UNIVERSITÄT BONN Physikalisches Institut

Application of the Renormalization Group and the 1/N-Expansion to the SO(5) Model for High- T_c Superconductors

> by Andreas Amann

Abstract

The experimental consequences of the SO(5) model for high- T_c superconductors are examined. Using the renormalization group technique a qualitative phase diagram is obtained. The low and high temperature regimes are discussed. Between these regimes we found an intermediate regime on the antiferromagnetic side of the phase diagram, which is absent at the superconducting side. The crossovers between the different regimes are examined. By using the 1/Nexpansion, we determine the mass parameters of the theory analytically. The imaginary part of the self energy, which is important for damping, is calculated to order 1/N.

Post address: Nußallee 12 53115 Bonn Germany



BONN-IB-98 Bonn University May 1998

UNIVERSITÄT BONN Physikalisches Institut

Anwendung der Renormierungsgruppe und der 1/N Entwicklung auf die SO(5)-Theorie der Hochtemperatursupraleiter

> von Andreas Amann

Dieser Forschungsbericht wurde als Diplomarbeit von der Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Bonn angenommen.

Angenommen am: Referent: Korreferent: 22. Mai 1998 Prof. Dr. H. Monien Prof. Dr. G. von Gehlen

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Die Hochtemperatursupraleitung	7
	2.1 Historisches	$\overline{7}$
	2.2 Experimentelle Ergebnisse	8
	2.3 Theoretische Modelle	13
3	Das $SO(5)$ -Modell	21
	3.1 Der Superspin	21
	3.2 Beschreibung durch das nichtlineare Sigma-Modell	25
	3.3 Momentaner Stand der $SO(5)$ -Theorie	27
4	Die Renormierungsgruppe	29
	4.1 Allgemeines zur Renormierungsgruppe	29
	4.2 Das anisotrope quanten nichtlineare Sigma-Model	29
	4.3 Auswertung und Diskussion der RG-Gleichungen	39
5	Die 1/N-Entwicklung	51
	5.1 Das isotrope nichtlineare Sigma-Modell	51
	5.2 Spin-1/2-Antiferromagnet	53
	5.3 Anwendung auf das $SO(5)$ -Modell	57
6	Zusammenfassung und Ausblick	73
	Abbildungsverzeichnis	75
	Literatur	77

1 Einleitung

Eines der interessantesten und aktuellsten Themen der Physik der kondensierten Materie ist die Hochtemperatursupraleitung (HTS).

Seit der Entdeckung der HTS im Jahre 1986 durch Bednorz und Müller [Bed86] wurden zahlreiche Versuche unternommen, dieses rätselhafte Phänomen theoretisch zu beschreiben. Bis heute existiert aber noch kein Modell, das alle experimentell beobachteten Phänomene befriedigend erklärt.

Ein Problem bei der theoretischen Erklärung der HTS besteht darin, daß selbst sehr vereinfachte Modelle, wie z.B. das Hubbard-Modell [Hub63] oder das t-J-Modell [Zha88], bisher weder analytisch noch numerisch in Dimensionen größer als eins gelöst werden konnten. Für die mikroskopischen Beschreibung der für die HTS relevanten Physik sind aber zweidimensionale Modelle notwendig.

Weiterhin weisen die HTS-Materialien neben der Supraleitung noch eine Vielzahl weiterer ungewöhnlicher Phänomene auf, deren Zusammenhang mit der HTS bisher noch nicht verstanden ist.

Die Ausgangsmaterialien der Hochtemperatursupraleiter stellen die erste experimentelle Realisierung von effektiv zweidimensionalen Antiferromagneten dar. Die für den Antiferromagnetismus verantwortliche magnetische Wechselwirkung zwischen den Elektronen sollte auch bei der Entstehung der Supraleitung eine wichtige Rolle spielen. Ein theoretisches Modell, das die Verbindung zwischen Antiferromagnetismus und HTS erklärt, wurde aber bis heute nicht gefunden.

Im Januar 1997 wurde von Shou-Cheng Zhang das phänomenologische SO(5)-Modell zur Erklärung der HTS vorgeschlagen [Zha97]. In diesem Modell wird der Zusammenhang zwischen HTS und Antiferromagnetismus realisiert, in dem eine Symmetrie zwischen diesen beiden Phänomenen postuliert wird. Dadurch lassen sich eine Reihe von empirisch beobachteten Effekten recht einfach erklären. Es läßt sich aber noch keine Aussage darüber machen, ob sich die SO(5)-Theorie als Modell für alle wesentlichen Aspekte der HTS eignet.

Die Akzeptanz des SO(5)-Modells wird zum einen davon abhängen, ob eine überzeugende Ableitung aus mikroskopischen Modellen gelingt. Zum anderen muß sich das Modell bei der Vorraussage und Erklärung von typischen Effekten der HTS bewähren. Das SO(5)-Modell wird hauptsächlich durch qualitative Überlegungen motiviert. Es ist noch ungeklärt, inwieweit es sich auch für quantitative Aussagen verwenden läßt. Dies wird in der vorliegenden Arbeit näher untersucht.

Ziel dieser Arbeit ist es, analytische und numerische Methoden zu entwickeln, die geeignet sind, experimentell überprüfbare Voraussagen aus dem SO(5)-Modell für die HTS abzuleiten, und so einen Beitrag zu dessen Beurteilung zu leisten.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

In Kapitel 2 geben wir einen kurzen Überblick über die wichtigsten experimentellen Eigenschaften der HTS-Materialien, deren Kenntnis zur Beurteilung des SO(5)-Modell notwendig sind. Dabei wird auch auf einige der bisherigen theoretischen Modelle eingegangen.

In Kapitel 3 wird das SO(5)-Modell eingeführt. Durch entsprechende Vereinfachung wird das Modell auf die Form des anisotropen nichtlinearen Sigma-Modells gebracht, welches die Basis für die weiteren Untersuchungen darstellt. Es wird kurz auf die aktuelle Entwicklung seit der Einführung des SO(5)-Modells eingegangen.

Anschließend wird in Kapitel 4 die Methode der Renormierungsgruppe auf das vorliegende SO(5)-Modell angewandt, um so ein qualitatives Phasendiagramm zu erhalten. Die dabei gefundenen Renormierungsgruppen-Gleichungen gelten für eine allgemeine Klasse von anisotropen nichtlinearen Sigma-Modellen in zwei Dimensionen. Die Grenzfälle großer und kleiner Temperatur sowie verschiedene Cross-Over-Verhalten werden diskutiert.

In Kapitel 5 wird die 1/N-Entwicklung zunächst am Beispiel des Spin-1/2-Antiferromagneten vorgestellt, und dann auf das SO(5)-Modell angewendet. Wir leiten dabei eine Sattelpunktsgleichung für die Masse der elementaren Anregungen ab und lösen diese numerisch. Anschließend leiten wir analytische Ausdrücke für die Selbstenergie her, die im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr vollständig numerisch ausgewertet wurden.

Zum Abschluß werden in Kapitel 6 die gewonnenen Ergebnisse zusammengefaßt und diskutiert, sowie ein Ausblick auf mögliche zukünftige Untersuchungen gegeben.

2 Die Hochtemperatursupraleitung

In diesem Kapitel wird ein kurzer Überblick über den aktuellen Stand der HTS gegeben, wobei wir uns hauptsächlich auf Aspekte beschränken, die für das Verständnis des SO(5)-Modells wichtig sind.

Für eine allgemeinere und ausführlichere Darstellung empfiehlt sich zum Beispiel der aktuelle Übersichtsartikel von M.B. Maple [Map98]. Theoretische Aspekte werden etwa in den Büchern von Auerbach [Aue94], Fradkin [Fra91] und Gonzales et al. [Gon95] dargestellt. Für speziellere Themen verweisen wir auf die von Bedell et al. editierten Los Alamos Proceedings [Bed90, Bed94], sowie auf die von Ginsberg editierte Reihe [Gin96].

2.1 Historisches

Kamerlingh Onnes entdeckte 1911, daß Quecksilber bei einer Temperatur von ca. 4 K den elektrischen Widerstand plötzlich vollständig verliert. Diese Supraleitung wurde danach auch bei vielen anderen Elementen und einfachen Verbindungen beobachtet, doch gab es lange Zeit keine Erklärung für dieses Phänomen.

Erst 1957 gelang es Bardeen, Cooper und Schrieffer [Bar57], eine Theorie vorzuschlagen, die das Auftreten der Supraleitung erfolgreich beschreiben konnte. In der BCS-Theorie werden Elektronen paarweise zu sogenannten Cooper-Paaren gebunden, wobei die anziehende Wechselwirkung durch Phononenaustausch vermittelt wird. Die Cooper-Paare genügen der Bose-Statistik und können zu einer Supraflüssigkeit kondensieren.

Die BCS-Theorie hat sich bei der Erklärung vieler in supraleitenden Materialien auftretenden Effekte hervorragend bewährt. So ergibt sich zum Beispiel aus der BCS-Theorie, daß die Temperatur T_c , bei der die Supraleitung einsetzt, von der Masse M des verwendeten Isotops wie

$$T_c \sim M^{-\frac{1}{2}} \tag{2.1}$$

abhängt, was mit den experimentellen Beobachtungen bei den meisten herkömmlichen Supraleitern gut übereinstimmt. Eine allgemeine Einführung in die BCS-Theorie findet man in den Büchern von Schrieffer [Sch64] und Kittel [Kit88]. Nach der BCS-Theorie kann T_c nicht wesentlich größer als 25 K sein. Anfang der 70er Jahre war mit Nb_3Ge und $T_c \approx 23$ K diese Schwelle fast erreicht. Im Jahre 1986 entdeckten Bednorz und Müller, daß gewisse Verbindungen des La-Ba-Cu-O Systems bei $T_c \approx 30$ K supraleitend werden [Bed86]. Das überaschende an dieser Entdeckung war nicht nur der hohe T_c -Wert, der sich nicht mehr mit Hilfe der BCS-Theorie erklären läßt, sondern auch, daß das betreffende Material in nichtsupraleitendem Zustand eine isolierende Keramik darstellt



Abbildung 1: Die Entwicklung der höchsten bekannten kritischen Temperatur T_c seit der Jahrhundertwende

und sich somit grundlegend von den zuvor untersuchten, meist metallischen Supraleitern unterscheidet. Dies löste weltweite Forschungsaktivitäten aus, in deren Folge ähnliche Materialien mit immer höherem T_c gefunden wurden. Der momentan höchste bekannte Wert für T_c wurde mit ca. 133 K in einer Verbindung des Hg-Ba-Ca-Cu-O System gemessen [Put93]. Unter hohem Druck erreicht man mit den gleichen Materialien sogar $T_c \approx 164$ K. Die Entwicklung des höchsten bekannten T_c -Wertes seit 1911 ist in Abbildung 1 dargestellt. Inzwischen ist auch die technische Nutzung der meist spröden und schwer zu bearbeitenden Hochtemperatursupraleiter in greifbare Nähe gerückt. Insbesondere das Erzeugen von hohen Magnetfeldern und die verlustfreie Übertragung elektrischer Leistung sind mögliche Anwendungsgebiete. Weitere Anwendungen werden in der supraleitenden Elektronik erwartet. Man geht allgemein davon aus, daß die HTS die Entwicklung der Technologie in den nächsten fünf bis zehn Jahren wesentlich beeinflussen wird.

2.2 Experimentelle Ergebnisse

Seit ihrer Entdeckung 1986 gehören die Hochtemperatursupraleiter zu den am besten untersuchten Materialien in der Physik. Auch wenn der Mechanismus, der zur HTS führt noch nicht verstanden ist, konnten doch viele wichtige Teilfragen inzwischen geklärt werden.



Abbildung 2: Struktur von $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

2.2.1 Die Struktur der Hochtemperatursupraleiter

Die HTS-Materialien haben typischerweise eine Struktur wie in Abbildung 2 am Beispiel von $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ dargestellt. Bei diesem Material wechseln sich einzelne leitende Kupferdioxidebenen mit isolierenden Schichten anderer Elemente ab. Es sind auch HTS-Materialien bekannt, bei denen jeweils zwei oder drei Kupferdioxidebenen zu einer Lage zusammengefaßt sind.

Im Unterschied zu den konventionellen Supraleitern tritt bei den Hochtemperatursupraleitern so gut wie kein Isotopeneffekt auf. Dies ist ein wichtiger Hinweis darauf, daß die anziehende Wechselwirkung zwischen den Elektronen nicht durch Phononenaustausch oder andere vom Kristallgitter abhängende Mechanismen vermittelt wird. Die BCS-Theorie reicht folglich nicht zur Erklärung der HTS aus.

Die für die Supraleitung wesentliche Physik findet nach heutiger Auffassung in den zentralen Kupferdioxidebenen statt. Die umgebenden Schichten stellen lediglich ein Ladungsreservoir dar, über das die Anzahl der Elektronen auf den CuO_2 -Ebenen reguliert wird. Diese Regulierung wird durch entsprechende Dotierung erreicht. So wird zum Beispiel in antiferromagnetischem La_2CuO_4 dreiwertiges Lanthan durch zweiwertiges Strontium ersetzt. In La_2CuO_4 ist das $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital der Cu^{2+} -Ionen genau halb gefüllt. Aufgrund der starken



Abbildung 3: Phasendiagramm von $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ in Abhängigkeit der Dotierung x

Coulomb-Abstoßung zwischen Elektronen, die sich auf demselben Cu-Ion befinden, sind die Elektronen auf den Kupferplätzen lokalisiert und es bildet sich antiferromagnetische Ordnung aus. Durch die Dotierung entstehen auf den CuO_2 -Ebenen zusätzliche Löcher, welche die antiferromagnetische Ordnung zerstören und auf noch nicht geklärte Weise zur Supraleitung führen. Das Phasendiagramm von $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ in Abhängigkeit der Dotierung x ist in Abbildung 3 dargestellt. Diese Art von Phasendiagramm wird typischerweise bei fast allen Hochtemperatursupraleitern beobachtet. Zwischen der antiferromagnetischen (AFM) und der supraleitenden (SC) Phase tritt eine Spinglasphase (SG) auf, in der keine langreichweitige Ordnung herrscht. Man vermutet, daß diese Phase durch Störstellen in den untersuchten Materialien hervorgerufen wird, und bei sehr reinen Proben nicht auftritt.

2.2.2 Die Symmetrie des Ordnungsparameters

Ein weiterer Unterschied zwischen konventionellen und Hochtemperatursupraleitern besteht in der Symmetrie des Ordnungsparameters Δ . Dieser ist mikroskopisch definiert als der Erwartungswert des Cooper-Paar Operators,

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) = \langle \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'\sigma} c_{-\mathbf{k}'\sigma'} \rangle.$$
(2.2)

Hierbei ist $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ die Cooper-Paar-Wellenfunktion und $c_{\mathbf{k}\sigma}$ ein Fermioperator, der ein Elektron mit Impuls \mathbf{k} und Spin σ vernichtet. Da die Fermioperatoren antivertauschen gilt

$$\Delta_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) = -\overline{\Delta}_{\sigma'\sigma}(\mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{k}) \begin{bmatrix} 0 & 1\\ -1 & 0 \end{bmatrix}.$$
 (2.3)

Der Ordnungsparameter $\Delta(\mathbf{k})$ ist also bezüglich Drehungen im Spinraum ein Skalar.

Konventionelle Supraleiter besitzen einen im Impulsraum isotropen Ordnungsparameter, d.h. $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0$ hängt nicht von \mathbf{k} ab. Aus der BCS-Theorie folgt daraus eine isotrope Lücke (Gap) im Anregungsspektrum von $2|\Delta_0|$.

Insbesondere in den mit Löchern dotierten Hochtemperatursupraleitern beobachtet man einen anisotropen Anregungs-Gap. Diese Anisotropie läßt sich durch eine $d_{x^2-y^2}$ -Symmetrie des Ordnungsparameters erklären, d.h.

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)], \qquad (2.4)$$

wobei a die Gitterkonstante der CuO_2 -Ebenen ist.

Die Symmetrie des Ordnungsparameters ist also niedriger als die Symmetrie des zugrundeliegenden Kristallgitters¹. Es gibt eindimensionale Linien auf der Fermioberfläche, an denen $\Delta(\mathbf{k})$ verschwindet, und somit verschwindet dort auch der Gap des Anregungsspektrums. Die Symmetrie des Ordnungsparameters ist in Abbildung 4 dargestellt. Um den Ordnungsparameter vollständig zu bestimmen, müssen also sowohl sein Betrag als auch seine Phase in Abhängigkeit von \mathbf{k} gemessen werden. Im Gegensatz zu den mit Löchern dotierten Supraleitern, scheinen die mit Elektronen dotierten Hochtemperatursupraleiter eine *s*-Wellenbeziehungsweise eine erweiterte *s*-Wellen-Symmetrie aufzuweisen [Sta95]. Bei der erweiterten *s*-Wellen-Symmetrie ist der Ordnungsparameter nicht isotrop, besitzt aber die volle Symmetrie des Kristallgitters.

2.2.3 Der normalleitende Zustand

Neben der supraleitenden und antiferromagnetischen Phase besitzt auch die normalleitende Phase der Kuprate sehr bemerkenswerte Eigenschaften.

Bei vielen mit Löchern dotierten Supraleitern beobachtet man bei optimaler Dotierung (die Dotierung mit der höchsten kritischen Temperatur T_c), daß der elektrische Widerstand in der CuO_2 -Ebene $\rho_{ab}(T)$ linear von der Temperatur abhängt:

$$\rho_{ab}(T) \approx \rho_{ab}(0) + cT. \tag{2.5}$$

 $^{^1 {\}rm In}$ der Notation von Landau und Lifschitz [Lan
88] hat das Kristallgitter eine $D_{3h}\text{-}$ Symmetrie



Abbildung 4: Skizze der $d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Symmetrie des Ordnungsparameters bezüglich der Fermikante bei halber Füllung. Die Phasen des Ordnungsparameters in den Bereichen + und – sind um π gegeneinander verschoben.

Diese lineare Abhängigkeit bleibt von T_c bis zu Temperaturen von etwa 1000 K bestehen. Das extrapolierte $\rho_{ab}(0)$ ist fast Null. Diese Verhalten wird als Anzeichen dafür gewertet, daß die Fermiflüssigkeitstheorie in dieser Situation eventuell nicht anwendbar ist [And87, Lau88]. Nach der Fermiflüssigkeitstheorie erwartet man nämlich ein Verhalten $\rho \sim T^2$, wie man es zum Beispiel im Fall des mit Elektronen optimal dotierten SmCeCuO auch tatsächlich beobachtet. Auch für nicht optimal dotierte Supraleiter ist das Verhalten der elektrischen Widerstände ρ_{ab} und ρ_c bemerkenswert. Im unterdotierten Bereich weisen sowohl ρ_{ab} als auch ρ_c Isolatorverhalten auf, d.h. der Widerstand nimmt bei hohen Temperaturen mit steigender Temperatur ab. Im überdotierten Bereich verhalten sich ρ_{ab} und ρ_c dagegen metallisch ($\partial \rho / \partial T > 0$).

2.2.4 Der Pseudogap

Eine weitere bemerkenswerte Eigenschaft des normalleitenden Zustandes ist das *Pseudogap*-Verhalten, das bei unterdotierten Kupraten in einer Reihe von Meßgrößen beobachtet wird. So weicht etwa der elektrische Widerstand in den CuO_2 -Ebenen ρ_{ab} unterhalb einer charakteristischen Temperatur T^* von seinem linearen Verhalten bei hohen Temperaturen ab, wie in Abbildung 5 skizziert. Man nimmt an, daß sich unterhalb von T^* lokale Elektronenpaarsinguletts aus-



Abbildung 5: Skizze des Pseudogapverhaltens für ρ_{ab}

bilden, die zu einer Verarmung niederenergetischer Anregungen führen und dadurch den Widerstand erhöhen. Da aber noch niederenergetische Anregungen vorhanden sind, spricht man von einem Pseudogap. Der Pseudogap hat dieselbe Symmetrie wie der Supraleitungsgap. Unterhalb von T_c scheint der Supraleitungsgap stetig aus dem Pseudogap hervorzugehen, wodurch eine gemeinsame Ursache beider Phänomene nahegelegt wird.

