dq w_{\sigma\sigma'}(k) e^{-iqx} \\ \delta(k-k') &= \frac{1}{2\pi} \int dx e^{i(k-k')x} & \delta(x-x') &= \frac{1}{2\pi} \int dk e^{i(x-x')k} \end{aligned} \quad (\text{H.3})$$

$N$  ist die Anzahl der Gitter-Einheitszellen mit Länge  $2a$  einer Kette der Gesamtlänge  $L$ .

## I Transformation vom Impuls- in den Ortsraum

Im folgenden sollen Ersetzungsvorschriften für den Übergang vom kontinuierlichen Impulsraum in den kontinuierlichen Ortsraum abgeleitet werden. Nach der linearen Näherung der Dispersionsrelation an den beiden Fermi-Punkten bekommt man folgende drei Typen von Integralen:

$$\begin{aligned} & \frac{L}{2\pi} \int dk f_{\sigma}^{\dagger R,L}(k) f_{\sigma}^{R,L}(k) \\ & \frac{L}{2\pi} \int dk f_{\sigma}^{\dagger R,L}(k) (k \mp k_F) f_{\sigma}^{R,L}(k) \\ & \frac{L^2}{4\pi^2} \int dk \int dq f_{\sigma}^{\dagger R,L}(k) W_{\sigma\sigma'}(q) f_{\sigma'}^{R,L}(k-q) \end{aligned}$$

Zunächst substituiert man

$$k' = k \mp k_F$$

und hat dann die Fourier-Transformation

$$\begin{aligned} f_{\sigma}^{\dagger R,L}(k' \pm k_F) &= \frac{1}{\sqrt{2aL}} \int dx \tilde{f}_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) e^{\mp i k_F x} e^{-i k' x} \\ f_{\sigma'}^{R,L}(k' \pm k_F - q) &= \frac{1}{\sqrt{2aL}} \int dx \tilde{f}_{\sigma'}^{R,L}(x) e^{\pm i k_F x} e^{i(k'-q)x} \\ W_{\sigma\sigma'}(q) &= \frac{1}{L} \int dx W_{\sigma\sigma'}(x) e^{i q x} \end{aligned}$$

unter Beachtung der Vollständigkeitsrelation auszuführen. Durch die kanonische Transformation

$$\begin{aligned} f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) &= \tilde{f}_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) e^{\mp i k_F x} \\ f_{\sigma'}^{R,L}(x) &= \tilde{f}_{\sigma'}^{R,L}(x) e^{\pm i k_F x} \end{aligned}$$

ändern sich die Vertauschungsregeln

$$\begin{aligned} [\tilde{f}_{\sigma}^{\dagger R,L}(x), \tilde{f}_{\sigma'}^{\dagger R,L}(x')]_{+} &= [f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x), f_{\sigma'}^{\dagger R,L}(x')]_{+} = 0 \\ [\tilde{f}_{\sigma}^{R,L}(x), \tilde{f}_{\sigma'}^{R,L}(x')]_{+} &= [f_{\sigma}^{R,L}(x), f_{\sigma'}^{R,L}(x')]_{+} = 0 \\ [\tilde{f}_{\sigma}^{R,L}(x), \tilde{f}_{\sigma'}^{\dagger R,L}(x')]_{+} &= [f_{\sigma}^{R,L}(x), f_{\sigma'}^{\dagger R,L}(x')]_{+} = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(x-x') \end{aligned}$$

nicht. Das liefert folgende Transformationsvorschriften für die Operatoren:

$$f_{\sigma}^{\dagger R,L}(k' \pm k_F) = \frac{1}{\sqrt{2aL}} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) e^{-ik'x}$$

$$f_{\sigma}^{R,L}(k' \pm k_F - q) = \frac{1}{\sqrt{2aL}} \int dx f_{\sigma}^{R,L}(x) e^{i(k'-q)x}$$

Unter Verwendung der Identität

$$k e^{ikx} = -i \partial_x e^{ikx}$$

und partieller Integration ergeben sich die gesuchten Beziehungen.

$$\begin{aligned} \frac{L}{2\pi} \int dk f_{\sigma}^{\dagger R,L}(k) f_{\sigma}^{R,L}(k) &= \frac{1}{2a} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) f_{\sigma}^{R,L}(x) \\ \frac{L}{2\pi} \int dk f_{\sigma}^{\dagger R,L}(k) (k \mp k_F) f_{\sigma}^{R,L}(k) &= \frac{1}{2a} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) (i \partial_x) f_{\sigma}^{R,L}(x) \\ \frac{L^2}{4\pi^2} \int dk \int dq f_{\sigma}^{\dagger R,L}(k) W_{\sigma\sigma'}(q) f_{\sigma'}^{R,L}(k-q) &= \frac{1}{2a} \int dx f_{\sigma}^{\dagger R,L}(x) W_{\sigma\sigma'}(x) f_{\sigma'}^{R,L}(x) \end{aligned} \quad (\text{I.1})$$

Bei  $L$  handelt es sich um die Länge der Kette und bei  $2a$  um die Größe der Einheitszelle.