2.3 Theoretische Modelle

2.3.1 Das Hubbard-Modell

Die wesentliche Physik der HTS findet nach heutiger Auffassung in den zentralen Kupferdioxidebenen statt. Ohne Dotierung befinden sich die Kupferionen im Cu^{2+} -Zustand, sie haben also ein Elektron weniger als zur Komplettierung der 3*d*-Schale benötigt wird. Die Sauerstoffionen befinden sich im O^{2-} Zustand, die zweite Hauptschale ist somit vollständig besetzt. Bei einer Dotierung mit Elektronen werden die zusätzlichen Elektronen dazu tendieren, die 3*d*-Schalen des Kupfers zu komplettieren. Bei der Beschreibung der Dynamik dieses Systems beschränkt man sich daher in erster Näherung auf die $3d_{x^2-y^2}$ -Orbitale des Kupfers. Von Anderson wurde daher schon 1987 [And87] das zweidimensionale Einband-Hubbard-Modell mit nächster Nachbarwechselwirkung zur Beschreibung der Dynamik der Elektronen in den Kupferdioxidebenen vorgeschlagen. Dieses Model besitzt den Hamiltonoperator:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$
(2.6)

Dabei bedeutet $\langle i, j \rangle$, daß nur über benachbarte Gitterplätze summiert wird. $c_{i\sigma}^{\dagger}$ ist ein Fermion-Operator, der im $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital des *i*ten Kupferions einen Ladungsträger (Elektron oder Loch, je nach Art der Dotierung) mit Spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ erzeugt und die üblichen fermionischen Antivertauschungsrelationen

$$\{c_{i\sigma}, c^{\dagger}_{j\sigma'}\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}, \qquad (2.7)$$

$$\{c_{i\sigma}^{\dagger}, c_{j\sigma'}^{\dagger}\} = \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = 0$$

$$(2.8)$$

erfüllt. $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}^{}$ zählt die Anzahl der Ladungsträger auf dem *i*-ten Platz mit Spin σ . *t* ist der *Hopping* parameter, der die Wahrscheinlichkeit für das Hüpfen der Elektronen zu benachbarten Gitterplätzen reguliert, und *U* ist ein Maß für die Abstoßung zweier Elektronen am selben Platz.

2.3.2 Molekularfeldnäherung

Das Hubbard-Modell konnte bisher in zwei Dimensionen noch nicht gelöst werden, man ist daher auf Näherungsverfahren angewiesen, die auf vereinfachte Modelle führen. Für eine ausführliche Beschreibung sei auf die Lehrbücher zu diesem Thema verwiesen [Aue94, Fra91, Tsv95], denen die folgende Darstellung zum Teil entnommen ist.

Das Hubbard-Modell (2.6) läßt sich mit Hilfe der Antivertauschungsrelationen auf die folgende Form bringen

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + h.c.) - \frac{2}{3} U \sum_{i} (\mathbf{S}_{i})^{2}, \qquad (2.9)$$

wobei der Spin Operator gegeben ist durch

$$\mathbf{S}_{i} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^{\dagger} \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}. \qquad (2.10)$$

Der Vektor $\boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'}$ hat als Komponenten die Pauli-Matrizen.

In der Molekularfeldnäherung gehen wir davon aus, daß \mathbf{S}_i einen Erwartungswert $\langle \mathbf{S}_i \rangle$ annimmt, und wir die Fluktuationen um den Erwartungswert in zweiter Ordnung vernachlässigen können. Wir nähern also

$$\mathbf{S}^2 \approx \langle \mathbf{S} \rangle^2 + 2 \langle \mathbf{S} \rangle \cdot (\mathbf{S} - \langle \mathbf{S} \rangle).$$
 (2.11)

Mit $\mathbf{M}_i = -\frac{4U}{3} \langle \mathbf{S}_i \rangle$ erhalten wir durch Einsetzen von (2.11) in (2.9) als Molekularfeld-Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}^{\mathrm{MF}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + h.c.) + \frac{3}{8U} \sum_{i} (\mathbf{M}_{i})^{2} + \sum_{i} \mathbf{M}_{i} \cdot \mathbf{S}_{i}, \qquad (2.12)$$

beziehungsweise nach Fouriertransformation

$$\mathcal{H}^{\mathrm{MF}} = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\sum_{\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) n_{\sigma}(\mathbf{k}) + \frac{3}{8U} |\mathbf{M}(\mathbf{k})|^2 + \mathbf{M}^*(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{k}) \right), \quad (2.13)$$

 mit

$$\mathbf{S}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{k}') \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'} c_{\sigma'}(\mathbf{k}' + \mathbf{k}), \qquad (2.14)$$

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -4t(\cos k_x + \cos k_y). \tag{2.15}$$

Betrachten wir ein Molekularfeld mit Néel Form

$$\mathbf{M}_i = \mathbf{M}_0 \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{x}_i), \qquad (2.16)$$

mit $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, dann läßt sich $\mathcal{H}^{\mathrm{MF}}$ ausdrücken als

$$\mathcal{H}^{\rm MF} = \frac{3}{8U} \mathbf{M_0}^2 + \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\sum_{\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) n_{\sigma}(\mathbf{k}) \right) + \frac{1}{2} \mathbf{S}(\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{M_0} + \frac{1}{2} \mathbf{S}(-\mathbf{Q}) \cdot \mathbf{M_0}.$$
(2.17)

Nach Diagonalisieren von (2.17) erhält man die zweifach entartete Dispersionsrelation

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + \frac{1}{4} |\mathbf{M}_0|^2}, \qquad (2.18)$$

die bei $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ einen Gap der Größe $|\mathbf{M}_0|$ aufweist.

Bei halber Füllung werden die Elektronen das untere Band mit der Dispersion E_- vollständig belegen. Die Gesamtenergie des Systems ist in diesem Fall

$$E_{\text{ges}} = \frac{3}{8U} |\mathbf{M}_0|^2 + \int_{0 \le k_x, k_y \le \pi} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} E_-(\mathbf{k}).$$
(2.19)

 \mathbf{M}_0 wird sich so einstellen, daß die Gesamtenergie minimal wird. Daraus ergibt sich für \mathbf{M}_0

$$\frac{3}{2U} = \int_{0 \le k_x, k_y \le \pi} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + \frac{1}{4} |\mathbf{M}_0|^2}},$$
(2.20)

mit der Lösung für $U \ll t$

$$|\mathbf{M}_0| \approx 4t\pi \exp(-3\pi \frac{2t}{u}). \tag{2.21}$$



Abbildung 6: Die antiferromagnetische Magnetisierung $\mathbf{S} = \mathbf{M}_0 / U$ in der Molekularfeldtheorie [Sch88].

In Abbildung 6 aus der Arbeit von Schrieffer, Wen und Zhang [Sch88] ist \mathbf{M}_{0} für allgemeines U/t dargestellt.

Nach der Molekularfeldtheorie nimmt \mathbf{M}_0 und damit $\mathbf{S}(\mathbf{Q})$ einen endlichen Wert an. Der Grundzustand scheint antiferromagnetisch zu sein. Außerdem tritt ein Gap im elektronischen Anregungsspektrum auf. Allerdings vernachlässigen wir in der Molekularfeldnäherung die Dynamik des Feldes \mathbf{M} . So gibt es aufgrund des Goldstone-Theorems bei spontan gebrochenen Symmetrien, wie dem Antiferromagnetismus, masselose Goldstone-Bosonen, die in der Molekularfeldtheorie nicht auftauchen.

2.3.3 Das t-J-Modell

Betrachten wir den Fall, daß die Zahl der Elektronen nicht größer als die Zahl der Plätze ist. Für $U \gg t$ ist eine Störungsentwicklung in t/U möglich. Hierbei ist der Hamiltonoperator in nullter Ordnung

$$\mathcal{H}_0 = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \tag{2.22}$$

 \mathcal{H}_0 ist in der Teilchenzahldarstellung des zugrundeliegenden Fockraumes \mathcal{F} diagonal. Wir unterteilen den Fockraum in zwei Unterräume

$$\mathcal{F} = \mathcal{S} \oplus \mathcal{D}, \tag{2.23}$$

wobei \mathcal{S} der Unterraum mit Eigenzuständen zum Energieeigenwert null und \mathcal{D} der dazu senkrechte Raum ist. Für einen Zustand aus \mathcal{S} sind also alle Plätze

höchstens einmal besetzt, wogegen Zustände aus \mathcal{D} mindestens einen doppelt besetzten Platz haben und somit mindestens die Energie U besitzen.

Wir betrachten nun den kinetischen Term

$$\mathcal{H}' = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma} + h.c.)$$
(2.24)

als Störung. Der Hamiltonoperator (2.6) hat bezüglich der Unterteilung (2.23) die Form

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} P_s(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}')P_s & P_s\mathcal{H}'P_d \\ P_d\mathcal{H}'P_s & P_d(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}')P_d \end{pmatrix}, \qquad (2.25)$$

wobei P_s und P_d die Projektoren auf die Unterräume S beziehungsweise D sind. Wir suchen nun einen effektiven Hamiltonoperator auf dem Raum S, der das Spektrum der niederenergetischen Anregungen richtig wiedergibt. Dazu betrachten wir die Resolvente von \mathcal{H}

$$\mathcal{G}(E) = (E - \mathcal{H})^{-1} \tag{2.26}$$

und definieren \mathcal{H}^{eff} auf dem Unterraum \mathcal{S} über die Beziehung

$$P_s \mathcal{G}(E) P_s = (E - \mathcal{H}^{\text{eff}}(E))^{-1}.$$
(2.27)

Mit Hilfe der Identität für Blockmatrizen

$$\begin{bmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} \end{bmatrix}_{11} = (A - BD^{-1}C)^{-1}, \qquad (2.28)$$

erhält man

$$\mathcal{H}^{\text{eff}}(E) = P_s \mathcal{H}' P_s + P_s \mathcal{H}' \left(P_d (E - (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}')) P_d \right)^{-1} \mathcal{H}' P_s.$$
(2.29)

Mit der Näherung

$$\left(P_d(E - (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'))P_d\right)^{-1} \approx -\frac{1}{U} \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$
(2.30)

erhalten wir daraus das t-J-Modell

$$\mathcal{H}^{t-J} = P_s \left(\mathcal{H}' - \frac{1}{U} t^2 \sum_{\langle ij \rangle \langle jk \rangle \sigma \sigma'} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} c^{\dagger}_{j\sigma'} c_{k\sigma'} \right) P_s.$$
(2.31)

Durch Umordnen der Fermioperatoren erhält man mit $J = 4t^2/U$ die in der Literatur übliche Form,

$$\mathcal{H}^{t-J} = P_s \left(-t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + h.c.) + J \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j) + \mathcal{H}^{\mathrm{I}} \right) P_s \quad (2.32)$$

$$\mathcal{H}^{\mathrm{I}} = -\frac{t^2}{2U} \sum_{\langle ij \rangle \langle jk \rangle}^{i \neq k} \left(\sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} n_j) - c_i^{\dagger} \boldsymbol{\tau} c_k \cdot c_j^{\dagger} \boldsymbol{\tau} c_j \right).$$
(2.33)

Der Term \mathcal{H}^{I} beschreibt das Springen von Elektronen auf übernächste Nachbarplätze. In der Literatur wird dieser Term häufig weggelassen, mit der Begründung, daß das Springen um zwei Plätze die antiferromagnetische Ordnung nicht zerstört.

Bei den mit Löchern dotierten HTS-Materialien spielen auch die p-Orbitale der Sauerstoffionen zwischen den Kupferplätzen eine Rolle, da sich hier die durch die Dotierung entstehenden Löcher bevorzugt aufhalten. In einem 3-Band-Hubbard-Modell werden diese Orbitale adäquat berücksichtigt. Unter der Annahme einer starken Coulomb-Abstoßung für zwei Elektronen auf demselben Cu- oder O-Platz wurde von Zhang und Rice [Zha88] das 3-Band-Hubbard-Modell auf das t-J-Modell zurückführen.

Das t-J-Modell stellt gegenüber dem Hubbard-Modell eine wesentliche Vereinfachung dar. Für N Plätze wird die Komplexität des Zustandsraumes von 4^N auf 3^N verringert, da doppelt besetzte Plätze nicht mehr auftreten. Dennoch ist auch das t-J-Modell in zwei Dimensionen bisher noch nicht gelöst.

2.3.4 Das Heisenbergmodell

Für den Fall halber Füllung, d.h. wenn die Anzahl der Elektronen und der Löcher gleich ist, fällt der kinetische Term und der Term \mathcal{H}^{I} in (2.32) weg, da keine Plätze ohne Elektronen mehr vorhanden sind, auf welche die Elektronen springen könnten. Das Modell reduziert sich auf das antiferromagnetische Spin-1/2-Quanten-Heisenberg-Modell mit dem Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}^{\mathrm{H}} = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_{i} \mathbf{S}_{j}.$$
(2.34)

Obwohl der Zustandsraum jetzt nur noch 2^N Dimensionen hat, konnte auch dieses Modell in zwei räumlichen Dimensionen bis heute nicht exakt gelöst werden. Es ist bekannt, daß der Grundzustand ein Singulett ist, und man geht heute davon aus, daß dieser langreichweitige antiferromagnetische Ordnung besitzt. Um das Heisenberg-Modell (2.34) näher zu untersuchen, ist es nützlich spinkohärente Zustände einzuführen

$$|\Omega\rangle_{i} = e^{iS^{z}\phi_{i}}e^{iS^{y}\theta_{i}} |1/2, m = 1/2\rangle_{i}, \qquad (2.35)$$

die durch den Einheitsvektor

$$\Omega = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$$
(2.36)

parametrisiert werden.

Die Zustandssumme des Heisenberg-Modells ist gegeben durch

$$Z = \operatorname{Tr} T_{\tau} \exp\left(-\int_{0}^{\beta} d\tau \mathcal{H}^{H}\right), \qquad (2.37)$$

wobei T_{τ} der Zeitordnungsoperator bezüglich τ ist.

Mit Hilfe der spinkohärenten Zustände kann (2.37) als Pfadintegral über $\Omega_i(\tau)$ geschrieben werden,

$$Z = \int \left(\prod_{i} \mathcal{D}\Omega_{i}(\tau)\right) \exp(-\mathcal{S}[\Omega]), \qquad (2.38)$$

$$\mathcal{S}[\Omega] = -i\frac{1}{2}\sum_{i}\omega[\Omega_{i}] + \int_{0}^{\beta}d\tau \mathcal{H}^{H}[\Omega(\tau)], \qquad (2.39)$$

 mit

$$\omega[\Omega_i] = -\int_0^\beta d\tau \cos\theta_i \partial_\tau \phi_i, \qquad (2.40)$$

$$\mathcal{H}^{H}[\Omega(\tau)] = \frac{J}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \Omega_{i} \cdot \Omega_{j}.$$
(2.41)

Hierbei ist $\omega[\Omega_i]$ die Berryphase. Diese mißt die Fläche, die von $\Omega_i(\tau)$ auf der Oberfläche der Einheitskugel umfahren wird.

Mit Hilfe der Haldane Abbildung [Hal83] wird die langwellige Dynamik des Quanten-Heisenberg-Antiferromagneten für Spin $S \gg 1$ auf das nichtlineare O(3) Sigma-Modell (O(3)-NLSM) abgebildet.

Dabei parametrisiert man

$$\Omega_i = \eta_i \mathbf{n}(x_i) \sqrt{1 - \left|\frac{\mathbf{L}(x_i)}{S}\right|^2} + \frac{\mathbf{L}(x_i)}{S}, \qquad (2.42)$$

wobei $\eta_i = \pm 1$ so gewählt wird, daß nächste Nachbarn unterschiedliche Vorzeichen haben. Die Vektorfelder **L** und **n** erfüllen die Bedingungen

$$|\mathbf{n}(x_i)| = 1 \tag{2.43}$$

$$\mathbf{L}(x_i) \cdot \mathbf{n}(x_i) = 0 \tag{2.44}$$

Wir fordern weiterhin, daß **n** keine Fourierkomponenten größer als Λ besitzt, wobei Λ ein Abschneideparameter für die relevanten Fluktuationen in (2.38) ist. **n** stellt somit ein lokales Néel-Feld dar. Wir nehmen $\Lambda \ll 1/a$ an, wobei *a* die Gitterkonstante ist. (2.38) läßt sich zu einem Pfadintegral über die Felder **L** und **n** umschreiben. Nach Ausintegrieren von **L** ergibt sich das nichtlineare Sigma-Modell

$$Z = \int \mathcal{D}\mathbf{n}\delta(\mathbf{n}^2 - 1) \exp\left(-\frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau \int_\Lambda d^d x \left(\chi_0 |\partial_\tau \mathbf{n}|^2 + \rho_s |\nabla \mathbf{n}|^2\right)\right)$$
(2.45)

wobei die Spinsteifigkeit $\rho_s = JS^2$ und die Spinsuszeptibilität $\chi_0 = 1/(8Ja^2)$ eingeführt wurden. Für die Einzelheiten zu dieser Ableitung verweisen wir auf das Buch von Auerbach [Aue94].

Für den uns interessierenden Fall S = 1/2 gilt die obige Ableitung nicht mehr, da sich kein geeigneter Abschneideparameter $\Lambda < 1/a$ finden läßt, sodaß Fluktuationen mit Wellenvektor größer als Λ nicht mehr nennenswert zur Zustandssumme beitragen. Chakravarty, Halperin und Nelson [Cha89] konnten das O(3)-NLSM aber dennoch erfolgreich zur Beschreibung von La_2CuO_4 benutzen. Die Parameter ρ_s und χ_0 wurden dabei empirisch bestimmt. Diese Parameter können auch durch Reihenentwicklungen [Sin89] und Monte-Carlo Simulationen bestimmt werden. Numerische Rechnungen von Wiese und Ying ergeben [Wie94] $\rho_s = 0.186J$ und $\chi_0 = 0.0667/(Ja^2)$, beide Parameter sind also wesentlich kleiner als aus dem Grenzfall für große S zu erwarten ist.

3 Das SO(5)-Modell

In diesem Kapitel stellen wir das von Shou-Cheng Zhang zur Erklärung der Hochtemperatursupraleitung vorgeschlagene phänomenologische SO(5)-Modell [Zha97] vor. Dieses Modell bildet die Grundlage für die weitere Arbeit. Eine allgemeinere Darstellung findet man zum Beispiel in dem Artikel von Hanke, Eder und Arrigoni [Han98].

3.1 Der Superspin

Die SO(5)-Theorie geht von der Beobachtung aus, daß die Hochtemperatursupraleiter sich im wesentlichen durch die Dotierung von ihren antiferromagnetischen Ausgangsmaterialien unterscheiden. Man nimmt daher an, daß die Effekte Supraleitung und Antiferromagnetismus eine gemeinsame Ursache haben. Zhang sieht diese gemeinsame Ursache in der Singulett Paarbildung der Elektronen, die bei einer Temperatur T_{MF} auftritt. Im t-J-Modell ist der *J*-Term für diese Paarbildung verantwortlich. Bei halber Füllung ist T_{MF} von der Größenordnung 1000K und nimmt mit zunehmender Dotierung auf 0K ab, da zusätzliche Löcher die Elektronenpaarbindung erschweren. T_{MF} wird im Rahmen des SO(5) Modells mit der Pseudogap-Temperatur T^* (vgl. Abbildung 5) identifiziert.

Im Gegensatz zur BCS-Theorie ist das Auftreten von Elektronpaaren aber nicht gleichbedeutend mit dem Einsetzen der Supraleitung. Erst bei einer wesentlich tieferen Temperatur bildet sich langreichweitige Ordnung aus. Beschränken wir uns auf die mit Löchern dotierten HTS-Materialien wie La-Sr-Cu-O, so hängt die Art dieser Ordnung von der Anzahl der Löcher im System ab.

Es ist zweckmäßig, die Anzahl der Löcher über ein chemisches Potential μ zu regulieren. μ ist die durch Addition eines Loches gewonnene Energie. Aus der Thermodynamik folgt, daß zwischen μ und der Anzahl der Löcher im System ein zwar monotoner aber nicht notwendigerweise trivialer Zusammenhang besteht. Wir eichen das chemische Potential so, daß bei halber Füllung $\mu = 0$ ist.

Sind nur wenige Löcher vorhanden, so ordnen sich die kohärent gebundenen Elektronpaare räumlich zu einer kristallartigen Struktur an und es bildet sich antiferromagnetische Ordnung aus. Wird die Anzahl der Löcher erhöht, so wird bei einem gewissen μ_c die antiferromagnetische Phase auch im Grundzustand des Systems zerstört sein, es tritt also selbst bei T = 0 keine antiferromagnetische Ordnung auf. Bei einer weiteren Erhöhung von μ kondensieren die Elektronen-Singuletts stattdessen zu einer Supraflüssigkeit, d.h. man befindet sich in der supraleitenden Phase. μ_c stellt also einen quantenkritischen Punkt dar. Wird die Löcherkonzentration weiter erhöht, so werden die Elektronensinguletts selbst zerstört, d.h. T_{MF} ist auf 0 K abgesunken. Dieses Szenario ist in



Abbildung 7: Phasendiagramm mit quantenkritischem Punkt μ_c . T_N ist die Néeltemperatur, T_P und T_S sind Crossovertemperaturen, unterhalb derer sich der Superspin in der AF oder SC-Ebene befindet [Zha97].

Abbildung 7 dargestellt. Daneben sind auch Szenarien mit mehr als einem μ_c möglich, auf die aber im folgenden nicht näher eingegangen wird.

Der Ordnungsparameter der antiferromagnetischen Phase, ist der Néel Vektor, der als der Erwartungswert des folgenden Vektoroperators definiert ist:

$$\mathbf{N} = \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} c^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma'}.$$
(3.1)

Dabei sind die Operatoren $c_{\mathbf{k},i}^{\dagger}$ und $c_{\mathbf{k},i}$ Elektronen-Erzeugnungs- und Vernichtungsoperatoren zum Impuls **k** und Spin $\sigma \in \{\uparrow,\downarrow\}$, und $\mathbf{Q} = (\pi,\pi)$ ist der antiferromagnetische Ordnungsvektor. Der Néel-Ordnungsparameter hat SO(3)-Symmetrie. Die Generatoren dieser Symmetriegruppe sind die drei Komponenten des Gesamtspins **S**.

Der Ordnungsparameter der supraleitenden Phase ist gegeben durch den Erwartungswert der Operatoren

$$\operatorname{Re}(\Psi) = \Delta^{\dagger} + \Delta, \qquad (3.2)$$

- $\operatorname{Im}(\Psi) = -i(\Delta^{\dagger} \Delta), \qquad (3.3)$
 - (3.4)

mit dem Cooper-Paar Operator

$$\Delta^{\dagger} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}$$
(3.5)

und der d-Wellen Symmetriefunktion

$$g(\mathbf{k}) = \cos k_x - \cos k_y. \tag{3.6}$$

Dieser Ordnungsparameter besitzt die U(1)-Symmetrie. Als Generator dieser Symmetriegruppe dient die Gesamtladung

$$Q = \frac{1}{2} (\# \text{Elektronen} - \# \text{Gitterplätze}). \tag{3.7}$$

Zhangs wesentliche Idee besteht nun darin, diese beiden drei- und zweidimensionalen Ordnungsparameter zu einem fünfdimensionalen Ordnungsparameter, dem "Superspin" ${\bf n}$ zusammenzufassen,

$$n_1 = Re(\Psi) \tag{3.8}$$

$$n_2 = N_x \tag{3.9}$$

$$n_3 = N_y \tag{3.10}$$

$$n_3 = N_y$$
 (3.10)
 $n_4 = N_z$ (3.11)

$$n_5 = Im(\Psi) \tag{3.12}$$

und für diesen Ordnungsparameter eine SO(5)-Symmetrie zu fordern. Die SO(5)-Gruppe hat 10 Generatoren. Von diesen sind 4 die bekannten Generatoren der SO(3) und U(1) Untergruppe. Die restlichen 6 Generatoren sind die von Demler und Zhang [Dem95] gefundenen π -Operatoren,

$$\pi_{\alpha}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^{\dagger} (\tau^{\alpha} \tau^{y})_{\sigma\sigma'} c_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger}, \qquad (3.13)$$

$$\pi_{\alpha} = (\pi_{\alpha}^{\dagger})^{\dagger} \tag{3.14}$$

wobei α die Werte x, y, oder z annimmt.

Die zehn Generatoren $L_{ab} = -L_{ba}$ der Liealgebra zu SO(5) erfüllen die Vertauschungsrelation

$$[L_{ab}, L_{bc}] = i(\delta_{ac}L_{bd} - \delta_{ad}L_{bc} - \delta_{bc}L_{ad}\delta_{bd}L_{ac}).$$
(3.15)

wobei die a, b, c und d von 1 bis 5 laufen.

Wählt man die Generatoren wie folgt,

$$L_{ab} = \begin{bmatrix} 0 & -(\pi_x^{\dagger} + \pi_x) & -(\pi_y^{\dagger} + \pi_y) & -(\pi_z^{\dagger} + \pi_z) & -Q \\ \pi_x^{\dagger} + \pi_x & 0 & S_z & -S_y & i(\pi_x^{\dagger} - \pi_x) \\ \pi_y^{\dagger} + \pi_y & -S_z & 0 & S_x & i(\pi_y^{\dagger} - \pi_y) \\ \pi_z^{\dagger} + \pi_z & S_y & -S_x & 0 & i(\pi_z^{\dagger} - \pi_z) \\ Q & -i(\pi_x^{\dagger} - \pi_x) & -i(\pi_y^{\dagger} - \pi_y) & -i(\pi_z^{\dagger} - \pi_z) & 0 \end{bmatrix}_{ab}_{ab}$$
(3.16)

so wird (3.15) erfüllt.

Die π -Operatoren erzeugen eine Drehung aus der antiferromagnetischen Hyperebene in die supraleitende Hyperebene. Anders als die übrigen Generatoren vertauschen die π -Operatoren nicht mit dem Hamiltonoperator des t-J-Models. Laut Zhang [Zha97] gilt aber die Beziehung

$$[\mathcal{H}^{t-J}, \pi^{\dagger}_{\alpha}] \approx \omega_0 \pi^{\dagger}_{\alpha} \tag{3.17}$$

mit $\omega_0 = J(1-n)/2 - 2\mu$, wobei *n* die Elektronendichte und *J* der aus dem t-J-Modell bekannte Parameter ist. Die π -Operatoren sind hiernach also näherungsweise Eigenoperatoren des t-J-Models. Dies wird auch durch numerische Rechnungen von Demler et al. [Dem97b] untermauert.

Das Entstehen von Supraleitung und Antiferromagnetismus wird mit dem Verhalten des Superspins in Verbindung gebracht. Das Ausbilden von Elektronensinguletts unterhalb der Mean-Field Temperatur T_{MF} bedeutet, daß der Superspin einen von Null verschiedenen Wert annimmt. Dieser Übergang läßt sich durch ein Ginzburg-Landau-Potential

$$F = a|\mathbf{n}|^2 + b|\mathbf{n}|^4 \tag{3.18}$$

beschreiben, wobei a bei T_{MF} das Vorzeichen wechselt. Im folgenden berücksichtigen wir nur die Richtung nicht aber den Betrag des Superspins und setzen daher

$$|\mathbf{n}| = 1. \tag{3.19}$$

Dadurch wird allerdings das Abfallen von T^{MF} bei zunehmender Dotierung nicht berücksichtigt, was sich als problematisch herausstellt.

Die Richtung des Superspins ist bei Temperaturen wenig unterhalb von T_{MF} noch nicht festgelegt. Das System besitzt also noch die volle SO(5)-Symmetrie, und damit keine Ordnung.

Bei weiterem Abkühlen wird das System supraleitend oder antiferromagnetisch. In der Sprache des Superspin bedeutet ein Übergang zur supraleitenden Phase, daß der Superspin einen festen Wert in der (n_1, n_5) -Hyperebene annimmt. Analog bedeutet ein Übergang zur antiferromagnetischen Phase, daß der Superspin einen festen Wert in der (n_2, n_3, n_4) -Hyperebene annimmt. Dadurch werden die Temperaturen T_c und T_N in Abbildung 7 definiert. Die ebenfalls in Abbildung 7 eingezeichneten T_P und T_S sind die Temperaturen, ab denen sich der Superspin zwar in der antiferromagnetischen bzw. supraleitenden Ebene befindet, jedoch in dieser noch keinen festen Wert angenommen hat.

Die bei der Symmetriebrechung bevorzugte Ebene muß vom chemischen Potential abhängen, damit der experimentell beobachtete Einfluß der Dotierung richtig berücksichtigt werden kann.

3.2 Beschreibung durch das nichtlineare Sigma-Modell

Zur quantitativen Beschreibung der bisherigen Überlegungen wurde von Zhang das anisotrope quanten nichtlineare Sigma-Modell mit fünfdimensionalem Spinraum (SO(5)-NLSM) vorgeschlagen. Auf diesem Modell basieren alle weiteren quantitativen Betrachtungen dieser Arbeit.

Experimentell beobachtet man, daß mit zunehmender Dotierung ein Übergang vom Antiferromagneten zum Supraleiter stattfindet. Durch die Dotierung wird die Anzahl der Löcher (bei p-artigen Supraleitern) im System erhöht.

Um dieses Verhalten in unserem Modell zu reproduzieren, müssen im niederenergetischen Hamiltonoperator anisotrope Terme auftauchen, welche die bei hohen Temperaturen vorhandene SO(5)-Symmetrie brechen. Weiterhin müssen diese Terme von der Dotierung, beziehungsweise in der großkanonischen Formulierung vom chemischen Potential μ abhängen. Da die undotierten ($\mu = 0$) Basismaterialien Antiferromagnete sind, müssen die anisotropen Terme so gewählt werden, daß bei $\mu = 0$ die antiferromagnetische Hyperebene bevorzugt wird.

Das von Zhang eingeführte nichtlineare Sigma-Modell geht von folgender Hamiltondichte $(t = i\tau)$ aus:

$$\mathcal{H}^{a} = \sum_{a < b} \frac{\chi_{ab}}{2} \omega_{ab}(x)^{2} + \sum_{a < b} \frac{\rho_{ab}}{2} [v_{ab}^{k}(x)]^{2} + V(n), \qquad (3.20)$$

 mit

$$v_{ab}^{k} = n_a \partial_k n_b - n_b \partial_k n_a, \qquad (3.21)$$

$$\omega_{ab} = n_a (\partial_\tau n_b - iB_{bc} n_c) - n_b (\partial_\tau n_a - iB_{ac} n_c). \tag{3.22}$$

Hierbei sind die B_{ab} äußere Potentiale, die an die einzelnen Spinkomponenten ankoppeln. In unserem Fall ist der einzige von Null verschiedene Eintrag $B_{15} = -B_{51} = 2\mu$. Dadurch wird die Kopplung des chemischen Potentials an die Ladung beschrieben.

Außerdem tritt in (3.20) der Potentialterm

$$V(n) = -\frac{g}{2}(n_2^2 + n_3^2 + n_4^2)$$
(3.23)

auf, wobei g eine Kopplungskonstante ist, die die Stärke der Anisotropie reguliert. Damit bei $\mu = 0$ die antiferromagnetische Hyperebene bevorzugt wird, setzt man g > 0. Dadurch erreicht man, daß bei halber Füllung das System antiferromagnetisch ist.

Die Konstanten χ_{ab} und ρ_{ab} hängen auf folgende Weise mit der Spinsuszeptiblilität χ_s , der Ladungskompressibilität χ_c , der Spinsteifigkeit ρ_s und der Ladungssteifigkeit ρ_c zusammen:

$$\chi_c = \chi_{15} \qquad \qquad \rho_c = \rho_{15} \qquad (3.24)$$

$$\chi_s = \chi_{23} = \chi_{24} = \chi_{34} \qquad \rho_s = \rho_{23} = \rho_{24} = \rho_{34}.$$
 (3.25)

Zusätzlich werden nun noch eine " π -Suszeptibilität" und eine " π -Steifigkeit" definiert,

$$\chi_{\pi} = \chi_{12} = \chi_{13} = \chi_{14} \tag{3.26}$$

$$\rho_{\pi} = \rho_{12} = \rho_{13} = \rho_{14}, \qquad (3.27)$$

die das dynamische Verhalten des Systems bei Drehungen aus der supraleitenden Ebene in die antiferromagnetische Ebene beschreiben.

Durch Ausmultiplizieren der Ankopplung des chemischen Potentials erhalten wir aus (3.20)

$$\mathcal{H}^{a} = \sum_{a < b} \frac{\chi_{ab}}{2} \tilde{\omega}_{ab}(x)^{2} + \sum_{a < b} \frac{\rho_{ab}}{2} [v_{ab}^{k}(x)]^{2} + V_{eff}(n), \qquad (3.28)$$

 mit

$$\tilde{\omega}_{ab} = n_a \partial_\tau n_b - n_b \partial_\tau n_a, \qquad (3.29)$$

$$V_{\text{eff}}(n) = -\frac{g}{2} (n_2^2 + n_3^2 + n_4^2) - \frac{(2\mu)^2}{2} (n_1^2 + n_5^2) [\chi_c (n_1^2 + n_5^2) + \chi_\pi (n_2^2 + n_3^2 + n_4^2)]. \qquad (3.30)$$

Die großkanonische Zustandssumme hat also die Form

$$Z = \int [dn_a]\delta(\mathbf{n}^2 - 1) \exp(-\int_0^\beta d\tau \int d^d x \mathcal{H}^{\mathbf{a}}).$$
(3.31)

Dieses Modell stellt eine anisotrope Verallgemeinerung des ausgiebig untersuchten O(N)-NLSM dar. In diesem allgemeinen Fall wird eine Anisotropie in den Materialkonstanten χ_{ab} und ρ_{ab} und im effektiven Potential V_{eff} angenommen. Zur Vereinfachung werden wir uns im folgenden auf den Fall beschränken, daß keine Anisotropie in den Suszeptibilitäten und Steifigkeiten auftritt:

$$\chi = \chi_c = \chi_s = \chi_\pi, \tag{3.32}$$

$$\rho = \rho_c = \rho_s = \rho_\pi. \tag{3.33}$$

Dadurch vereinfacht sich V_{eff} zu

$$V_{\rm eff} = \frac{g_{\rm eff}}{2} (n_1^2 + n_5^2), \qquad (3.34)$$

 mit

$$g_{\rm eff} = g - (2\mu)^2 \chi,$$
 (3.35)

und \mathcal{H}^{a} wird zu

$$\mathcal{H} = \frac{\chi}{2} \sum_{b} (\partial_{\tau} \mathbf{n})^2 + \frac{\rho}{2} \sum_{b} (\nabla \mathbf{n})^2 + V_{\text{eff}}.$$
(3.36)

Durch diese Vereinfachungen erreicht man ein Phasendiagramm wie in Abbildung 7 mit einem quantenkritischen Punkt μ_c . Im allgemeinen sind zwei quantenkritische Punkte mit entsprechend komplexeren Phasendiagrammen möglich, die hier aber nicht weiter betrachtet werden.

3.3 Momentaner Stand der SO(5)-Theorie

Seit die SO(5)-Theorie im Januar 1997 von Zhang vorgeschlagen wurde, wird sie unter Physikern der kondensierten Materie kontrovers diskutiert [Dem97b, Bas97, Gre97, And97, Lau97]. Eine abschließende Beurteilung ist somit noch nicht möglich, sondern Gegenstand der aktuellen Forschung.

Für die Theorie spricht, daß sie wichtige Eigenschaften des relativ komplizierten Phasendiagramms der Kuprate qualitativ erklären kann, insbesondere das gemeinsame Auftreten von Antiferromagnetismus und Supraleitung. Weiterhin bietet die SO(5)-Theorie eine Erklärung für die experimentell beobachteten "41 meV-Moden" [Moo93]. Dabei handelt es sich um einen im magnetischen Spektrum von $YBa_2Cu_3O_7$ bei einem reziproken Gittervektor (π, π) und Energie um 41 meV auftreten Peak, der in Neutronenstreuexperimenten beobachtet wird. Diese Mode wird in der Arbeit von Demler und Zhang [Dem95] als Eigenmode zu den approximativen Eigenoperatoren π^{\dagger}_{α} des Hamiltonoperators (vgl. (3.17)) interpretiert.

Kritisiert wird vor allem die fehlende mikroskopische Rechtfertigung der Theorie. Bisher konnte das SO(5)-Modell nicht analytisch aus einer allgemein akzeptierten mikroskopischen Beschreibung, wie etwa dem Hubbard- oder dem t-J-Modell abgeleitet werden. Numerische Rechnungen von Meixner et al. [Mei97] deuten aber darauf hin, daß das Hubbard-Modell eine approximative SO(5)-Symmetrie aufweist. Dabei wurde mit exakter Diagonalisierung die Gültigkeit von (3.17) getestet. Die Interpretation dieser Ergebnisse ist aber noch umstritten [Gre97].

Baskaran und Anderson [Bas97] haben auch darauf hingewiesen, daß im SO(5)Modell Kopplungen an die übernächsten Nachbarn nicht berücksichtigt werden, obwohl diese von derselben Größenordnung sind wie die Kopplungen an die nächsten Nachbarn. Da die Kopplungen an die übernächsten Nachbarn nicht mit den π -Operatoren kommutieren, wird die SO(5)-Symmetrie dadurch zumindest abgeschwächt, eventuell sogar ganz aufgehoben. Dieser Punkt ist noch ungeklärt und bedarf einer weiteren Untersuchung.

Neuere numerische Rechnungen zeigen, daß die SO(5)-Symmetrie in gekoppelten Spin-Ketten sehr gut verwirklicht ist [Duf98, Ede98]. Es ist aber nicht geklärt, welche Implikationen sich daraus für den zweidimensionalen Fall ergeben.

Ein weiteres Kriterium für die Brauchbarkeit der Theorie ist, ob sich damit experimentelle Eigenschaften der Kuprate beschreiben lassen. So gibt es zum Beispiel Untersuchungen von Demler et al. [Dem97a], die aus der SO(5)-Symmetrie beobachtbare Effekte in Zusammenhang mit dem Josephson-Effekt [Jos62] vorhersagen.

In dieser Arbeit werden die Methoden der Renormierungsgruppe und der 1/N-Entwicklung angewendet, um experimentell beobachtbare Effekte des SO(5)-Modells vorhersagen zu können und so einen Beitrag zur Beurteilung der Theorie su leisten.

4 Die Renormierungsgruppe

4.1 Allgemeines zur Renormierungsgruppe

Die Renormierungsgruppe (RG) wurde in ihrer heutigen Form von Wilson [Wil70] Anfang der siebziger Jahre eingeführt, nachdem schon wichtige Vorarbeiten von Kadanoff [Kad66] geleistet worden waren. Seither hat sich die RG in verschiedenen Bereichen der Physik bewährt und kann inzwischen als Standardwerkzeug betrachtet werden. Insbesondere die Anwendung der RG auf die Theorie der kritischen Phänomene war außerordentlich erfolgreich.

Die Idee der RG besteht darin, daß ausgehend von der mikroskopischen Beschreibung eines System durch schrittweises Ausintegrieren der kurzwelligen Freiheitsgrade effektive Hamiltonoperatoren auf größeren Längenskalen konstruiert werden. Diese Hamiltonoperatoren und damit die Systemparameter sollen stetig von der Skala abhängen.

4.2 Das anisotrope quanten nichtlineare Sigma-Model

4.2.1 Verallgemeinerung des SO(5)-Modells

Das SO(5)-Modell läßt sich, wie in Kapitel 2 gezeigt, in seiner einfachsten Form auf ein anisotropes quanten NLSM (3.31) bringen:

$$Z = \int \mathcal{D}n_a \delta(\mathbf{n}^2 - 1) \exp(-\int_0^\beta d\tau \int d^d x \mathcal{H}), \qquad (4.1)$$

mit der Hamiltondichte (3.36)

$$\mathcal{H} = \frac{\chi}{2} \sum_{b=1...5} (\partial_{\tau} n_b)^2 + \frac{\rho}{2} \sum_{b=1...5} (\nabla n_b)^2 + \frac{g_{\text{eff}}}{2} (n_1^2 + n_5^2).$$
(4.2)

Das Ziel ist es nun für dieses Modell die RG-Gleichungen aufzustellen und zu lösen.

Die folgende Herleitung der RG-Gleichungen folgt in großen Teilen den Arbeiten von Nelson und Pelkovits [Nel77] sowie Chakravarty, Halperin und Nelson [Cha89].

Für die Rechnung betrachten wir das allgemeine quanten NLSM in d Dimensionen und N Spinkomponenten, von denen K eine Anisotropie besitzen:

$$Z = \int \mathcal{D}n_a \prod_{\tau,x} \delta(\mathbf{n}^2 - 1) \exp(-\mathcal{S}_{\text{eff}})$$
(4.3)

 mit

$$\mathcal{S}_{\text{eff}} = \int_0^\beta d\tau \int_{\Lambda^{-1}} d^d x \left(\frac{\chi}{2} (\partial_\tau \mathbf{n})^2 + \frac{\rho}{2} (\nabla \mathbf{n})^2 + \tilde{g}(\sum_{i=1}^K n_i^2) \right), \tag{4.4}$$

wobei **n** ein N-komponentiges Feld darstellt, und $\tilde{g} \ge 0$ ist. Aus dem allgemeinen anisotropen NLSM erhalten wir das SO(5)-Modell durch folgende Parameterwahl zurück:

$$\tilde{g} = g_{\text{eff}}, \quad K = 2, \quad N = 5, \quad d = 2 \quad \text{für } g_{\text{eff}} \ge 0,
\tilde{g} = -g_{\text{eff}}, \quad K = 3, \quad N = 5, \quad d = 2 \quad \text{für } g_{\text{eff}} < 0.$$
(4.5)

Dabei wurde benutzt, daß wegen $|\mathbf{n}| = 1$

$$g_{\rm eff}(n_1^2 + n_5^2) = -g_{\rm eff}(n_2^2 + n_3^2 + n_4^2) + g_{\rm eff}$$
(4.6)

gilt, und der konstante Term g_{eff} nicht zur Dynamik beiträgt.