## J Zur CP<sup>1</sup>-Darstellung

Aus der definierenden Eigenschaft der lokalen SU(2) Transformation

$$U^+ \underline{\mathbf{n}} \underline{\sigma} U = \sigma^z \quad \Leftrightarrow \quad \underline{\mathbf{n}} \underline{\sigma} = U \sigma^z U^+$$

folgt zunächst

$$\underline{\mathbf{n}} = \bar{Z} \underline{\sigma} Z \quad \underline{\mathbf{n}}^2 = 1 \quad \bar{Z} Z = 1.$$

Die Nebendiagonalelemente von  $U^+ \partial_{x,\tau} U$  ergeben sich einfach durch Einsetzen von (3.15). Um die Diagonalelemente zu verifizieren, überlegt man sich, daß  $\text{Re}(\bar{Z} \partial_{x,\tau} Z) = \text{Re}(Z \partial_{x,\tau} \bar{Z}) = 0$  und  $\text{Im}(\bar{Z} \partial_{x,\tau} Z) = -\text{Im}(Z \partial_{x,\tau} \bar{Z})$  gelten muß. Die zweite Bedingung sieht man mit  $z_i = x_i + i y_i$  unmittelbar ein. Wegen  $\bar{Z} Z = 1$  ist

$(x_1, y_1, x_2, y_2)^T$  ein vierdimensionaler Vektor, der auf die Oberfläche der Einheitskugel zeigt. Damit liegt die Parametrisierung

$$\begin{aligned}x_1 &= \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma \\y_1 &= \cos \alpha \cos \beta \sin \gamma \\x_2 &= \cos \alpha \sin \beta \\y_2 &= \sin \alpha\end{aligned}$$

nahe. Setzt man das in  $\text{Re}(\bar{Z} \partial_{x,\tau} Z)$  ein, folgt nach Koeffizientenvergleich von  $\partial_{x,\tau} \alpha$ ,  $\partial_{x,\tau} \beta$  und  $\partial_{x,\tau} \gamma$   $\text{Re}(\bar{Z} \partial_{x,\tau} Z) = 0$ .

Den Ausdruck  $U^+ \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_{x,\tau} \mathbf{n}) U$  schreibt man wie folgt aus

$$U^+ \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_{x,\tau} \mathbf{n}) U = \sum_a U^+ \sigma^a U \cdot (\mathbf{n} \times \partial_{x,\tau} \mathbf{n})^a \quad \text{mit } a = x, y, z.$$

Durch Anschreiben von  $U^+ \sigma^a U$  erkennt man, daß für die Diagonalelemente von  $U^+ \underline{\sigma}(\mathbf{n} \times \partial_{x,\tau} \mathbf{n}) U$  die Beziehung

$$\pm \sum_a n^a \cdot (\mathbf{n} \times \partial_{x,\tau} \mathbf{n})^a = \pm \partial_{x,\tau} \mathbf{n} (\mathbf{n} \times \mathbf{n}) = 0$$

folgt. Die jeweils 80 Terme der Nebendiagonalelemente vereinfachen sich mit  $\bar{Z} Z = 1$  unmittelbar zu (3.17).

Beim nichtlinearen  $\sigma$ -Modell führt die Verwendung der Fierz-Identität

$$\sum_a \sigma_{\alpha\beta}^a \sigma_{\beta\gamma}^a = 2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}$$

auf

$$\frac{1}{4} (\partial_{x,\tau} \mathbf{n})^2 = (\partial_{x,\tau} \bar{Z}) (\partial_{x,\tau} Z) + \frac{1}{4} (\bar{Z} \ddot{\partial}_{x,\tau} Z)^2. \quad (\text{J.1})$$