4.2.2 Einführen von dimensionslosen Variablen

Das Integral über die räumliche Dimension enthält einen Ultraviolett-Cutoff, der durch den Abschneideparameter Λ kontrolliert wird. Dadurch werden bei der Integration Fluktuationen mit einem Wellenvektor größer als Λ nicht berücksichtigt. Da die SO(5)-Theorie der Kontinuumslimes einer diskreten Theorie auf einem Gitter ist, ist der Abschneideparameter durch die inverse Gitterlänge des Systems bestimmt. Durch die Substitution $x' = \Lambda x$ erreicht man, daß die Raumintegration bei eins abgeschnitten wird. Außerdem ist es nützlich S_{eff} in den folgenden Variablen zu schreiben:

$$x_0 = \Lambda \sqrt{\frac{\rho}{\chi}} \tau, \qquad (4.7)$$

$$u = \Lambda \sqrt{\frac{\rho}{\chi}} \beta, \qquad (4.8)$$

$$c = \frac{\Lambda^{2-d}}{\rho}, \tag{4.9}$$

$$g_0 = \frac{2g}{\Lambda^2 \rho}. \tag{4.10}$$

Somit wird \mathcal{S}_{eff} zu

$$S_{\text{eff}} = \frac{1}{2c} \int_0^u dx_0 \int d^d x' \left((\partial_0 \mathbf{n})^2 + (\nabla \mathbf{n})^2 + g_0 (\sum_{i=1}^K n_i^2) \right).$$
(4.11)

Durch den g_0 -Term in (4.11) wird der N-dimensionale Spinraum in zwei Hyperebenen mit (N - K) und K Dimensionen unterteilt. Ebenso wird die ursprünglich vorhandene SO(N) Symmetrie zu einer $SO(N - K) \times SO(K)$ Symmetrie gebrochen. Bei positivem g_0 wird sich $\mathbf{n}(x)$ vorzugsweise in der (N - K)-Hyperebene aufhalten, d.h. es ist

$$\langle n_a^2 \rangle < \langle n_b^2 \rangle$$
 für $1 \le a \le K, K+1 \le b \le N$ (4.12)

4.2.3 Entwicklung um Vorzugsrichtung

Der Grundzustand hat somit eine SO(N - K)-Symmetrie. Um eine Entwicklung um eine Vorzugsrichtung durchzuführen, brechen wir diese noch vorhandene Symmetrie durch Einführen eines externen Magnetfeldes H, das an eine Spinkomponente in der (N - K)-Ebene ankoppelt:

$$\mathcal{S}_{\text{eff}} \rightarrow \mathcal{S}_{\text{eff}} + \mathcal{S}_H$$
 (4.13)

$$S_{H} = -H \int_{0}^{\beta} d\tau \int_{\Lambda^{-1}} d^{d}x \ n_{N}(x,\tau) = -\frac{h}{c} \int_{0}^{u} dx_{0} \int d^{d}x' \ n_{N} \quad (4.14)$$

 mit

$$h = \sqrt{\frac{\chi}{\rho}} \Lambda^{-(1+d)} c H.$$
(4.15)

Dadurch erreicht man, daß $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ sich vorzugsweise in Richtung der N-ten Komponenten ausrichtet. Da es sich bei H um ein externes physikalisches Feld handelt, bleibt es unter der RG invariant. Das Feld H wird lediglich zur Vereinfachung der Rechnung eingeführt. Am Ende der Rechnung betrachten wir nur die Ergebnisse im Limes $H \to 0$.

Alternativ zur Einführung eines Magnetfeldes, wird in der Literatur auch häufig eine ortsabhängige Vorzugsrichtung für langwellige Fluktuationen verwendet [Aue94, Pol75]. In der Arbeit von Nelson und Pelcovits [Nel77] wird gezeigt, daß beide Ansätze für das isotrope NLSM die gleichen Ergebnisse liefern. In den neuen Variablen

$$\boldsymbol{\pi} = (n_1, \dots, n_{N-1}) \quad \boldsymbol{\sigma} = n_N \tag{4.16}$$

erhält man (die Striche an den x werden weggelassen)

$$S_{\text{eff}} = \frac{1}{2c} \int_0^u dx_0 \int d^d x \left((\partial_\mu \pi)^2 + \frac{(\pi \cdot \partial_\mu \pi)^2}{1 - \pi^2} + g_0 \left(\sum_{i=1}^K \pi_i^2 \right) - 2h\sqrt{1 - \pi^2} \right)$$
(4.17)

und

$$Z = \int \mathcal{D}\boldsymbol{\pi} \mathcal{D}\sigma \prod_{x_0, x} \delta(\boldsymbol{\pi}^2 + \sigma^2 - 1) \exp(-\mathcal{S}_{\text{eff}}[\boldsymbol{\pi}, \sigma])$$
(4.18)

$$= \int \mathcal{D}\boldsymbol{\pi} \prod_{x_0, x} \frac{1}{\sqrt{1 - \pi^2}} \exp\left(-\mathcal{S}_{\text{eff}}[\boldsymbol{\pi}, \sqrt{1 - \pi^2}]\right)$$
(4.19)

$$= \int \mathcal{D}\boldsymbol{\pi} \exp\left(-\mathcal{S}_{\text{eff}} - \frac{\rho}{2} \int_0^u dx_0 \int d^d x \ln(1 - \boldsymbol{\pi}^2)\right)$$
(4.20)

$$= \int \mathcal{D}\boldsymbol{\pi} \exp(-\mathcal{S}_{\text{eff}}'), \qquad (4.21)$$

wobei über σ integriert wurde. μ läuft von $0 \dots d$. Das ρ bezeichnet die "Dichte" der Freiheitsgrade pro Raum-Zeit-Volumen. Die letzte Gleichung definiert eine neue effektive Wirkung S'_{eff} .

Als nächstes wird $\mathcal{S}_{\rm eff}'$ bis zur 4. Ordnung in π entwickelt und zur Fourierdarstellung übergegangen,

$$\boldsymbol{\pi}(x_0, \mathbf{x}) = \sum_{\omega_n} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \boldsymbol{\pi}(\omega_n, \mathbf{k}) e^{i(\omega_n x_0 + \mathbf{k}\mathbf{x})}.$$
(4.22)

Hierbei wurden die Matsubarafrequenzen $\omega_n = 2\pi n/u$, $(n = 0, \pm 1, \pm 2, ...)$ eingeführt. Die Summe über ω_n läuft von $n = -\infty ...\infty$. Die effektive Wirkung $\mathcal{S}'_{\text{eff}}$ läßt sich schreiben als (mit der Abkürzung $\mathbf{q}_i = (\omega_{n_i}, \mathbf{k}_i)$)

$$S_{\text{eff}}' = \frac{u}{2c} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \sum_{a=1}^{N-1} (\omega_n^2 + \mathbf{k}^2 + g_0 \sum_{i=1}^K \delta^{ia} + h) \pi_a(\mathbf{q}) \pi_a(-\mathbf{q}) \\ + \frac{u}{2c} \sum_{n_1, \dots, n_4} \int \frac{d^d k_1 \dots d^d k_4}{(2\pi)^{4d}} (-\omega_{n_2} \omega_{n_4} - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{k}_4 + \frac{1}{4}h) \\ \times \pi_a(\mathbf{q}_1) \pi_a(\mathbf{q}_2) \pi_b(\mathbf{q}_3) \pi_b(\mathbf{q}_4) (2\pi)^d \delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_4) \\ - \frac{\rho u}{2} \sum_n \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \pi_a(\mathbf{q}) \pi_a(-\mathbf{q}) \\ - \frac{\rho u}{4} \sum_{n_1, \dots, n_4} \int \frac{d^d k_1 \dots d^d k_4}{(2\pi)^{4d}} \pi_a(\mathbf{q}_1) \pi_a(\mathbf{q}_2) \pi_b(\mathbf{q}_3) \pi_b(\mathbf{q}_4) (2\pi)^d \delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_4).$$

(4.23)

Aus dem ersten Term in (4.23) folgt für den Propagator der π -Felder

$$\langle \pi_a(\mathbf{q})\pi_b(-\mathbf{q})\rangle = \frac{c}{u}\frac{1}{\omega_n^2 + \mathbf{k}^2 + g_0\sum_{i=1}^K \delta^{ia} + h}.$$
(4.24)

Außerdem erkennt man aus (4.23), daß noch die folgenden Vertizes existieren:



Hierbei bedeuten durchgezogene Linien, Felder mit gleichem Index. Linien mit einem Querstrich deuten auf einen Beitrag proportional zu $\mathbf{q} = (\omega_n, \mathbf{k})$ hin.

4.2.4 Das Abschälverfahren

Um nun die Renormierung durchzuführen, wenden wir das Abschälverfahren an, das von Hertz zum ersten mal auf quantenkritische Phänomene angewendet wurde [Her77]. Dazu werden die Impulse wie folgt in zwei Klassen eingeteilt: (der Impuls-Cutoff in (4.23) war auf eins normiert)

$$0 \le \mathbf{k}_{<} \le e^{-l},\tag{4.25}$$

$$e^{-l} \le \mathbf{k}_{>} \le 1. \tag{4.26}$$

Die Feynmangraphen, die Impulse $\mathbf{k}_{>}$ enthalten, werden ausintegriert und ihre Beiträge durch veränderte Kopplungskonstanten der neuen effektiven Wirkung, die nun für Impulse $\mathbf{k}_{<}$ gilt, ausgedrückt. Dabei beschränken wir uns auf Beiträge von Diagrammen mit nur einem inneren Impuls (Ein-Loop-Ordnung). Die Beiträge zum Propagator in dieser Ordnung sind in Abbildung 8 dargestellt.

Die Renormierbarkeit des Modells beweisen wir hier nicht allgemein, sondern verweisen auf Amit [Ami84], Appendix 6-1. Allerdings sieht man bei der im folgenden durchgeführten Rechnung die Renormierbarkeit bis zur ersten Ordnung explizit.



Abbildung 8: Graphen, die zur Renormierung des Propagators beitragen

4.2.5 Renormierung des Propagators

Zunächst betrachten wir die Renormierung des ersten Terms in (4.23), der sich wie folgt aufteilt:

$$\mathcal{S}^{(1)} = \frac{u}{2c} \sum_{\omega_n} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \left(\sum_{a=1}^{N-1} (\omega_n^2 + \mathbf{k}^2) \pi_a(\mathbf{q}) \pi_a(-\mathbf{q}) \right)$$
(4.27)

+
$$\sum_{a=1}^{K} (g_0 + h) \pi_a(\mathbf{q}) \pi_a(-\mathbf{q}) + \sum_{a=K+1}^{N-1} h \pi_a(\mathbf{q}) \pi_a(-\mathbf{q}) \bigg).$$
 (4.28)

Die Beiträge der Renormierung zu (4.27) können entweder proportional zu $\omega_n^2 + \mathbf{k}^2$ oder unabhängig von ω_n und \mathbf{k} sein. Das einzige Ein-Loop-Diagramm, das einen Beitrag proportional zu $\omega_n^2 + \mathbf{k}^2$ liefert, ist das Diagramm in Abbildung 8 (a). Durch Ausintegrieren der inneren Impulse $\mathbf{k}_>$ erhält man, bei festgehaltenem äußerem Impuls, den Beitrag:

$$\sum_{\omega_{n'}} \int_{\mathbf{k}_{>}} \frac{d^{d}k'}{(2\pi)^{d}} \frac{u}{2c} (\omega_{n}^{2} + \mathbf{k}^{2}) \pi_{a}(\omega_{n}, \mathbf{k}) \pi_{a}(-\omega_{n}, -\mathbf{k}) \langle \pi_{a}(\omega_{n'}, \mathbf{k'}) \pi_{a}(-\omega_{n'}, -\mathbf{k'}) \rangle$$
$$= \frac{1}{2} (\omega_{n}^{2} + \mathbf{k}^{2}) \pi_{a}(\mathbf{q}) \pi_{a}(-\mathbf{q}) I_{a}^{\text{loop}}, \quad (4.29)$$

wobei die Abkürzung $I_a^{\rm loop}$ für den folgenden Ausdruck steht:

$$I_{a}^{\text{loop}} = \sum_{\omega_{n}'} \int_{\mathbf{k}_{>}} \frac{d^{d}k'}{(2\pi)^{d}} \frac{1}{\mathbf{k}'^{2} + {\omega_{n}'}^{2} + h + g_{0} \sum_{i=1}^{K} \delta^{ia}}.$$
 (4.30)

Das Ziel ist es nun die effektive Wirkung für die niedrigen Impulse in renormierten Variablen so zu schreiben, daß man wieder die Form in (4.23) erhält.
Umschreiben auf renormierte Größen

Durch Umskalieren von \mathbf{k} erreicht man, daß die Impulsintegrale wieder bei eins abgeschnitten werden:

$$\mathbf{k}' = e^l \mathbf{k} \tag{4.31}$$

Hier und im folgenden werden renormierte Größen durch Striche kenntlich gemacht. Um die "lorentzinvariante" Form des Faktors ($\omega_n^2 + \mathbf{k}^2$) in (4.23) beizubehalten, müssen auch ω_n und u entsprechend umskaliert werden:

$$\omega_n' = e^l \omega_n = e^l \frac{2\pi n}{u} \tag{4.32}$$

$$u' = e^{-l}u \tag{4.33}$$

Zudem werden auch die Felder π_a umskaliert. Durch die vorhandene Anisotropie gibt es im allgemeinen zwei verschiedene Skalierungsfaktoren, $\zeta_{\pi_{a\leq K}}$ und $\zeta_{\pi_{a>K}}$, die wie folgt definiert sind:

$$\zeta_{\pi_{a\leq K}}\pi'_{a\leq K} = \pi_{a\leq K} \tag{4.34}$$

$$\zeta_{\pi_{a>K}}\pi'_{a>K} = \pi_{a>K} \tag{4.35}$$

Durch den Beitrag von (4.29) zum ersten Term in (4.27) und die beschriebenen Umskalierungen ergeben sich für die renormierte Kopplungskonstante $(\frac{u}{c})'$ die beiden Gleichungen

$$\left(\frac{u}{c}\right)' = \zeta_{\pi_{a \le K}}^2 e^{-(d+2)l} \left(\frac{u}{c} + I_{a \le K}^{\text{loop}}\right), \tag{4.36}$$

$$\left(\frac{u}{c}\right)' = \zeta_{\pi_{a>K}}^2 e^{-(d+2)l} \left(\frac{u}{c} + I_{a>K}^{\text{loop}}\right), \tag{4.37}$$

die einen Zusammenhang zwischen $\zeta_{\pi_{a\leq K}}$ und $\zeta_{\pi_{a>K}}$ herstellen. Mit Hilfe der Euler-Formel [Eul48]

$$\sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{1}{x^2 + \nu^2} = \frac{\pi}{x} \coth(\pi x), \tag{4.38}$$

läßt sich die Summation in (4.30) ausführen. In der ersten Ordnung in l erhält man:

$$I_{a \le K}^{\text{loop}} = \frac{1}{\pi^{\frac{d}{2}} 2^d \Gamma(\frac{d}{2})} \frac{lu}{\sqrt{1+h+g_0}} \coth(\frac{u}{2}\sqrt{1+h+g_0}), \qquad (4.39)$$

$$I_{a>K}^{\text{loop}} = \frac{1}{\pi^{\frac{d}{2}} 2^d \Gamma(\frac{d}{2})} \frac{lu}{\sqrt{1+h}} \coth(\frac{u}{2}\sqrt{1+h}).$$
(4.40)

Von ω_n und k unabhängige Beiträge

Als nächstes betrachten wir die Beiträge zu (4.27), deren Koeffizienten nicht von ω_n und **k** abhängen. Diese Beiträge stammen von Feynmandiagrammen, die genau zwei äußere Verbindungen ohne Querstrich haben. Die in der Ein-Loop-Ordnung relevanten Diagramme sind in Abbildung 8 (b)-(e) dargestellt. Der Beitrag durch das Diagramm (b) lautet

$$(b) = 2 \sum_{b=1}^{N-1} \sum_{\omega'_n} \int_{\mathbf{k}_{>}} \frac{d^d k'}{(2\pi)^d} \frac{u}{8c} h \frac{c}{u} \frac{1}{\mathbf{k'}^2 + {\omega'_n}^2 + h + g_0 \sum_{i=1}^K \delta^{ib}} \pi_a(\mathbf{q}) \pi_a(-\mathbf{q}) \quad (4.41)$$
$$= \frac{1}{4} h \left(K I_{b \le K}^{\text{loop}} + (N - 1 - K) I_{b > K}^{\text{loop}} \right) \pi_a(\mathbf{q}) \pi_a(-\mathbf{q}). \quad (4.42)$$

Der Faktor 2 in (4.41) ist der Symmetriefaktor des Feynmandiagrammes. Die Summe über b, beschreibt die Tatsache, daß jede Feldkomponente, unabhängig von der Komponente des äußeren Feldes im Loop auftreten kann.

Die Diagramme (c) bis (e) liefern den Beitrag

$$(c) + (d) + (e) = -\frac{1}{2}g_0 \left(\sum_{i=1}^{K} \delta^{ia}\right) I_a^{\text{loop}} \pi_a(\mathbf{q}) \pi_a(-\mathbf{q})\right).$$
(4.43)

Insgesamt ergibt sich somit von den Diagrammen (b) bis (e) der Beitrag

$$R_{a} = (b) + (c) + (d) + (e)$$

= $\left[\left(\frac{1}{4} hK - \frac{1}{2} g_{0} \left(\sum_{i=1}^{K} \delta^{ia} \right) \right) I_{b \leq K}^{\text{loop}} + \frac{1}{4} h(N - 1 - K) I_{b > K}^{\text{loop}} \right] \pi_{a}(\mathbf{q}) \pi_{a}(-\mathbf{q}).$ (4.44)

Man bemerkt, daß R_a für h = 0 und $g_0 = 0$ verschwindet. Die Theorie ist in dieser Ordnung also konsistent renormierbar, ohne daß neue Terme in der renormierten Wirkung auftreten. Alle durch das Abschälen der hohen Impulse ausintegrierten Beiträge zur Wirkung können durch Anpassen (Renormieren) der Parameter absorbiert werden.

Um zu bestimmen, wie die Parameter des Systems renormiert werden, wird der Beitrag R_a zu (4.27) hinzuaddiert. Dabei müssen wegen der Anisotropie die Feldkomponenten $\pi_{a \leq K}$ und $\pi_{a > K}$ getrennt betrachtet werden. Nach der Umskalierung der Felder und Impulse durch (4.31-4.35) erhält man die folgenden

renormierten Koeffizienten der Feldkomponenten:

$$\left(\frac{(h+g_{0})u}{c}\right)' = \zeta_{\pi_{a\leq K}}^{2} e^{-ld} \\
\times \left(\frac{(h+g_{0})u}{c} + 2\left(\left(\frac{1}{4}hK - \frac{1}{2}g_{0}\right)I_{b\leq K}^{loop}\right) + \frac{1}{4}h(N-1-K)I_{b>K}^{loop}\right)\right) \\
\left(\frac{hu}{c}\right)' = \zeta_{\pi_{a>K}}^{2} e^{-ld} \\
\times \left(\frac{hu}{c} + 2\frac{1}{4}h(KI_{b\leq K}^{loop} + (N-1-K)I_{b>K}^{loop})\right).$$
(4.45)
(4.46)

An dieser Stelle ist es nützlich, die neue Variable t einzuführen,

$$t = \frac{c}{u} = \frac{\Lambda^{1-d}\chi^{\frac{1}{2}}}{\rho^{\frac{3}{2}}\beta}.$$
 (4.47)

Die Gleichungen (4.45) und (4.46) enthalten noch die unbekannten Faktoren $\zeta_{\pi_{a < K}}$ und $\zeta_{\pi_{a > K}}$. Da $\frac{h}{t}$ ein physikalisches Magnetfeld darstellt, gilt

$$\left(\frac{h}{t}\right)' = \left(\frac{hu}{c}\right)' = \zeta_{\pi_{a>K}} \frac{h}{t}.$$
(4.48)

Zusammen mit (4.46) folgt

$$\zeta_{\pi_{a>K}} = e^{ld} \left(1 - \frac{t}{2} \left(K I_{b\leq K}^{\text{loop}} + (N - 1 - K) I_{b>K}^{\text{loop}} \right) \right).$$
(4.49)

Diese einfache Ableitung von $\zeta_{\pi_{a>K}}$ ist der eigentliche Grund für die Einführung des Magnetfeldes *h*. Ansonsten müßte $\zeta_{\pi_{a>K}}$ aus der Renormierung der Vertizes gewonnen werden, was wesentlich aufwendiger ist, aber zu gleichen Ergebnissen führt [Nel77].

 $\zeta_{\pi_{a < K}}$ erhält man durch Gleichsetzen von (4.36) und (4.37):

$$\zeta_{\pi_{a \leq K}} = e^{ld} \left(1 - \frac{t}{2} \left((K+1) I_{b \leq K}^{\text{loop}} + (N-2-K) I_{b > K}^{\text{loop}} \right) \right).$$
(4.50)

Somit ergibt sich für das renormierte t' in erster Ordnung in l:

$$t' = e^{-(d-2)l} t \left(1 + t (K I_{b \le K}^{\text{loop}} + (N - 2 - K) I_{b > K}^{\text{loop}}) \right)$$
(4.51)

$$= t \left(1 - (d-2)l + (KF_{<} + (N-K-2)F_{>})l \right), \qquad (4.52)$$

wobei folgende Abkürzungen eingeführt wurden:

$$F_{<} = \frac{t}{l} I_{b \le K}^{\text{loop}} = \frac{1}{\pi^{\frac{d}{2}} 2^{d} \Gamma(\frac{d}{2})} \frac{c}{\sqrt{1+h+g_{0}}} \coth(\frac{c}{2t}\sqrt{1+h+g_{0}}), \qquad (4.53)$$

$$F_{>} = \frac{t}{l} I_{b>K}^{\text{loop}} = \frac{1}{\pi^{\frac{d}{2}} 2^d \Gamma(\frac{d}{2})} \frac{c}{\sqrt{1+h}} \coth(\frac{c}{2t}\sqrt{1+h}).$$
(4.54)

4.2.6 Die expliziten RG-Gleichungen

Aus (4.52) erhält man folgende Differentialgleichung für t(l):

$$\frac{dt}{dl} = -(d-2)t + t(KF_{<} + (N-2-K)F_{>}).$$
(4.55)

Auf ähnliche Weise findet man aus (4.45) und (4.46) Differentialgleichungen für g_0 , h und c:

$$\frac{dg_0}{dl} = 2g_0 - \left((2g_0 + h)f_{<} - hF_{>}\right),\tag{4.56}$$

$$\frac{dh}{dl} = 2h + \frac{h}{2} \left(KF_{<} + (N - 3 - K)F_{>} \right), \tag{4.57}$$

$$\frac{dc}{dl} = -(d-1)c + c\left(KF_{<} + (N-2-K)F_{>}\right).$$
(4.58)

Die Gleichungen (4.55) bis (4.58) stellen das Hauptergebnis dieses Kapitels dar. Im klassischen Grenzfall $t \gg c\sqrt{1+g_0}$ und für h = 0 vereinfachen sich $F_{<}$ und $F_{>}$ zu

$$F_{<} = \frac{1}{\pi^{\frac{d}{2}} 2^{d} \Gamma(\frac{d}{2})} \frac{2t}{1+g_{0}},$$
(4.59)

$$F_{>} = \frac{1}{\pi^{\frac{d}{2}} 2^{d} \Gamma(\frac{d}{2})} 2t.$$
(4.60)

Setzt man noch $d = 2 + \epsilon$ und K = 1, so ergeben sich aus (4.55) und (4.56)

$$\frac{dt}{dl} = -\epsilon t + \frac{1}{2\pi} \left(t^2 \frac{(N-3)(1+g)+1}{1+g} \right), \tag{4.61}$$

$$\frac{dg}{dl} = 2g - \frac{1}{\pi} \frac{tg}{1+g},$$
(4.62)

was mit den Ergebnissen von Nelson und Pelcovits [Nel
77] für den Fall einer Anisotropierichtung im klassischen NLSM übere
instimmt. Für $g_0 = 0$ vereinfa-

chen sich (4.55), (4.57) und (4.58) zu

$$\frac{dt}{dl} = -(d-2)t + t(N-2)F_{>}, \qquad (4.63)$$

$$\frac{dh}{dl} = 2h + \frac{h}{2}(N-3)F_{>}, \qquad (4.64)$$

$$\frac{dc}{dl} = -(d-1)c + c(N-2)F_{>}.$$
(4.65)

Dies sind die aus der Arbeit von Chakravarty, Halperin und Nelson [Cha89] bekannten RG-Gleichungen für das isotrope quanten NLSM.

Die in diesem Kapitel gefundenen Gleichungen (4.55) bis (4.58) stellen also eine konsistente Verallgemeinerung von bereits in der Literatur behandelten Spezialfällen dar.

4.3 Auswertung und Diskussion der RG-Gleichungen

Zur Auswertung von (4.55) bis (4.58) setzen wir das aus rechentechnischen Gründen eingeführte Magnetfeld h gleich Null. Damit verschwindet auch konsistenterweise die rechte Seite von (4.57). Die restlichen drei Gleichungen werden nun für das SO(5) Modell spezialisiert. Dazu wählen wir die Parameter N, K, und q_0 entsprechend den Gleichungen (4.5) und geben dem System die effektive Dimension $d = 2 + \epsilon$. Dieses ϵ ist im streng zweidimensionalen Fall Null. In zwei Dimensionen erwartet man aufgrund des Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorems, daß bei endlicher Temperatur eine kontinuierliche Symmetrie nicht spontan gebrochen wird [Hoh67]. Bei den realen HTS-Materialien handelt es sich aufgrund der Kopplung J_{-} zwischen den Kupferdioxid-Ebenen aber um dreidimensionale Systeme, in denen sich langreichweitige Ordnungen wie Antiferromagnetismus und Supraleitung ausbilden können. Da J_{-} aber viel kleiner als die Kopplung J innerhalb der Ebene ist, verhält sich das System auf kleinen Skalen wie ein zweidimensionales System. Erst auf einer Skala $\xi^2 \approx J a^2/J_$ kann das System in eine dreidimensionale Universalitätsklasse übergehen. Um die dabei auftretende Fixpunktstruktur des Problems zu verstehen, betrachten wir die Fälle $\epsilon = 0$ und $\epsilon = 1$.

Die RG-Gleichungen für das SO(5)-Model lauten somit (mit $g = 2g_{\text{eff}}/\Lambda^2 \rho$)

$$\frac{dg}{dl} = 2g - 2gF_{<},\tag{4.66}$$

$$\frac{dt}{dl} = \begin{cases} -\epsilon t + t(3F_{<}) & \text{für } g \le 0, \\ -\epsilon t + t(2F_{<} + 1F_{>}) & \text{für } g > 0, \end{cases}$$
(4.67)

$$\frac{dc}{dl} = \begin{cases} -(1+\epsilon)c + 3cF_{<} & \text{für } g \le 0, \\ -(1+\epsilon)c + c(2F_{<}+1F_{>}) & \text{für } g > 0 \end{cases}$$
(4.68)

 mit

$$F_{<} = \frac{1}{4\pi} \frac{c}{\sqrt{1+|g|}} \coth(\frac{c}{2t}\sqrt{1+|g|}), \qquad (4.69)$$

$$F_{>} = \frac{1}{4\pi} c \coth(\frac{c}{2t}).$$
 (4.70)

Diese Gleichungen bilden ein System aus drei gekoppelten Differentialgleichungen.

4.3.1 Der klassische Grenzfall

Zunächst betrachten wir den klassischen Grenzfall

$$t \gg \frac{c}{2}\sqrt{1+|g|}.$$
 (4.71)

Die RG-Gleichungen vereinfachen sich dann zu

$$\frac{dg}{dl} = 2g - \frac{gt}{\pi(1+|g|)},\tag{4.72}$$

$$\frac{dt}{dl} = \begin{cases} -\epsilon t + t^2 \left(\frac{3}{2\pi(1+|g|)}\right) & \text{für } g \le 0, \\ -\epsilon t + t^2 \left(\frac{1}{\pi(1+|g|)} + \frac{1}{2\pi}\right) & \text{für } g > 0, \end{cases}$$
(4.73)

$$\frac{dc}{dl} = \begin{cases} -(1+\epsilon)c + ct\frac{3}{2\pi(1+|g|)} & \text{für } g \le 0, \\ -(1+\epsilon)c + ct(\frac{1}{\pi(1+|g|)} + \frac{1}{2\pi}) & \text{für } g > 0. \end{cases}$$
(4.74)

Wir bemerken das (4.72) und (4.73) nicht mehr von c abhängen. Die ist auch zu erwarten, da c, als Maß für die Quantenfluktuationen, im klassischen Grenzfall keine Rolle spielt.

Das Gleichungssystem (4.72) und (4.73) besitzt die folgenden Fixpunkte:

$$g = -\infty, \quad t = \{0, \quad \infty\},$$
 (4.75)

$$g = 0, \qquad t = \{0, -\frac{2}{3}\pi\epsilon, -\infty\},$$
 (4.76)

$$g = \infty, \qquad t = \{0, \quad 2\pi\epsilon, \quad \infty\}. \tag{4.77}$$

Da wir die RG-Gleichungen perturbativ in einer Ein-Loop-Rechnung gewonnen haben, bedeutet Wert ∞ in einem der Parameter g, c oder t, daß der Parameter in dieser Ordnung divergiert. Die Störungstheorie bricht in diesem Fall zusammen. Dennoch ist es nützlich den Wert ∞ zuzulassen, um einen Überblick über die Fixpunktsituation zu bekommen.

Der nichttriviale Fixpunkt $(g = \infty, t = 2\pi\epsilon)$ fällt für negative g mit dem trivialen Fixpunkt $(g = -\infty, t = \infty)$ zusammen. Das System verhält sich also qualitativ unterschiedlich für positives und negatives g.



Abbildung 9: Der RG-Fluß im klassischen Grenzfall für $\epsilon = 1$ mit kritischen Linien. In Richtung der y-Achse ist u = g/(1+|g|) aufgetragen, u = 1 entspricht also $g = \infty$. In x-Richtung ist T = t aufgetragen. Die Pfeile geben lediglich die Richtung, nicht aber den Betrag des Flusses an.

In Abbildung 9 ist der RG-Fluß der Gleichungen (4.72) und (4.73) für $\epsilon = 1$ dargestellt. Die durchgezogenen Linien verbinden die Fixpunkte $(g = -\infty, t = \infty)$, $(g = 0, t = 2/3\pi\epsilon)$ und $(g = \infty, t = 2\pi\epsilon)$ entlang des RG-Flusses miteinander. Zusammen mit der t-Achse teilen sie das Flußdiagramm in vier Teile ein.

Rechts dieser kritischen Linien strebt der RG-Fluß gegen den Fixpunkt bei $(g = 0, t = \infty)$. Für Anfangsparameter in diesem Bereich ist die Anisotropie ein irrelevanter Parameter. Das System besitzt auf großen Skalen die volle SO(5)-Symmetrie. Das Verhalten des Systems wird ausschließlich von den thermischen Fluktuationen bestimmt. Es kann sich keine langreichweitige Ordnung ausbilden.

Links der Linien strebt das System für g > 0 gegen $(g = +\infty, t = 0)$ und für g < 0 gegen $(g = -\infty, t = 0)$. Das bedeutet, daß die thermischen Fluktuationen wegrenormieren, während die Anisotropie so stark wird, daß dadurch der Ordnungsparameter auf den supraleitenden Unterraum für g < 0 beziehungsweise den antiferromagnetischen Unterraum für g > 0 eingeschränkt wird. In Abwesenheit von Quantenfluktuationen bedeutet das, daß sich langreichweitige Ordnung ausbildet.

Wir bemerken weiterhin, daß insbesondere für Anfangsparameter nahe der kritischen Linie, das System sich erst auf einer recht großen Skala für einen der stabilen Fixpunkte entscheidet. Insbesondere kann zum Beispiel die Anisotropie von kleinen Werten auf der mikroskopischen Skala zu sehr großen Werten auf einer mittleren Skala wachsen, um dann wieder auf null zu fallen. Ein ähnliches nichtmonotones Verhalten gilt auch für t. Die einzigen in beiden Variabeln monotonen Trajektorien sind solche, die Fixpunkte miteinander verbinden.

Zum Vergleich betrachten wir in Abbildung 10 den RG-Fluß für $\epsilon = 0$. In diesem Fall stellt jeder Punkt auf der $g = -\infty$ Achse einen Fixpunkt dar. Sonst gibt es nur noch die trivialen Fixpunkte bei $(g = \infty, t = 0)$, $(g = \infty, t = \infty)$, (g = 0, t = 0) und $(g = 0, t = \infty)$. Im Fall g > 0 strebt das System für endliche t immer gegen den Fixpunkt bei $(g = 0, t = \infty)$. Die bei $\epsilon > 0$ vorhandene kritische Linie fällt jetzt mit der t = 0-Achse zusammen.

Die eingezeichnete kritische Linie im Bereich g < 0 trennt zwei Bereiche mit unterschiedlichem Verhalten. Für Anfangsparameter rechts dieser Linie strebt das System wie im Fall $\epsilon = 1$ gegen den Fixpunkt bei $(g = 0, t = \infty)$.

Interessanter ist das Verhalten links dieser Linie. Hier strebt das System zu einem Fixpunkt mit $g = -\infty$ und endlichem t. Das System verhält sich also wie ein klassisches SO(2) NLSM bei endlicher Temperatur. Sobald man Quantenfluktuationen berücksichtigt wird natürlich jede langreichweitige Ordnung zerstört. Trotzdem tritt kein Anregungsgap auf. Dies liegt daran, daß ein Feldvektor in der (n_1, n_5) -Ebene wie folgt parametrisiert werden kann:

$$\mathbf{n} = (\cos\alpha, 0, 0, 0, \sin\alpha) \tag{4.78}$$



Abbildung 10: Entspricht Abbildung 9 mit dem Unterschied, daß hier $\epsilon = 0$ ist.

Wenn die Anisotropie so groß ist, daß die (n_2, n_3, n_4) -Ebene keine Rolle spielt, läßt sich die effektive Wirkung nach (4.11) schreiben als

$$S_{\text{eff}} = \frac{1}{2c} \int_0^{c/t} dx_0 \int d^2 x \left((\partial_0 \alpha)^2 + (\nabla \alpha)^2 \right).$$
 (4.79)

Man bemerkt, daß im Propagator für α kein Massenterm auftaucht. Der tiefere Grund dafür liegt in der Tatsache, daß es sich bei SO(2) um eine abelsche Gruppe handelt [Tsv95].

4.3.2 Das Tieftemperaturverhalten

Nachdem wir das Verhalten bei $t \gg c\sqrt{1+|g|}/2$ untersucht haben, wollen wir uns nun dem Limes $t \to 0$ zuwenden. Die Faktoren (4.69) und (4.70) vereinfachen sich nun zu

$$F_{<} = \frac{1}{4\pi} \frac{c}{\sqrt{1+|g|}}, \quad F_{>} = \frac{1}{4\pi}c.$$
 (4.80)



Abbildung 11: RG-Fluß für t = 0 und $\epsilon = 0$. In x-Richtung ist die c aufgetragen, in y-Richtung u = g/(1 + |g|).

und die RG-Gleichungen lauten

$$\frac{dg}{dl} = 2g - \frac{gc}{2\pi\sqrt{1+|g|}},\tag{4.81}$$

$$\frac{dt}{dl} = \begin{cases} -\epsilon t + tc(\frac{3}{4\pi\sqrt{1+|g|}}) & \text{für } g \le 0, \\ -\epsilon t + tc(\frac{1}{2\pi\sqrt{1+|g|}} + \frac{1}{4\pi}) & \text{für } g > 0, \end{cases}$$
(4.82)

$$\frac{dc}{dl} = \begin{cases} -(1+\epsilon)c + c^2 \frac{3}{4\pi\sqrt{1+|g|}} & \text{für } g \le 0, \\ -(1+\epsilon)c + c^2 (\frac{1}{2\pi\sqrt{1+|g|}} + \frac{1}{4\pi}) & \text{für } g > 0. \end{cases}$$
(4.83)

Die Differentialgleichungen für g und c hängen jetzt nicht mehr von t ab. Benutzen wir für kleine g die Näherung $\sqrt{1+|g|} \approx 1+|g|/2$, so sind die Gleichungen (4.81) und (4.83) in der Form identisch mit den RG-Gleichungen für g (4.72) und t (4.72) des klassischen Grenzfalls. Die Unterschiede sind, daß die Dimension des Systems um eins größer geworden ist und die Rolle des t nun von cübernommen wird. Dies ist ein explizites Beispiel für die allgemeine Aussage, daß ein quantenmechanisches System in d Dimensionen zu einem thermodynamischen System in d + 1 Dimensionen äquivalent ist [Pol87]. Die Gleichungen (4.81) und (4.83) werden analog zum klassischen Grenzfall behandelt. Der RG-Fluß mit den kritischen Linien ist in Abbildung 11 dargestellt. Hierbei wurde $\epsilon = 0$ gewählt, ein endliches $\epsilon < 1$ verändert die Ergebnisse im Gegensatz zum klassischen Grenzfall nur wenig.

Die Fixpunkte sind jetzt

$$g = -\infty, \quad c = \{0, \quad \infty\},$$
 (4.84)

$$g = 0, \qquad c = \{0, -\frac{4}{3}\pi(\epsilon + 1), -\infty\},$$
 (4.85)

$$g = \infty, \quad c = \{0, 4\pi(\epsilon + 1), \infty\}.$$
 (4.86)

Für t = 0 verhält sich das System analog zu dem oben dargelegten klassischen Grenzfall mit $\epsilon = 1$. Der physikalische Unterschied besteht darin, daß nun Quanten- und nicht thermische Fluktuationen die Unordnung herbeiführen. Die kritischen Linien sind jetzt quantenkritische Linien. Der Fixpunkt bei $(g = \infty, c = 4\pi/3)$ ist der bekannte quantenkritische Punkt des O(3)-NLSM [Cha89]. Der Fixpunkt bei $(g = 0, c = 4\pi)$ ist der quantenkritische Punkt des SO(5)-NLSM ohne Anisotropie. Rechts der kritischen Linien befindet sich die quantenungeordnete Phase. Links liegen die geordneten Phasen, und zwar für g > 0die antiferromagnetische Phase und für g < 0 die supraleitende Phase.

4.3.3 Der Allgemeine Fall

Für $t \neq 0$ und $t \ll c\sqrt{1+|g|}/2$ treten qualitative Unterschiede in Abhängikeit vom Vorzeichen von g auf.

Betrachten wir zunächst den Fall g > 0. Solange

$$t(l) \ll \frac{c(l)}{2} \tag{4.87}$$

ist, sind die Näherungen (4.80) gerechtfertigt. Das System verhält sich also wie im Fall t = 0. Es ist allerdings zu beachten, daß t(l) und c(l) sich unter dem RG-Fluß verändern. Aus den RG-Gleichungen (4.67) und (4.68) folgt für das Verhältnis t/c,

$$\frac{d\left(\frac{t}{c}\right)}{dl} = \frac{t}{c}.$$
(4.88)

t/c steigt also exponentiell an und ab einem l von der Ordnung

$$l^* = \ln \frac{c(0)}{2t(0)} \tag{4.89}$$

ist die Bedingung (4.87) nicht mehr erfüllt. Hier sind c(0) und t(0) die nichtrenormierten Parameter der Theorie auf einer Längenskala von der Ordnung der Gitterlänge $a \sim \Lambda^{-1}$. Das von Quantenfluktuationen geprägte Tieftemperaturverhalten ist also nur bis zu einer Längenskala von

$$\xi_{co} = a \frac{c(0)}{2t(0)} \tag{4.90}$$

gültig. ξ_{co} ist eine sogenannte Cross-Over-Länge, die die Skalen der verschiedenen Fluktuationen voneinander trennt. Für $l > l^*$ befindet sich das System zunächst in einem Bereich, in dem die Bedingungen

$$\frac{c(l)}{2} < t(l) < \frac{c(l)}{2}\sqrt{1+|g(l)|}$$
(4.91)

erfüllt sind. Dieses Regime befindet sich zwischen den Bereichen des Tieftemperaturverhaltens und des klassischen Grenzfalls. In diesem Zwischenregime sind alle drei Parameter c, t und g gleichwichtig, in dem Sinne, daß die RG-Gleichungen nicht entkoppeln.

Falls die Bedingung (4.91) für ein gewisses l^{**} verletzt wird, das System das Zwischenregime also in Richtung klassischer Grenzfall verläßt, so ist mit l^{**} eine neue Cross-Over-Länge

$$\xi_{co}' = a \exp l^{**} \tag{4.92}$$

verbunden, die die unterschiedlichen Fluktuationen im Zwischenregime und im klassischen Regime voneinander trennt. Es kann aber auch der Fall eintreten, daß selbst für große l (4.91) erfüllt ist. Dann geht das System bei großen Abständen nicht in das Verhalten des klassischen Grenzfalls über, sondern verbleibt in der Zwischenphase.

Betrachten wir nun den Fall g < 0. Da in den RG-Gleichungen für g < 0 keine Terme mit $F_>$ auftauchen, läßt sich die Bedingung für das Tieftemperaturverhalten auf den Bereich

$$t(l) \ll \frac{c(l)}{2}\sqrt{1+|g(l)|}$$
 (4.93)

erweitern. Im Gegensatz zu (4.87) kann hier der Fall eintreten, daß (4.93) unter dem Renormierungsfluß nicht verletzt wird. Somit wird unter Umständen das Verhalten des System auch bei großen Skalen durch das Tieftemperaturverhalten bestimmt. Für g < 0 tritt keine Lücke zwischen Tieftemperaturverhalten und Hochtemperaturverhalten, d.h. die Bedingungen (4.93) und (4.71) schließen aneinander an, ohne daß dazwischen noch Platz für ein qualitativ anderes Verhalten wäre.