Betrachtet man den Ausdruck

$$\begin{aligned}\left| (\partial_{x,\tau} - i A_{x,\tau}) Z \right|^2 &= (\partial_{x,\tau} + i A_{x,\tau}) \bar{Z} (\partial_{x,\tau} - i A_{x,\tau}) Z \\ &= \partial_{x,\tau} \bar{Z} \partial_{x,\tau} Z - i A_{x,\tau} (\bar{Z} \ddot{\partial}_{x,\tau} Z) - A_{x,\tau}^2 \bar{Z} Z\end{aligned} \quad (\text{J.2})$$

und berücksichtigt, daß es sich um eine Lagrange-Dichte handelt, folgt die Bewegungsgleichung  $A_{x,\tau} = -i/2(\bar{Z} \vec{\partial}_{x,\tau} Z)$ , was mit (3.16) übereinstimmt. Setzt man das in (J.2) ein, ergibt sich (J.1).

Beim topologischen Term ist der Ausdruck

$$\begin{aligned} \mathbf{n}(\partial_x \mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n}) &= \varepsilon^{abc} n_a \partial_x n_b \partial_\tau n_c \\ &= \bar{z}_\alpha z_\beta \partial_x (\bar{z}_\gamma z_\delta) \partial_\tau (\bar{z}_\varepsilon z_\lambda) \varepsilon_{abc} \sigma_{\alpha\beta}^a \sigma_{\gamma\delta}^b \sigma_{\varepsilon\lambda}^c \end{aligned}$$

umzuformen. Den Ausdruck

$$\begin{aligned} \sigma_{\varepsilon\mu}^a \sigma_{\mu\lambda}^b &= \delta^{ab} \delta_{\varepsilon\lambda} + i \varepsilon^{abc} \sigma_{\varepsilon\lambda}^c \\ \Leftrightarrow \varepsilon^{abc} \sigma_{\varepsilon\lambda}^c &= -i(\sigma_{\varepsilon\mu}^a \sigma_{\mu\lambda}^b - \delta^{ab} \delta_{\varepsilon\lambda}) \end{aligned}$$

multipliziert man von links mit  $\sigma_{\alpha\beta}^a \sigma_{\gamma\delta}^b$  und bekommt dann unter Berücksichtigung der Fiertz-Identität

$$\varepsilon^{abc} \sigma_{\alpha\beta}^a \sigma_{\gamma\delta}^b \sigma_{\varepsilon\lambda}^c = -i(4 \delta_{\alpha\delta} \delta_{\gamma\lambda} \delta_{\varepsilon\beta} - 2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\lambda} \delta_{\delta\varepsilon} - 2 \delta_{\gamma\delta} \delta_{\alpha\lambda} \delta_{\beta\varepsilon} - 2 \delta_{\varepsilon\lambda} \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}).$$

Hiermit und unter Beachtung von  $\text{Re}(\bar{Z} \partial_{x,\tau} Z) = 0$  d.h.  $\bar{Z} \partial_{x,\tau} Z = -Z \partial_{x,\tau} \bar{Z}$  folgt

$$\begin{aligned} \varepsilon^{abc} n_a \partial_x n_b \partial_\tau n_c &= 2i(\partial_x Z \partial_\tau \bar{Z} - \partial_x \bar{Z} \partial_\tau Z) \\ &= 2(\partial_x A_\tau - \partial_\tau A_x) \end{aligned}$$

Weitere Eigenschaften der  $\text{CP}^1$ -Darstellung findet man bei [53,54,55].

## K Innere Symmetrien und Ströme

Ist die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\varphi_r, \partial_\mu \varphi_r)$$

invariant unter der lokalen Transformation

$$\varphi_r \rightarrow e^{i\Lambda_{rs}} \varphi_s,$$

folgt der lokal erhaltene Strom [63]

$$J^\mu = -i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \varphi_r)} \Lambda_{rs} \varphi_s.$$

Bei einer U(1)-Transformation ist der einzige Generator der Gruppe das Einselement  $\underline{\Lambda} = \alpha \underline{1}$ , es handelt sich also um eine Phasentransformation.

Bei einer SU(2)-Transformation sind die Generatoren durch die Pauli-Matrizen gegeben  $\underline{\Lambda} = \alpha^i \sigma^i$ , was dann auch zum entsprechenden Strom führt.

## L Stromdefinition beim nichtlinearen $\sigma$ -Modell

Wie P. Chandra et al. [64] gezeigt haben, ist die Magnetisierung  $\mathbf{j}_{S,\tau}$  und der Magnetisierungsstrom  $\mathbf{j}_{S,x}$  beim nichtlinearen  $\sigma$ -Modell

$$\mathcal{L}_{NI\sigma M} = \frac{\rho_S}{2} \left[ (\partial_1 \mathbf{n})^2 + \frac{1}{v_S^2} (\partial_0 \mathbf{n})^2 \right],$$

wobei  $\rho_S$  die Spin-Steifigkeit ist, durch

$$\mathbf{j}_{S,\tau} = -\frac{\rho_S}{v_S} (\mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n})$$

$$\mathbf{j}_{S,x} = -\rho_S (\mathbf{n} \times \partial_x \mathbf{n})$$

gegeben. Setzt man diese Beziehungen in die Lagrange-Dichte ein, ergibt sich

$$\mathcal{L}_{NI\sigma M} = \frac{1}{2\rho_S} [\mathbf{j}_{S,x}^2 + \mathbf{j}_{S,\tau}^2] = \frac{1}{2\rho_S} \mathbf{j}_S^{\tilde{\mu}} \mathbf{j}_{S,\tilde{\mu}}.$$

## Literatur

- [1] J. G. Bednorz und K. A. Müller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986); Rev. Mod. Phys. **60**, 585 (1988)
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper und J. R. Schieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957)
- [3] R. J. Birgenau, Am. J. Phys. **58**, 28 (1990)
- [4] S. Chakravarty, B. I. Halperin und D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **60**, 1057 (1988); Phys. Rev. B **39**, 2344 (1989)
- [5] A. Angelucci und G. Jug, Int. J. Mod. Phys. B **3**, 1069 (1989)
- [6] Y. J. Uemura et al., Phys. Rev. Lett. **59**, 1045 (1987); L. F. Mattheiss, Phys. Rev. Lett. **58**, 1028 (1987)
- [7] V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987)
- [8] Z. Shen et al., Phys. Rev. B **36**, 8414 (1987)
- [9] N. Nücker et al., Phys. Rev. B **37**, 5158 (1988)
- [10] R. J. Birgenau et al., Phys. Rev. B **38**, 6614 (1988); R. J. Birgenau et al., Phys. Rev. B **39**, 2868 (1989); T. R. Thurston et al., Phys. Rev. B **40**, 4585 (1989)
- [11] *Physical Properties of High Temperature Superconductors I / II*, edited by D. M. Ginsberg (World Scientific, Singapore, 1989)
- [12] T. J. Witt, Phys. Rev. Lett. **61**, 1423 (1988)
- [13] Gang Xiao et al., Phys. Rev. B **39**, 315 (1989)
- [14] N. D. Mermin und H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966)
- [15] A. M. Polyakov, Phys. Lett. B **59**, 79 (1977); D. R. Nelson and R. A. Pelcovits, Phys. Rev. B **16**, 2191 (1977)
- [16] G. Shirane et al., Phys. Rev. Lett. **59**, 1613 (1987)
- [17] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena* (McGraw-Hill, 1978)
- [18] G. Aeppli et al., Phys. Rev. Lett. **62**, 2052 (1989)
- [19] R. R. P. Singh et al., Phys. Rev. Lett. **62**, 2736 (1989)
- [20] M. Matsuda et al., Phys. Rev. B **55**, R11953 (1997)
- [21] S. Klee und A. Muramatsu, Nucl. Phys. B **473**, 539 (1996); S. Klee, Doktorarbeit, Universität Würzburg (1995)
- [22] Masatomo Uehara et al., J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2764 (1996)
- [23] E. Dagotto, J. Riera und D. Scalapino, Phys. Rev. B **45**, 5744 (1992)
- [24] T. M. Rice et al., Europhys. Lett. **23** (6), 445-449 (1993)