In Abbildung 12 sind die verschiedenen Cross-Over-Bereiche skizziert.



Abbildung 12: Schematisches Cross-Over Diagramm des SO(5)-Modells, TT = Tieftemperaturverhalten, ZR = Zwischenregime, KG = Klassischer Grenzfall



Abbildung 13: Phasengrenzen des SO(5)-Models für verschiedene Werte von c. In der Reihenfolge von oben nach unten wurden dabei folgende Parameter gewählt: c = 0.1, c = 3.1, c = 4.6, c = 6.1.



Abbildung 14: Phasendiagramm des SO(5)-Models für c = 1

4.3.4 Numerische Auswertung der RG-Gleichungen

Neben der qualitativen Diskussion ist auch eine numerische Auswertung der RG-Gleichungen möglich. Dazu wurden mit Hilfe eines C++-Programms für verschiedene Anfangswerte q(0), t(0) und c(0) die RG-Gleichungen aufintegriert, bis eine der Variablen dominierte. Die daraus resultierenden Phasengrenzen für die Dominanz der t-Variable sind in Abbildung 13 für verschiedene Werte von c dargestellt. Man erkennt, daß die kritische Temperatur mit zunehmendem cabnimmt, wie es auch zu erwarten ist. Weiterhin beobachtet man, daß sich für große c die Phasengrenze noch für endliches q bei t = 0 liegt, und sich ein Plateau wie in der unteren Kurve in Abbildung 13 ausbildet. Dies ist konsistent mit dem oben diskutiertem Tieftemperaturverhalten, die Grenzen des Plateaus sind dabei durch die quantenkritischen Linien in Abbildung 11 gegeben. Direkt auf dem Plateau befindet sich das System nach Abbildung 11 im quantenungeordneten Bereich. Dieser Bereich wird sich auch zu endlichen Temperaturen fortsetzen, bis das System in einen durch thermische Unordnung geprägten Bereich übergeht. Es ergibt sich somit ein recht komplexes Phasendiagramm, ohne daß die vereinfachenden Annahmen der Isotropie in χ (3.32) und ρ (3.33) aufgegeben werden.

Für c = 1 ist in Abbildung 14 das Phasendiagramm in einer wesentlich besseren Auflösung dargestellt.

Es ist zu beachten, daß hier positives g antiferromagnetische Ordnung und negatives g supraleitende Ordnung bedeutet. Nach unserem Phasendiagramm

steigt die Supraleitungssprungtemperatur T_c in der Nähe des kritischen Punktes stärker an als die Néel Temperatur. Dies widerspricht aber den experimentellen Tatsachen. Um zu mit den Experimenten konsistenten Ergebnissen zu gelangen, muß berücksichtigt werden, daß T_c durch das Abfallen von T_{MF} (siehe Abbildung 7) stark unterdrückt wird. Diese Erweiterung stellt eine der nächsten Aufgaben dar.

In diesem Kapitel wurden die Herleitung und die Auswertung der RG-Gleichungen für das anisotrope SO(5)-NLSM durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen keine Widersprüche des SO(5)-Modells mit den Experimenten auf. Für quantitative Vergleiche sind weitere Rechnungen notwendig.

5 Die 1/N-Entwicklung

In diesem Kapitel wird zunächst die 1/N-Entwicklung vorgestellt, und dann auf das SO(5)-Modell angewandt. Das besondere Augenmerk liegt dabei auf einer möglichen Berechnung der experimentell zugänglichen dynamischen Spinsuszeptibilität. Dadurch können die Vorhersagen der SO(5)-Theorie mit dem Experiment verglichen werden.

5.1 Das isotrope nichtlineare Sigma-Modell

Die 1/N-Entwicklung hat sich in den letzten Jahren zu einer Standardmethode bei der Behandlung des NLSM entwickelt. Einführende Darstellungen der Methode findet man zum Beispiel in dem Büchern von Polyakov [Pol87] und Tsvelik [Tsv95] oder in der Arbeiten von Read und Newns [Rea83] und Sachdev [Sac93]. Bei den folgenden Ausführungen orientieren wir uns vor allem an der Arbeit von Chubukov, Sachdev und Ye [Chu94b].

Betrachten wir die Zustandssumme des isotropen NLSM,

$$Z = \int \mathcal{D}\mathbf{n}\delta(\mathbf{n}^2 - 1)\exp(-\mathcal{S}^{\text{NLSM}}), \qquad (5.1)$$

 mit

$$\mathcal{S}^{\text{NLSM}} = \frac{N}{2c} \int_0^\beta d\tau \int d^2 x \left[(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{n})^2 + (\partial_\tau \mathbf{n})^2 \right].$$
(5.2)

Hierbei ist **n** ein N-komponentiges Feld, c eine Kopplungskonstante und β die inverse Temperatur. Durch die Umskalierung $\tilde{\mathbf{n}} = \sqrt{N}\mathbf{n}$, und mit Hilfe der Integraldarstellung der δ -Funktion,

$$\delta(\mathbf{n}^2 - 1) = \prod_{x,\tau} \delta(\mathbf{n}^2(x,\tau) - 1)$$
(5.3)

$$=\prod_{x,\tau}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\lambda(x,\tau)}{2\pi}\exp\left(i\lambda(x,\tau)(\mathbf{n}^2(x)-1)\right)$$
(5.4)

$$= \int \mathcal{D}\lambda \exp\left(\int_0^\beta d\tau \int d^2x \lambda(x,\tau)((\mathbf{n}^2(x,\tau)-1))\right), \qquad (5.5)$$

ergibt sich aus (5.1)

$$Z = \int \mathcal{D}\tilde{\mathbf{n}}\mathcal{D}\lambda \exp\left(-\frac{1}{2c}\int_{0}^{\beta}d\tau \int d^{2}x \left[(\nabla\tilde{\mathbf{n}})^{2} + (\partial_{\tau}\tilde{\mathbf{n}})^{2} + i\lambda(\tilde{\mathbf{n}}^{2} - N)\right]\right).$$
(5.6)

Damit tritt $\tilde{\mathbf{n}}$ in der Wirkung quadratisch auf, und nach der Ausführung des Funktionalintegral über $\tilde{\mathbf{n}}$ ergibt sich

$$Z = \int \mathcal{D}\lambda \exp(-\mathcal{S}(\lambda)), \qquad (5.7)$$

 mit

$$S(\lambda) = N\left(\left[\frac{1}{2c}\int_0^\beta d\tau \int d^2x(-i\lambda)\right] + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\ln(-\nabla^2 - \partial_\tau^2 + i\lambda)\right).$$
(5.8)

S hängt nur über den Vorfaktor von N ab. Daher kann das Funktionalintegral über λ mit Hilfe der aus der statistischen Mechanik bekannten Sattelpunktsmethode [Pat96] entwickelt werden. Der Integrationsweg wird dabei in der komplexen λ -Ebene so deformiert, daß der Sattelpunkt λ_0 von $S(\lambda)$ passiert wird. Die Richtung des Weges bei λ_0 wird dabei so gewählt, daß Re $S(\lambda)$ ein Maximum besitzt und Im $S(\lambda)$ konstant bleibt. Man erreicht dadurch, daß das Integral über λ vom Sattelpunkt bei λ_0 dominiert wird. Im Unterschied zur klassischen Statistischen Mechanik ist λ in unserem Fall keine Zahl, sondern eine Funktion. Entsprechend handelt es sich auch, statt um eine gewöhnliche Integration, um eine Funktionalintegration. Ansonsten bleibt der Mechanismus der Sattelpunktsmethode aber gleich, es ist lediglich zu beachten, daß Ableitungen durch Funktionalableitungen ersetzt werden. Für den Sattelpunkt λ_0 gilt die Bedingung

$$\frac{\delta \mathcal{S}(\lambda(x))}{\delta \lambda(x)}\Big|_{\lambda_0(x)} = 0, \qquad (5.9)$$

die mit (5.8) und $m^2 = i\lambda_0$ auf

$$cT\sum_{\omega_n} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{1}{(\omega_n^2 + \mathbf{k}^2 + m^2)} = 1$$
(5.10)

führt.

Dieses Integral divergiert bei großen Wellenvektoren. Zur Regularisierung wenden wir das Pauli-Villars Regularisierungsschema [Pau49] an und führen dabei einen Abschneideparameter Λ ein

$$cT\sum_{\omega_n} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\frac{1}{(\omega_n^2 + \mathbf{k}^2 + m^2)} - \frac{1}{(\omega_n^2 + \mathbf{k}^2 + \Lambda^2)} \right) = 1.$$
(5.11)

Nach Ausführen der Integration und Summation (mit Hilfe der Eulerschen Produktarstellung für $\sinh(x)$ [Kno23]) erhält man

$$\frac{Tc}{2\pi} \ln\left(\frac{\sinh(\frac{\Lambda}{2T})}{\sinh(\frac{m}{2T})}\right) = 1.$$
(5.12)

Aufgelöst nach m ergibt sich schließlich

$$m = 2T \operatorname{arsinh}\left(\exp\left(-\frac{2\pi}{cT}\right) \sinh\left(\frac{\Lambda}{2T}\right)\right).$$
 (5.13)

Nachdem der Sattelpunkt bestimmt ist, können nun Korrelationsfunktionen durch Entwickeln des Funktionalintegrals in der Umgebung des Sattelpunktes in Ordnung 1/N berechnet werden.

5.2 Spin-1/2-Antiferromagnet

Eine Anwendung des isotropen NLSM besteht in der Beschreibung des zweidimensionalen Spin-1/2 Heisenberg-Antiferromagneten. Wie in Abschnitt 2.3.4 diskutiert werden dabei die Felder n_a als Komponenten des lokalen Néel-Ordnungsparameters interpretiert.

Chubukov, Sachdev und Ye [Chu94b] konnten mit der Anwendung der 1/N-Entwicklung auf das O(3)-NLSM eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu La_2CuO_4 erreichen.

5.2.1 Der Fall $N = \infty$

Für $N = \infty$ wird das Funktionalintegral über λ in (5.6) durch den Wert des Integranten am Sattelpunkt $i\lambda_0 = m$ bestimmt. Für die antiferromagnetische dynamische Spinsuszeptibilität, die definiert ist als

$$\chi_s(\mathbf{k},\omega_n) = \chi'_s(\mathbf{k},\omega_n) + i\chi''_s(\mathbf{k},\omega_n) = \langle \mathbf{n}(\mathbf{k},\omega_n)\mathbf{n}(-\mathbf{k},-\omega_n)\rangle, \qquad (5.14)$$

folgt dann aus (5.6)

$$\chi_s(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{c}{\mathbf{k}^2 + \omega_n^2 + m^2}.$$
(5.15)

Durch analytische Fortsetzung zu reelen Frequenzen $i\omega_n = \omega + i\epsilon$ erhält man für den Imaginärteil von χ_s

$$\chi_s''(\mathbf{k},\omega_n) = \frac{c\pi}{2\sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2}} \left(\delta(\omega - \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2}) - \delta(\omega + \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2})\right).$$
(5.16)

Um m mit der Korrelationslänge in Verbindung zu bringen, definieren wir den Spinstruktorfaktor

$$S(\mathbf{k}) = T \sum_{\omega_n} \langle \mathbf{n}(\mathbf{k}, \omega_n) \mathbf{n}(-\mathbf{k}, -\omega_n) \rangle.$$
 (5.17)

Die Spinkorrelationslänge ξ ist definiert als [Ma76]

$$\xi^2 = -\frac{1}{S(0)} \frac{\partial S}{\partial \mathbf{k}^2} \bigg|_{\mathbf{k}=0},\tag{5.18}$$

so daß

$$\xi = \frac{1}{m} \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{m/T}{2\sinh(m/T)}\right)} \approx \frac{1}{m}.$$
(5.19)

Wir wenden nun (5.13) an, um ein qualitatives Phasendiagramm zu erhalten. Mit $c_c = 4\pi/\Lambda$ und $\Lambda \gg T$ ergibt sich aus (5.13)

$$\xi^{-1} \approx m = 2T \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2} \exp\left(-\frac{2\pi}{T}\left(\frac{1}{c} - \frac{1}{c_c}\right)\right)\right).$$
(5.20)

Betrachten wir zunächst den Limes $T \to 0$. Für $c < c_c$ divergiert ξ wie

$$\xi^{-1} \sim m \sim 2T \exp\left(-\frac{2\pi}{T} \left(\frac{1}{c} - \frac{1}{c_c}\right)\right),\tag{5.21}$$

bei T = 0 bildet sich langreichweitige Néel-Ordnung aus. Aufgrund der spontanen Symmetriebrechung gibt es masselose Goldstonemoden. Für endliche Temperatur kann es aufgrund des Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorems [Hoh67, Mer66] keine langreichweitige Ordnung geben. Der Bereich des Phasendiagramms, in dem die Korrelationslänge dieses exponentielle Verhalten in der Temperatur zeigt, nennt man renormierte klassische Phase.

Für $c > c_c$ und kleine T gilt

$$\xi^{-1} \sim m \sim \frac{4\pi(c-c_c)}{cc_c}.$$
 (5.22)

 ξ bleibt also auch bei T = 0 noch endlich. Es gibt keine langreichweitige Ordnung. Die Néel-Ordnung ist durch Quantenfluktuationen zerstört. Man spricht daher auch von der quantenungeordneten Phase. Charakteristisch für dieses Regime ist, daß die Korrelationslänge nicht von der Temperatur abhängt.

Für $c = c_c$ und T = 0 erhält man eine 2 + 1-dimensionale Quantenfeldtheorie am kritischen Punkt.

Das Einschalten einer Temperatur $T \neq 0$ bewirkt, daß das System in einer Richtung der imaginären Zeit endlich mit einer Periode $\beta = 1/T$ wird. Es wird also eine neue Länge eingeführt. Die Korrelationslänge für $c = c_c$ muß deshalb wie β skalieren.

Dieses Skalenverhalten tritt für große T auch bei $c \neq c_c$ auf, denn für $T \to \infty$ wird (5.20) zu

$$m = 2T\operatorname{arsinh}(\frac{1}{2}). \tag{5.23}$$



Abbildung 15: Schematisches Phasendiagramm des isotropen NLSM

Der Bereich mit diesem Skalenverhalten heißt quantenkritsch.

Aus dem unterschiedlichen Verhalten der Korrelationslänge bei hohen und niedrigen Temperaturen, schließt man, daß bei einer gewissen Temperatur ein Übergang stattfinden muß.² Im Unterschied zu einem Phasenübergang ist diese Temperatur allerdings nicht scharf bestimmt. Man spricht daher auch von einem Cross-Over. Ein schematisches Crossoverdiagramm ist in Abbildung 15 dargestellt.

5.2.2 Ordnung 1/N

Ein Mangel der Lösung bei $N = \infty$ besteht darin, daß in diesem Fall keine Dämpfung der niederenergetischen Anregungen auftritt, wie es zum Beispiel in NMR-Experimenten gemessen wird.

Um dies einzusehen, betrachten wir die vereinfachte Moriya-Formel [Mor63, Sli94] für die Spinrelaxationsrate $1/T_1$ von ${}^{63}Cu$

$$\frac{1}{T_1} = \frac{k_B T}{\mu_B^2 \hbar} \sum_{\mathbf{k}} |A(\mathbf{k})|^2 \frac{\operatorname{Im} \chi(\mathbf{k}, \omega_N)}{\hbar \omega_N}$$
(5.24)

$$\approx \lim_{\omega \to 0} A(\pi/a, \pi/a)^2 \frac{k_B T}{\hbar^2 \omega} \int \frac{d^2 k}{4\pi^2} \operatorname{Im} \chi_s(\mathbf{k}, \omega).$$
 (5.25)

²Dieser Übergang ist auch anhand der isotropen Kurven in Abbildung 17 und Abbildung 18 zu erkennen. m weicht hier bei kleinen Temperaturen vom linearen Verhalten bei großen Temperaturen ab.



Abbildung 16: $\chi_s(\mathbf{k},\omega)'' \sim \operatorname{Im} \phi_{1s}(\mathbf{k}/T,\omega/T)$ im quantenkritischen Bereich bis zur Ordnung 1/N. Quelle: Chubukov et al. [Chu94b]

Hierbei bedeuten ω_N die nukleare Larmorfrequenz, $\chi(\mathbf{k}, \omega_N)$ die dynamische Spinsuszeptibilität, *a* die Gitterkonstante, und $A(\mathbf{k})$ die Fouriertransformierte des Hyperfeinformfaktors. Die Näherung (5.25) ist gerechtferigt, weil ω_N klein ist und $A(\mathbf{k})$ aufgrund der Anordnung der ⁶³Cueinen Peak an dem antiferromagnetischen Wellenvektor ($\pi/a, \pi/a$) aufweist.

Setzten wir (5.16) in (5.25) ein, so verschwindet $1/T_1$. In nullter Ordnung in 1/N tritt also noch keine Dämpfung auf, die aber bei endlichen Temperaturen immer vorhanden sein sollte. Um also physikalisch meßbare Effekte vorhersagen zu können, die von der Dämpfung abhängen, ist es daher notwendig, mindestens bis zur Ordnung 1/N zu rechnen. Die dabei auftretenden Ausdrücke können im allgemeinen allerdings nicht mehr analytisch gelöst werden.

Chubukov, Sachdev und Ye [Chu94b] haben die Korrekturen in Ordnung 1/Nfür verschiedene Größen numerisch berechnet. In Abbildung 16 ist ihr Ergebnis für Im $\chi_s(\mathbf{k}, \omega)$ für N = 3 im quantenkritischen Bereich dargestellt. Man erkennt, daß im Vergleich zu (5.16) die Deltapeaks aufgeweicht sind und auch für kleine Frequenzen noch spektrales Gewicht vorhanden ist. Dadurch wird eine Dämpfung ermöglicht, die zum Beispiel in NMR-Experimenten gemessen werden kann. Der Vergleich der theoretischen Voraussagen mit dem Experiment ist aber immer noch schwierig, da scheinbar gewisse Artefakte der 1/N Entwicklung auftreten, die bewirken, daß Im $\chi_s(\mathbf{k}, \omega)$ für kleine ω zu klein wird. Laut Chubukov et al. [Chu94b] passen die experimentellen NMR-Resultate für La_2CuO_4 aber gut zum Verhalten von Im $\chi_s(\mathbf{k}, \omega)$ bei $\omega \sim T$.

5.3 Anwendung auf das SO(5)-Modell

5.3.1 Die Sattelpunktsgleichung im anisotropen Fall

Im folgenden soll die Idee der 1/N-Entwicklung auf das anisotrope NLSM angewandt werden. Speziell interessieren wir uns für das SO(5)-Modell, also N = 5. Da die 1/N-Entwicklung wie oben dargelegt für N = 3 im isotropen Modell schon in erster Ordnung in 1/N brauchbare Resultate liefert, erwartet man für N = 5 in erster Ordnung mindestens genausogute Ergebnisse.