- [25] S. Goplan, T. M. Rice und M. Sigrist, Phys. Rev. B **49**, 8901 (1994)
- [26] M. Sigrist, T. M. Rice und F. C. Zhang, Phys. Rev. B **49**, 12058 (1994)
- [27] R. Eccleston et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 2626 (1994)
- [28] M. Azuma et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3463 (1994)
- [29] K. Ishida et al., Phys. Rev. B **53**, 2827 (1996)
- [30] R. Eccleston et al., Phys. Rev. B **53**, R14721 (1996)
- [31] M. Matsuda et al., Phys. Rev. B **53**, 12201 (1996)
- [32] M. Matsuda et al., Phys. Rev. B **54**, 12199 (1996)
- [33] S. Matsumoto et al., Phys. Rev. B **53**, R11942 (1996)
- [34] K. Ishida et al., J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 3222 (1994)
- [35] Z. Hiroi und M. Takano, Nature **377**, 41 (1995)
- [36] C. Kübert und A. Muramatsu, Phys. Rev. B **47**, 787 (1993); C. Kübert, Diplomarbeit, Universität Würzburg (1991)
- [37] G. Dopf, A. Muramatsu und W. Hanke, Phys. Rev. Lett. **68**, 353 (1992); G. Dopf, A. Muramatsu und W. Hanke, Europhys. Lett. **17**, 559 (1992)
- [38] I. Lindgreen, J. Phys. B **7**, 2441 (1974)
- [39] A. Muramatsu, R. Zeyher und D. Schmeltzer, Europhys. Lett. **7**, 743 (1988)
- [40] A. Muramatsu und R. Zeyher, Nuc. Phys. B **346**, 387 (1990)
- [41] J. W. Negele und H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley, New York, 1988)
- [42] R. P. Feynman und A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, 1965)
- [43] M. V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. A **329**, 45-57 (1984)
- [44] G. Sierra, J. Phys. A: Math. Gen. **29** (1996) 3299-3310
- [45] F. C. Zhang und T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988)
- [46] M. Wagner, *Gruppentheoretische Methoden in der Physik* (Vieweg, Braunschweig / Wiesbaden, 1998)
- [47] X. G. Wen and A. Zee, Phys. Rev. Lett. **61**, 1025 (1988)
- [48] X. G. Wen, Phys. Rev. B **39**, 7223 (1989)
- [49] B. I. Shraiman et al., Phys. Rev. Lett. **61**, 467 (1988); Phys. Rev. B **41**, 350 (1990); **42**, 2485 (1990)
- [50] B. I. Shraiman et al., Phys. Rev. Lett. **62**, 1564 (1989)

- [51] C. Kübert und A. Muramatsu, Phys. Rev. B **47**, 787 (1993); C. Kübert und A. Muramatsu, Europhys. Lett **30** (8), 481-486 (1995); C. Kübert, Doktorarbeit, Universität Würzburg (1994)
- [52] I. N. Bronstein und K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, 23. Auflage (Verlag Hary Deutsch Thun und Frankfurt/Main 1987)
- [53] A. D'Adda et al., Nuc. Phys. B **146** (1978) 63-76
- [54] E. Witten, Nuc. Phys. B **149** (1978) 285-320
- [55] A. D'Adda et al., Nuc. Phys. B **152** (1979) 125-144
- [56] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963)
- [57] W. E. Thirring, Ann. Phys. **3**, 91-112 (1958)
- [58] C. M. Sommerfeld, Ann. Phys. **26**, 1-43 (1963)
- [59] z.B.: S. T. Kim et al., Nuc. Phys. B **155** (1979) 357-367
- [60] D. Amit et al., J. Phys. A: Math. Gen., **13** (1980) 585-620
- [61] J. Voit, Rep. Prog. Phys. **57** (1994) 977-1116
- [62] A. M. Polyakov, *Gauge Fields and Strings* (Harwood Academic Publishers, Chur 1987)
- [63] J. D. Bjorken und S. D. Drell, *Relativistische Quantenfeldtheorie* (B.I. Wissenschaftsverlag, Mannheim 1993)
- [64] P. Chandra et al., J. Phys.: Condens. Matter **2** (1990) 7933-7972

## **Dank**

Am Ende dieser Arbeit danke ich besonders Herrn Prof. Dr. A. Muramatsu für die interessante Themenstellung in einem jungen und aktuellen Forschungsgebiet und seine ständige Bereitschaft zu fachlichen Diskussionen.

Herrn Prof. Dr. U. Weiß danke ich für die Übernahme des Mitberichts.

Weiterhin möchte ich mich bei den Herren Dr. J. Fricke, Dr. F. Assaad und Dr. C. Kübert für ihre Diskussionsbereitschaft bedanken.

Zu einem guten Arbeitsklima trugen meine Kommilitonen Carmen Kohnle, Ellen Reister, Markus Till und Stephan Scholze aber auch die anderen Mitarbeiter des Instituts bei, wofür ich ihnen dankbar bin.

Bei Vasilios Maraslis möchte ich mich für die kritische und konstruktive Durchsicht der Arbeit bedanken.

Zum Schluß gilt mein Dank auch meinen Eltern, weil sie mir das Studium ermöglicht haben.

## **Erklärung**

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und nur die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet zu haben.

Stuttgart, den 14. April 1998

(Elmar Vogel)