Mit den Definitionen wie in Kapitel 4 gehen wir wieder von der Zustandssumme (4.3) mit der effektiven Wirkung (4.11) aus:

$$Z = \int \mathcal{D}\mathbf{n} \prod_{\tau,x} \delta(\mathbf{n}^2 - 1) \exp(-\mathcal{S}_{\text{eff}}), \qquad (5.26)$$

$$\mathcal{S}_{\text{eff}} = \frac{1}{2c_0} \int_0^u dx_0 \int d^d x' \left((\partial_0 \mathbf{n})^2 + (\nabla \mathbf{n})^2 + g_0 (\sum_{i=1}^K n_i^2) \right).$$
(5.27)

Um die Anisotropie konsistent zu berücksichtigen definieren wir

$$\tilde{K} = \frac{K}{N} \,, \tag{5.28}$$

und fordern, daß \tilde{K} für $N \to \infty$ konstant bleibt. Die Spezialisierung auf das SO(5)-Modell erfolgt wieder mit Hilfe der Identifizierungen in (4.5), insbesondere ist also

$$\tilde{K} = \frac{2}{5} \qquad \text{für } g_{\text{eff}} \ge 0, \tag{5.29}$$

$$\tilde{K} = \frac{3}{5}$$
 für $g_{\text{eff}} < 0.$ (5.30)

Analog zur Vorgehensweise in Abschnitt 5.1 wird die Zwangsbedingung $|\mathbf{n}| = 1$ durch einen Lagrangemultiplikator λ in der Wirkung realisiert. Die Felder n_a treten dann nur noch quadratisch auf und können ausintegriert werden. Die Zustandssumme läßt sich dann schreiben als

$$Z = \int \mathcal{D}\mathbf{n}\mathcal{D}\lambda \exp\left(-\mathcal{S}(\lambda,\mathbf{n})\right)$$
(5.31)

$$= \int \mathcal{D}\lambda \exp(-\mathcal{S}(\lambda)), \qquad (5.32)$$

mit

$$\mathcal{S}(\lambda, \mathbf{n}) = \frac{1}{2c_0} \int_0^u dx_0 \int d^2 x \\ \left[(\partial_0 \mathbf{n})^2 + (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{n})^2 + g_0 (\sum_{i=1}^K n_i^2) + i\lambda(\mathbf{n}^2 - 1) \right],$$

$$\mathcal{S}(\lambda) = N \left(\left[\frac{1}{2\tilde{c}} \int_0^u dx_0 \int d^2 x(-i\lambda) \right] + \frac{1}{2} \tilde{K} \operatorname{Tr} \ln(-\nabla^2 - \partial_0^2 + g_0 + i\lambda) \\ + \frac{1}{2} (1 - \tilde{K}) \operatorname{Tr} \ln(-\nabla^2 - \partial_0^2 + i\lambda) \right)$$
(5.34)

und

$$\tilde{c} = Nc. \tag{5.35}$$

Die Gleichung für den Sattelpunkt $i\lambda_0 = m_0$ erhält man, indem man (5.9) auf (5.34) anwendet. Somit ergibt sich als implizite Bedingung für m_0

$$\frac{1}{2\tilde{c}} = \frac{\tilde{K}}{2} \operatorname{Tr}(-\nabla^2 - \partial_0^2 + g_0 + m_0)^{-1} + \frac{1 - \tilde{K}}{2} \operatorname{Tr}(-\nabla^2 - \partial_0^2 + m_0)^{-1} \quad (5.36)$$

$$= \frac{1}{2\pi u} \ln\left(\sinh(\frac{1}{2}\Lambda u)\sinh(\frac{1}{2}m_0 u)^{\tilde{K}-1}\sinh(\frac{1}{2}\sqrt{m_0^2 + g_0} u)^{-\tilde{K}}\right).$$
(5.37)

Für $\Lambda \gg 1/u \sim T$ ergibt sich mit $\tilde{c}_c = \Lambda/4\pi$

$$\frac{1}{2} \exp\left(-2\pi u (\frac{1}{\tilde{c}} - \frac{1}{\tilde{c}_c})\right) = \left(\sinh(\frac{1}{2}m_0 u)\right)^{1-\tilde{K}} \left(\sinh(\frac{1}{2}\sqrt{m_0^2 + g_0} u)\right)^{\tilde{K}}.$$
(5.38)

Diese Gleichung läßt sich analytisch nicht mehr nach m_0 auflösen, bereitet numerisch aber keine Schwierigkeiten. Der Effekt des Einschaltens der Anisotropie auf m_0 für den Fall $\tilde{K} = 2/5$ bei ansonsten festgehaltenen Parametern ist in Abbildung 17 für $\tilde{c} < \tilde{c}_c$ und in Abbildung 18 für $\tilde{c} > \tilde{c}_c$ dargestellt. Der Fall $\tilde{K} = 3/5$ liefert qualitativ gleiche Ergebnisse. Man erkennt dabei, daß durch das Einschalten der Anisotropie g_0 bei gleichbleibendem \tilde{c} der Massenparameter m_0 vermindert wird.

Um daraus Schlußfolgerungen für die Korrelationslänge zu ziehen, betrachten wir die Superspin-Superspin-Korrelationsfunktionen. Im anisotropen NLSM gibt es zwei verschiedene Propoagatoren: $G^{<}(\mathbf{k},\omega)$ für Feldkomponenten kleiner gleich K und $G^{>}(\mathbf{k},\omega)$ für Feldkomponenten größer K. Für $N = \infty$ kann $i\lambda$ in (5.33) durch m_0 ersetzt werden, und es ergibt sich für die Propagatoren in nullter Ordnung in 1/N

$$G_0^{<}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left\langle n_a(\mathbf{k}, \omega_n) n_a(-\mathbf{k}, -\omega_n) \right\rangle \Big|_{a \le K} = \frac{\tilde{c}}{\mathbf{k}^2 + \omega_n^2 + g_0 + m_0^2}, \qquad (5.39)$$

$$G_0^{>}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \langle n_a(\mathbf{k}, \omega_n) n_a(-\mathbf{k}, -\omega_n) \rangle \Big|_{a>K} = \frac{c}{\mathbf{k}^2 + \omega_n^2 + m_0^2}.$$
 (5.40)

In (5.39) übernimmt $\sqrt{g_0 + m_0^2}$ die Rolle der Masse für die Feldkomponenten $a \leq K$. Nach (5.19) gibt es daher die beiden Korrelationslängen:

$$\xi^{<} \sim \frac{1}{\sqrt{g_0 + m_0^2}}, \qquad \xi^{>} \sim \frac{1}{m_0}.$$
 (5.41)

Neben m_0 ist in Abbildung 17 und Abbildung 18 auch $\sqrt{g_0 + m_0^2}$ eingetragen. Man erkennt dabei, daß das Einschalten der Anisotropie g eine Aufspaltung der beiden Massenparameter m_0 und $\sqrt{g_0 + m_0^2}$ um den isotropen Wert bewirkt. Dadurch wird die Korrelationslänge $\xi^>$ vergrößert und $\xi^<$ verkleinert. Dies kann man physikalisch so verstehen, daß durch die Anisotropie die Spinkomponenten $a \leq K$ mit einer zusätzlichen Masse versehen werden, und daher die Korrelation in der $a \leq K$ Hyperebene abnimmt. Gleichzeitig bewirkt diese zusätzliche Masse, daß der Superspin tendenziell auf die energetisch günstigeren Spinkomponenten a > K eingeschränkt wird. Die Korrelation innerhalb dieser Ebene wird erhöht, da effektiv weniger Spinkomponenten zur Verfügung stehen.

5.3.2 Berechnung der Spinsuszeptibilitäten

Die dynamische Spinsuszeptibilität χ_s ist eine nützliche Größe, um physikalische Effekte vorherzusagen. So kann etwa mit Hilfe des Imaginärteils von χ_s über die Moriya Formel (5.25) die Spinrelaxationsrate $1/T_1$ bestimmt werden.

In der vorliegenden Beschreibung des SO(5)-Modells ist die Spinsuszeptibilität durch den Propagator derjenigen Komponenten des Feldes **n** gegeben, die den antiferromagnetischen Ordnungsparameter repräsentieren. Es gilt also

$$\chi_s(\mathbf{k}, i\omega_n) = G^{<}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \langle n_a(\mathbf{k}, \omega_n) n_a(-\mathbf{k}, -\omega_n) \rangle \Big|_{a \le K} \quad \text{für } g_{\text{eff}} = -g_0 < 0,$$
(5.42)

$$\chi_s(\mathbf{k}, i\omega_n) = G^{>}(\mathbf{k}, i\omega_n)$$

= $\langle n_a(\mathbf{k}, \omega_n) n_a(-\mathbf{k}, -\omega_n) \rangle \Big|_{a>K}$ für $g_{\text{eff}} = g_0 > 0$. (5.43)

Aus (5.39, 5.40) erkennt man durch analytische Fortsetzung zu reelen Frequenzen $i\omega_n = \omega + i\epsilon$, daß in nullter Ordnung in 1/N der Imaginärteil von χ charakteristische Deltapeaks aufweist, wie es auch im Fall des isotropen NLSM (5.16) beobachtet wurde. Ebenso wie im isotropen Fall folgt daraus, daß nach



Abbildung 17: Einfluß der Anisotropie auf den Massenparameter m_0 in Abhängigkeit der Temperatur T bei $c < c_c$. Karo $= m_0$ im isotropen Fall, Kreuz untere Kurve $= m_0$ im anisotropen Fall, Kreuz obere Kurve $= \sqrt{g_0 + m_0^2}$ im anisotropen Fall.



Abbildung 18: Einfluß der Anisotropie auf den Massenparameter m_0 in Abhängigkeit der Temperatur T bei $c > c_c$. Karo = isotroper Fall; Kreuz, Quadrat, Kreis = anisotroper Fall mit g = 0.02, 0.1, 0.5 (beliebige Skala), wobei die jeweils unteren Kurven m_0 , und die oberen Kurven $\sqrt{g_0 + m_0^2}$ darstellen.



Abbildung 19: Beitrag zum Polarisations
operator Π

der Moriya-Formel (5.25) die Spinrelaxationsrate $1/T_1$ in nullter Ordnung in 1/N verschwindet.

Um ein endliches $1/T_1$ zu erhalten müssen die Korrekturen zu χ bzw. $G^<$ und $G^>$ mindestens bis zur Ordnung 1/N berücksichtigt werden. Wir definieren zunächst das Feld λ' über die Beziehung

$$i\lambda = m_0 + \frac{i\lambda'}{\sqrt{N}}.$$
(5.44)

Durch Einsetzen von (5.44) in die Wirkung (5.34) und Entwicklung in $1/\sqrt{N}$ findet man, daß sich die bzgl. λ' linearen Beiträge aufgrund der Sattelpunktsgleichung gerade wegheben. Als effektive Wirkung ergibt sich so bis zur quadratischen Ordnung in λ'

$$\mathcal{S}(\lambda') = \frac{1}{2u} \sum_{\omega_n} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \lambda'(-\mathbf{k}, -i\omega_n) \Pi(\mathbf{k}, i\omega_n) \lambda'(\mathbf{k}, i\omega_n), \qquad (5.45)$$

mit dem Polarisationsoperator

$$\Pi(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{u} \sum_{\omega'_n} \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2} \left(\tilde{K}G_0^<(\mathbf{k} + \mathbf{k}', i\omega_n + i\omega'_n)G_0^<(\mathbf{k}', i\omega'_n) + (1 - \tilde{K})G_0^>(\mathbf{k} + \mathbf{k}', i\omega_n + i\omega'_n)G_0^>(\mathbf{k}', i\omega'_n) \right)$$
(5.46)

Dieser Beitrag ist als Feynam
ngraph in Abbildung 19 dargestellt. Der Propagator des λ' F
eldes ist gegeben durch

$$\langle \lambda'(-\mathbf{k}, -\omega_n)\lambda'(\mathbf{k}, \omega_n) \rangle = \Pi(\mathbf{k}, i\omega_n)^{-1}.$$
 (5.47)

Wir definieren die Selbstenergien $G^<$ und $G^>$ über die Beziehungen

$$G^{<}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\mathbf{k}^2 + \omega_n^2 + m^2 + g + \Sigma^{<}(\mathbf{k}, i\omega_n)},$$
(5.48)

$$G^{>}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\mathbf{k}^2 + \omega_n^2 + m^2 + \Sigma^{>}(\mathbf{k}, i\omega_n)}.$$
(5.49)

In Abbildung 20 ist der einzig relevante Beitrag zu den Selbstenergien in Ordnung 1/N dargestellt. In dieser Ordnung sind die Selbstenergien gegeben durch

$$\Sigma^*(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{2}{Nu} \sum_{\omega'_n} \int \frac{d^2k'}{(2\pi)^2} \frac{G_0^*(\mathbf{k}' + \mathbf{k}, i\omega_n + i\omega'_n)}{\Pi(\mathbf{k}', i\omega'_n)},$$
(5.50)

 $\mathrm{mit} \, \ast \in \{<,>\}.$



Abbildung 20: Beitrag zur Selbstenergie in Ordnung $\frac{1}{N}$

Auch für die Masse ergibt sich eine Korrektur δm^2 in Ordnung 1/N dadurch, daß die zur Sattelpunktsgleichung äquivalente Bedingung $\mathbf{n}^2(\mathbf{x}, \tau) = 1$ auch nach Berücksichtigung der Selbstenergien noch erfüllt sein muß. Diese Massenkorrektur ist aber reel und hat in Ordnung 1/N keinen Einfluß auf den Imaginärteil von $G(\mathbf{k}', i\omega'_n)$, für den wir uns im Hinblick auf die Dämpfung primär interessieren.

5.3.3 Numerische Auswertung

Die numerische Auswertung konnte im Rahmen dieser Arbeit und der zur Verfügung stehenden Mittel nicht vollständig abgeschlossen werden. Hier sollen aber einige der Zwischenergbnisse dargestellt werden.

Zunächst zur Auswertung des Polarisationsoperators. Wir schreiben (5.46) um in

$$\Pi(\mathbf{k}, i\omega_n) = \tilde{K}\Pi^{<}(\mathbf{k}, i\omega_n) + (1 - \tilde{K})\Pi^{>}(\mathbf{k}, i\omega_n),$$
(5.51)

mit

$$\Pi^{*}(\mathbf{k}, i\omega_{n}) = \frac{1}{u} \sum_{\omega_{n}'} \int \frac{d^{2}k'}{(2\pi)^{2}} G_{0}^{*}(\mathbf{k} + \mathbf{k}', i\omega_{n} + i\omega_{n}') G_{0}^{*}(\mathbf{k}', i\omega_{n}').$$
(5.52)

Wir können uns auf die Berechnung von $\Pi^{>}$ beschränken, $\Pi^{<}$ erhält man aus $\Pi^{>}$ durch formales Ersetzen von m_0^2 durch $m_0^2 + g_0$.

Zur Bestimmung von $\Pi^>$ können die Methoden von Chubukov et al. [Chu94b] für den isotropen Fall angewendet werden. Um die Summation über die Matsubarafrequenzen ω'_n auszuführen, benutzen wir, daß die Bose-Funktion

$$n(z) = \frac{1}{\exp(\frac{z}{t}) - 1}$$
(5.53)

an den Stellen $z = i\omega_n$ Polstellen mit Residuum t hat. Die Summation über die ω_n läßt sich so in eine Integration umschreiben,

$$\Pi^{>}(\mathbf{k}, i\omega_{n}) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} d\omega' \int \frac{d^{2}k'}{(2\pi)^{2}} n(\omega') G_{0}^{>}(\mathbf{k} + \mathbf{k}', i\omega_{n} + \omega') G_{0}^{>}(\mathbf{k}', \omega'). \quad (5.54)$$



Abbildung 21: Integrationswege Γ, Γ' für die Berechnung des Polarisationsoperators $\Pi^>$

Der Integrationsweg Γ läuft dabei links und rechts der imagnären Achse (siehe Abbildung 21). Γ wird nun in den Integrationsweg Γ' mit $|\operatorname{Re} \omega'| \to \infty$ deformiert, wobei allerdings beachtet werden muß daß der Integrant in (5.54) neben den Polstellen auf der imaginären Achse noch die folgenden vier Polstellen aufweist:

$$\omega_{p1}' = \epsilon(\mathbf{k}), \qquad \qquad \omega_{p2}' = -\epsilon(\mathbf{k}), \qquad (5.55)$$

$$\omega_{p3}' = -i\omega_n + \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}'), \quad \omega_{p4}' = -i\omega_n - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}'), \quad (5.56)$$

 mit

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m_0^2}.$$
(5.57)

Das Integral über Γ' ist im Limes $|\operatorname{Re} \omega'| \to \infty$ durch die negative Summe der Residuen des Integranten in (5.54) an den vier Polstellen (5.55) gegeben. Nach

Partialbruchzerlegung der Residuen ergibt sich

$$\Pi^{>}(\mathbf{k}, i\omega_{n}) = \frac{1}{4} \int \frac{d^{2}k'}{(2\pi)^{2}\epsilon(\mathbf{k})\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}')} \\ \left(\left(n(\mathbf{k} + \mathbf{k}') - n(\mathbf{k}) \right) \left(\frac{1}{i\omega_{n} + \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}')} - \frac{1}{i\omega_{n} - \epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}')} \right) \right) \\ + \left(n(\mathbf{k} + \mathbf{k}') + n(\mathbf{k}) + 1 \right) \left(\frac{1}{i\omega_{n} + \epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}')} - \frac{1}{i\omega_{n} - \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}')} \right) \right),$$

$$(5.58)$$

 mit

$$n(\mathbf{k}) = n(\epsilon(\mathbf{k})). \tag{5.59}$$

Wir betrachten nun die analytische Fortsetzung von $\Pi^{>}$ durch $i\omega_n \to \omega + i\epsilon$. Für den Imaginärteil der Polarisation erhält man dann

$$\operatorname{Im} \Pi^{>}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{16\pi} \int \frac{d^{2}k'}{\epsilon(\mathbf{k})\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}')} \left(\left| n(\mathbf{k} + \mathbf{k}') - n(\mathbf{k}) \right| \delta\left(\omega - |\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}')|\right) + \left(n(\mathbf{k} + \mathbf{k}') + n(\mathbf{k}) + 1 \right) \delta\left(\omega - \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\right) \right).$$
(5.60)

Mit Hilfe der Deltafunktionen kann die Winkelintegration in (5.60) analytisch ausgeführt werden. Für die anschließende numerische Integration über $|\mathbf{k}'|$ ist es günstig durch geschickte Parametrisierung Singularitäten im Integranten zu vermeiden. Zunächst bemerken wir, daß bei fest vorgegebenem (\mathbf{k}, ω) nur eine der beiden Deltafunktionen in (5.60) einen Beitrag liefert. Wir unterscheiden daher

Fall a:
$$\omega < |\mathbf{k}| \qquad \Rightarrow \exists \mathbf{k}' : \omega - |\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}')| = 0, \qquad (5.61)$$

Fall b:
$$\omega > \sqrt{\mathbf{k}^2 + m_0^2} \Rightarrow \exists \mathbf{k}' : \omega - \epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}') = 0.$$
 (5.62)

Durch geometrische Überlegungen konnte folgende günstige Parametrisierung gefunden werden:

$$|\mathbf{k}'|^2 = \frac{\omega^2 - |\mathbf{k}|^2 - 4m_0^2}{4} + \begin{cases} (r \cosh \eta)^2 & \text{Fall a,} \\ (r \cos \eta)^2 & \text{Fall b,} \end{cases}$$
(5.63)

Real and Imaginary Part of Polarization



Abbildung 22: Realteil und Imaginärteil der Polarisation in Abhängigkeit von ω mit $m_0 = 0.4, t = 0.6$ und $|\mathbf{k}| = 1$.

wobei

$$r = \frac{|\mathbf{k}|^2}{2} \sqrt{1 + \frac{4m_0^2}{|\mathbf{k}|^2 - \omega^2}}.$$
 (5.64)

Hiermit läßt sich (5.60) in ein eindimensionales Integral ohne Singularitäten umschreiben:

Im
$$\Pi^{>}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{||\mathbf{k}|^{2} - \omega^{2}|}} \int_{0}^{L} d\eta P(\eta),$$
 (5.65)

 mit

$$L = \begin{cases} \infty & \text{Fall a,} \\ \frac{\pi}{2} & \text{Fall b,} \end{cases}$$
(5.66)

und

$$P(\eta) = \begin{cases} \left| \frac{1}{\exp(\frac{r}{t}\cosh\eta - \frac{\omega}{2t}) - 1} - \frac{1}{\exp(\frac{r}{t}\cosh\eta + \frac{\omega}{2t}) - 1} \right| & \text{Fall a,} \\ \frac{1}{\exp(\frac{r}{t}\cos\eta - \frac{\omega}{2t}) - 1} - \frac{1}{\exp(\frac{r}{t}\cos\eta + \frac{\omega}{2t}) - 1} \right| & \text{Fall b.} \end{cases}$$
(5.67)

Das eindimensionale Integral (5.65) wurde numerisch mit Hilfe eines adaptiven Integrationsalgorithmus der NAG-Library [The95] berechnet. In Abbildung 22 ist als repräsentatives Beispiel Im $\Pi^>(|\mathbf{k}| = 1, \omega)$ für $m_0 = 0.4$ und t = 0.6 dargestellt. Man erkennt dabei, daß Im $\Pi^>$ für $|\mathbf{k}| < \omega < \sqrt{\mathbf{k}^2 + m_0^2}$ verschwindet. Der unstetige Verlauf der Kurve ist auf die beiden Deltafunktionen in (5.60) zurückzuführen. Laut Chubukov et al. [Chu94a] handelt es sich dabei um ein Artefakt der ersten Ordnung der 1/N-Entwicklung. Bei einer selbstkonsistenten Behandlung sollte Im $\Pi^>$ einen stetigen Verlauf haben.

Mit Hilfe der Kramers-Kronig-Relation kann aus $\text{Im} \Pi^>$ der Realteil berechnet werden:

$$\operatorname{Re}\Pi^{>}(\mathbf{k},\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \mathcal{P}(\operatorname{Im}\Pi^{>}(\mathbf{k},\omega')\frac{1}{\omega-\omega'}).$$
(5.68)

Auch dieser Ausdruck wurde numerisch ausgewertet. Das Ergebnis ist ebenfalls in Abbildung 22 dargestellt. Auch hier erkennt man, wie schon bei Im $\Pi^>$, ein scheinbar unphysikalisches Verhalten für kleine ω .

Indem wir jetzt in $\Pi^>$ das m_0 durch $\sqrt{m_0^2 + g}$ ersetzen, erhalten wir $\Pi^<$ und damit aus (5.51) die allgemeine anisotrope Polarisation. Als repräsentatives Beispiel ist in den Abbildungen 23 und 24 die Wirkung der Anisotropie auf den Realteil und Imaginärteil von $\Pi(|\mathbf{k}| = 1, \omega)$ dargestellt. Zum Vergleich



Abbildung 23: Effekt der Anisotropie $g_0 = 0.3$ auf der Realteil der allgemeinen Polarisation in Abhängigkeit von ω mit $m_0 = 0.4$, t = 0.6, $|\mathbf{k}| = 1$ und $\tilde{K} = 2/5$. Die gestrichelte Kurve zeigt zum Vergleich den Fall ohne Anisotropie.

wurden jeweils auch die entsprechenden Kurven ohne Anisotropie eingezeichnet. Man erkennt dabei, daß durch die Anisotropie eine Unstetigkeitsstelle bei $\sqrt{m_0^2 + g + |\mathbf{k}|^2}$ in Im II erzeugt wird. In Re II entsteht an der selben Stelle ein Peak.

Wir wenden uns nun der Berechnung des Imaginärteils der Selbstenergie zu. Durch analytische Fortsetzung von (5.50) ergibt sich

$$\operatorname{Im} \Sigma^{>}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{N} \int \frac{d^{2}k'}{(2\pi)^{2}} \int_{0}^{\infty} d\omega' \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\Pi(\mathbf{k}',\omega')}\right) \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{k}')} \left(\left| n(\mathbf{k}+\mathbf{k}') - n(\omega') \right| \delta\left(\omega - \left|\epsilon(\omega') - \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\right| \right) + (1 + n(\mathbf{k}+\mathbf{k}') - n(\omega')) \delta\left(\omega - \epsilon(\omega') - \epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\right) \right).$$
(5.69)

Mit Hilfe der Deltafunktionen läßt sich eine der drei Integrationen in (5.69) analytisch behandeln. Die restlichen beiden Integrationen wurden numerisch ausgeführt. Das Ergebis ist für den isotropen Fall in Abbildung 25 dargestellt. Man erkennt dabei einen im wesentlichen parabelförmigen Verlauf mit einer Einbuchtung an der Stelle $\omega = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m_0^2}$.



Imaginary Part of Anisotropic Polarization

Abbildung 24: Effekt der Anisotropie $g_0 = 0.3$ auf der Imaginärteil der allgemeinen Polarisation in Abhängigkeit von ω mit $m_0 = 0.4$, t = 0.6, $|\mathbf{k}| = 1$ und $\tilde{K} = 2/5$.



Abbildung 25: Imaginärteil der Selbstenergie Im $\Sigma^{>}(\mathbf{k},\omega)$ in Abhängigkeit von ω für verschiedene \mathbf{k} mit $m_0 = 0.4$ und t = 0.6.



Abbildung 26: Imaginärteil des Propagators, Im $G^{>}(\mathbf{k}, \omega)$, unter Vernachlässigung von Re $\Sigma^{>}(\mathbf{k}, \omega)$ für verschiedene \mathbf{k} mit $m_0 = 0.4$ und t = 0.6.

Um den Realteil der Selbstenergie zu erhalten, können nach Chubukov et al. [Chu94a] mit dem Ansatz

Im
$$\Sigma^{>}(\mathbf{k},\omega) = -\alpha \operatorname{sgn}(\omega)(\omega^{2} - \mu_{1}(\mathbf{k})) + R(\mathbf{k},\omega)$$
 (5.70)

die Konstante α und die Funktionen $\mu_1(\mathbf{k})$ und $R(\mathbf{k}, \omega)$ berechnet werden. Der Realteil von $\Sigma^>$ ergibt sich dann aus der Summe der Kramers-Kronig-Transformation von $R(\mathbf{k}, \omega)$ und einem Term der sich aus der asymptotischen Entwicklung von $G^<$ für $\omega \to \infty$ ergibt. Nachdem $\Sigma^>$ bestimmt ist, erhält man $G^>$ durch Einsetzen in die Gleichung (5.49).

Die Berechnung von $G^{<}$ verläuft analog zur Berechnung von $G^{>}$, es muß lediglich in (5.69) als Dispersionsrelation

$$\epsilon(\mathbf{k})' = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m_0^2 + g_0}$$
 (5.71)

verwendet werden. Diese Rechnungen konnten aber aufgrund des großen numerischen Aufwandes im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt werden.

Mit (5.42) und (5.43) erhält man schließlich die Spinsuszeptibilität χ_s , mit der man durch (5.25) die Spinrelaxationsrate $1/T_1$ bestimmen kann.

Unter Vernachlässigung von Re $\Sigma^>$ ergibt sich

Im
$$G^{>} \approx -\frac{\operatorname{Im} \Sigma^{>}}{(\mathbf{k}^{2} - \omega_{n}^{2} + m_{0}^{2})^{2} + (\operatorname{Im} \Sigma^{>})^{2}}.$$
 (5.72)
In Abbildung 26 ist Im $G^>$ für den isotropen Fall dargestellt. Man bemerkt, daß in dieser Näherung bereits die charakteristischen Merkmale aus Abbildung 16 auftreten. Insbesondere verschwindet Im $G^>$ für endliche ω nicht, was auch nach der Berücksichtigung von Re $\Sigma^>$ noch der Fall sein wird. Dies hat wegen (5.25) zur Folge, daß auch $1/T_1$ nicht verschwindet.

Für quantitative Rechnungen unter Berücksichtigung der Anisotropie empfiehlt sich aufgrund des beträchtlichen numerischen Aufwandes der Einsatz von Parallelrechnern, worauf hier aber verzichtet wurde.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde das von Zhang zur Erklärung der Hochtemperatursupraleitung vorgeschlagene phänomenologische SO(5)-Modell [Zha97] untersucht. Dieses Modell geht davon aus, daß eine Symmetrie zwischen Antiferromagnetismus und Supraleitung besteht und die daraus resultierende Dynamik durch ein SO(5)-Nichtlineares-Sigma-Modell (SO(5)-NLSM) beschrieben werden kann.

Um das experimentelle Verhalten der Supraleiter richtig zu modellieren, werden anisotrope Terme eingeführt, die die ursprüngliche SO(5)-Symmetrie teilweise brechen. In dieser Arbeit haben wir uns auf den einfachsten Fall beschränkt, daß die Anisotropie durch ein äußeres effektives Potential verwirklicht wird, dessen Stärke von der Dotierung abhängt.

Für diesen Fall konnten die RG-Gleichungen analytisch abgeleitet werden. Die dabei gefundenen Gleichungen gelten nicht nur für den Spezialfall des SO(5)-Modells, sondern für ein allgemeines O(N)-NLSM in $2 + \epsilon$ -Dimensionen und einem Potential, das quadratisch an K Komponenten des Spinraumes ankoppelt.

Bei der Anwendung der RG-Gleichungen auf das SO(5)-Modell haben wir den klassischen Grenzfall und das Verhalten bei T = 0 näher untersucht. Dabei wurden jeweils die Phasengrenzen zwischen antiferromagnetischer, supraleitender und ungeordneter Phase bestimmt und die kritischen Punkte identifiziert. Anhand dieser Grenzfälle wurden verschiedene Cross-Over-Szenarien diskutiert. Dabei wurde ein unterschiedliches Verhalten in Abhängikeit des Vorzeichens der Anisotropie g festgestellt. Im Fall g > 0, d.h. für die antiferromagnetische Phase, besteht die Möglichkeit eines Zwischenregimes zwischen klassischem Grenzfall und Tieftemperaturverhalten, welches für g < 0, also in der supraleitenden Phase, nicht vorkommt. Durch numerische Integration der RG-Gleichungen wurde das Phasendiagramm auch quantitativ bestimmt. Dabei wird allerdings nicht berücksichtigt, daß die kritische Temperatur der supraleitenden Phase durch das Absinken von T_{MF} stark unterdrückt wird. Ein direkter Vergleich mit den Experimenten ist daher nicht möglich.

Weiterhin wurde in dieser Arbeit die 1/N-Entwicklung auf das SO(5)-Modell angewendet. Die Sattelpunktsgleichung wurde für $N = \infty$ abgeleitet. Bei der numerischen Lösung der Sattelpunktsgleichung wurde eine zunehmende Aufspaltung der beiden Massenparameter mit wachsender Anisotropie gefunden. Die 1/N-Entwicklung sollte auch zur Bestimmung der NMR-Relaxationsrate $1/T_1$ verwendet werden. Zu diesem Zweck wurden analytische Ausdrücke für die Polarisation und die Spinsuszeptibilität abgeleitet. Die numerische Auswertung dieser Ausdrücke konnte im Rahmen der Diplomarbeit aber nicht mehr vollständig durchgeführt werden.

In dieser Arbeit wurden die Techniken der Renormierungsgruppe und der 1/N-

Entwicklung für den anisotropen Fall analytisch soweit entwickelt, um daraus erste qualitative Schlußfolgerungen ziehen zu können. Für einen quantitativen Vergleich mit den experimentellen Daten reichen die bisherigen Ergebnisse aber noch nicht aus. Als Ansatzpunkt für zukünftige Untersuchungen bietet sich daher vor allem eine ausgiebigere numerische Untersuchung der abgeleiteten Ausdrücke an. Mit Hilfe eines Parallelrechners konnten Chubukov et al. [Chu94a] die Relaxationsrate $1/T_1$ für das isotrope O(3)-NLSM bestimmen. Prinzipiell sollten sich die von ihnen verwendeten Methoden auch für den anisotropen Fall verwenden lassen. Weiterhin kann mit Hilfe numerischer Rechnungen das Cross-Over-Verhalten der Renormierungsgruppengleichungen näher untersucht werden. Insbesondere das Verhalten des Systems im Zwischenregime ist noch nicht geklärt. Ebenso ist bisher noch nicht verstanden, wie das Abfallen von T_{MF} bei starker Dotierung konsistent in der Rechnung berücksicht werden kann.

Abbildungsverzeichnis

1	T_c -Rekorde	8
2	Struktur von $La_{2-x}Sr_xCuO_4$	9
3	Phasendiagramm $La_{2-x}Sr_xCuO_4$	10
4	$d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Symmetrie	12
5	Skizze des Pseudogapverhaltens für ρ_{ab}	13
6	Antiferromagnetische Magnetisierung in der Molekularfeldtheorie	16
7	Phasendiagramm mit quantenkritischem Punkt	22
8	Graphen, die zur Renormierung des Propagators beitragen	34
9	Renormierungsgruppen-Fluß im klassischen Grenzfall für $\epsilon=1$.	41
10	Renormierungsgruppen-Fluß im klassischen Grenzfall für $\epsilon=0$.	43
11	Renormierungsgruppen-Fluß für $t = 0$ und $\epsilon = 0$	44
12	Schematisches Cross-Over Diagramm des $SO(5)$ -Modells	47
13	Phasengrenzen des $SO(5)$ -Models	47
14	Phasendiagramm des $SO(5)$ -Models für $c = 1$	48
15	$Phase ndiagramm \ des \ isotropen \ nichtlinearen \ Sigmamodells \ . \ .$	55
16	$\chi_s({f k},\omega)''$ im quantenkritischen Bereich \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	56
17	Einfluß der Anisotropie bei $c < c_c$	60
18	Einfluß der Anisotropie bei $c > c_c$	61
19	Beitrag zum Polarisations operator Π $\ .$	61
20	Beitrag zur Selbstenergie in Ordnung $\frac{1}{N}$	63
21	Integrationswege für die Berechnung des Polarisationsoperators .	64
22	Real und Imaginärteil der Polarisation	66
23	Realteil der anisotropen Polarisation	68
24	Imaginärteil der anisotropen Polarisation	69
25	Imaginärteil der Selbstenergie	69
26	Imaginärteil des Propagators	70

Literatur

- [Ami84] D. J. Amit. Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena. (World Scientific Publishing, 2. Auflage, 1984).
- [And87] P W Anderson. The Resonating Valence Bound State in La_2CuO_4 and Superconductivity. Science **235**, 1196 (1987).
- [And97] P. W. Anderson und G. Bakaran. A Critique of "A Critique of two Metals". cond-mat/9711197 (1997).
- [Aue94] Assa Auerbach. Interacting Electrons and Quantum Magnetism. (Springer, New York, 1994).
- [Bar57] J. Bardeen, L. N. Cooper und J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [Bas97] G. Baskaran und P. W. Anderson. On the SO(5) unification attempt for the cuprates. cond-mat/9706076 (1997).
- [Bed86] J. G. Bednorz und K. A. Müller. Possible High T_c -Superconductivity in the Ba-La-Cu-O System. Z. Phys. B Condensed Matter **64**, 189–193 (1986).
- [Bed90] K. S. Bedell et al., Hrsg. High temperature superconductivity proceedings, The Los Alamos symposium 1989. (Addison Wesley, 1990).
- [Bed94] K. S. Bedell et al., Hrsg. Strongly correlated electronic materials, The Los Alamos symposium 1993. (Addison Wesley, 1994).
- [Cha89] S. Chakravarty, B. L. Halperin und D. R. Nelson. Twodimensional quantum Heisenberg antiferromagnet at low temperatures. Phys. Rev. B 39, 2344 (1989).
- [Chu94a] A. V. Chubukov, S. Sachdev und A. Sokol. Universal Behavior of the spin-echo decay rate in La_2CuO_4 . Phys. Rev. B **49**, 9052 (1994).
- [Chu94b] A. V. Chubukov, S. Sachdev und J. Ye. Theory of two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets with a nearly critical ground state. Phys. Rev. B 49, 11919 (1994).
- [Dem95] E. Demler und S. C. Zhang. Theory of the Resonant Neutron Scattering of High T_c Superconductors. Phys. Rev. Lett. **75**, 4126 (1995).
- [Dem97a] E. Demler et al. Proximity Effect and Josephson Coupling in the SO(5) Theory of the High- T_c Superconductivity. cond-mat/9707030 (1997).

- [Dem97b] E. Demler, S. C. Zhang, S. Meixner und W. Hanke. Response to Greiter's Comment. cond-mat/9705191 (1997).
- [Duf98] D. Duffy, S. Haas und E. Kim. From the Hubbard to the SO(5) Ladder: A Numerical Study. cond-mat/9804221 (1998).
- [Ede98] R. Eder et al. Dynamics of an SO(5)-symmetric ladder model. condmat/9805120 (1998).
- [Eul48] L. Euler. Introductio in analysin infinitorum. (, Lausanne, 1748).
- [Fra91] E. Fradkin. Field Theories of Condensed Matter Systems, Band no. 82 von Frontiers in Physics. (Addison-Wesley, 1991).
- [Gin96] D. M. Ginsberg, Hrsg. Physical Properties of High Temperature Superconductors I - V. (World Scientific, Singapore, 1989-1996).
- [Gon95] J. González, M. A. Martín-Delgado, G. Sierra und A. H. Vozmediano. Quantum Electron Liquids and High-T_c Superconductivity, Band m 38 von Lecture Notes in Physics. (Springer-Verlag, 1995).
- [Gre97] M. Greiter. Is the π -particle responsible for the 41 meV peak in $YBa_2Cu_3O_7\Gamma$ cond-mat/9705049 (1997).
- [Hal83] F. D. M. Haldane. Continuum Dynamics of the 1-D Heisenberg Antiferromagnet: Identification with the O(3) Nonlinear Sigma Model. Phys. Lett. **A93**, 464 (1983).
- [Han98] W. Hanke, R. Eder und E. Arrigoni. SO(5)-Theorie der Hochtemperatur-Supraleitung: ein neues Symmetriekonzept der Festkörperphysik. Phys. Bl. 54, 436 (1998).
- [Her77] J. A. Hertz. Quantum critical phenomena. Phys. Rev. B 14, 525 (1977).
- [Hoh67] P. C. Hohenberg. Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions. Phys. Rev. 158, 383 (1967).
- [Hub63] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. Proc. R. Soc. London A276, 238 (1963).
- [Jos62] B. D. Josephson. Possible New Effects in Superconductive Tunnelling. Phys. Lett. 1, 251 (1962).
- [Kad66] L. P. Kadanoff. Physics 2, 263 (1966).
- [Kit88] C. Kittel und C. Y. Fong. Quantentheorie der Festkörper. (Oldenburg, 2. Auflage, 1988).

- [Kno23] K. Knopp. Theorie und Anwendung der unendlichen Reihen, Band 2 von Die Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen. (Springer, 2. Auflage, 1923).
- [Lan88] L. D. Landau und E. M. Lifschitz. Quantenmechanik, Band 3 von Lehrbuch der Theoretischen Physik. (Akademie Verlag, 8. Auflage, 1988).
- [Lau88] R. B. Laughlin. The Relationship Between High-Temperature Superconductivity and the Fractional Quantum Hall Effect. Science 242, 525 (1988).
- [Lau97] R. B. Laughlin. A Critique of Two Metals. cond-mat/9709195 (1997).
- [Ma76] S. K. Ma. Modern Theory of Critical Phenomena, Band 46 von Frontiers in Physics. (W.A. Benjamin, 1976).
- [Map98] M. B. Maple. High Temperature Superconductivity. condmat/9802202 (1998).
- [Mei97] S. Meixner, W. Hanke, E. Demler und S. C. Zhang. Finite-Size Studies on the SO(5) Symmetry of the Hubbard Model. cond-mat/9701217 (1997).
- [Mer66] N. D. Mermin und H. Wagner. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. Phys. Rev. Lett. 17, 1133 (1966).
- [Moo93] H. A. Mook et al. Polarized Neutron Determination of the Magnetic Excitations in $YBa_2Cu_3O_7$. Phys. Rev. Lett. **70**, 3490 (1993).
- [Mor63] T. Moriya. J. Phys. Soc. Jpn. 18, 516 (1963).
- [Nel77] D. R. Nelson und A. Pelcovits. Momentum-shell recursion relations, anisotropic spins and liquid crystals in $2 + \epsilon$ dimensions. Physical Review B **16**, 2191 (1977).
- [Pat96] R. K. Pathria. Statistical Mechanics. (Butterworth-Heinemann, 2. Auflage, 1996).
- [Pau49] W. Pauli und F. Villars. On the Invariant Regularization in Relativistic Quantum Theory. Rev. Mod. Phys. 21, 434 (1949).
- [Pol75] A. M. Polyakov. Interaction of Goldstone Particles in two Dimensions. Applications to Ferromagnets and Massive Yang-Mills Fields. Phys. Lett. 59b, 79 (1975).

- [Pol87] A. M. Polyakov. Gauge Fields and Strings. Contemporary Concepts in Physics. (Harwood Academic Publishers, 1987).
- [Put93] S. N. Putilin, E. V. Antipov, O. Chmaissem und M. Marezio. Nature 362, 226 (1993).
- [Rea83] N. Read und D. M. Newns. On the solution of the Coqblin-Schrieffer Hamiltonian by the large-N expansion technique. Solid State Phys. 16, 3273 (1983).
- [Sac93] S. Sachdev. Quantum antiferromagnets in two dimensions. In Proceedings of the Trieste Summer School 1992, World Scientific, 1993. Lecture presented at the summer course on "Low Dimensional Quantum Field Theories for Condensed Matter Physicists", 1992, Trieste, Italy.
- [Sch64] J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. (W.A. Benjamin, 1964).
- [Sch88] J. R. Schrieffer, X. G. Wen und S. C. Zhang. Dynamic spin fluctuations and the bag mechanism of high- T_c superconductivity. Phys. Rev. B **39**, 11663 (1988).
- [Sin89] R. R. P Singh. Thermodynamic parameters of the T = 0, spin-1/2 square-lattice Heisenberg antiferromagnet. Phys. Rev. B **39**, 9760 (1989).
- [Sli94] C.P. Slichter. Experimental Evidence for Spin Fluctuations in High Temperature Superconductors. In Bedell et al. [Bed94].
- [Sta95] B. Stadlober et al. Is $Nd_{2-x}Ce_xCuO4$ a High-Temperature Superconductor. Phys. Rev. Lett. **74**, 4911 (1995).
- [The95] The Numerical Algorithm Group. NAG C Library, Mark 3, 1995.
- [Tsv95] A. M. Tsvelik. Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics. (Cambridge University Press, 1995).
- [Wie94] U. J. Wiese und H. P. Ying. A determination of the low energy parameters of the 2-d Heisenberg antiferromagnet. Z. Phys. B 93, 147 (1994).
- [Wil70] K. G. Wilson. Model of Coupling-Constant Renormalization. Phys. Rev. D 2, 1438 (1970).
- [Zha88] F. C. Zhang und T. M. Rice. Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides. Phys. Rev. B 37, 3759 (1988).

[Zha97] S. C. Zhang. A Unified Theory Based on SO(5) Symmetry of Superconductivity and Antiferromagnetism. Science **275**, 1089 (1997).

Danksagung

An erster Stelle möchte ich Professor Monien dafür danken, daß er mir dieses sehr interessante und aktuelle Diplomarbeitsthema angeboten hat. Auf seine kompetente Betreuung konnte ich mich jederzeit verlassen. Professor von Gehlen danke ich für die Übernahme des Korreferats.

Weiterhin möchte ich mich bei der gesamten Arbeitsgruppe Monien für das positive Arbeitsklima bedanken. Marion Linn und Christian Ritter danke ich für die angenehme Zeit im gemeinsamen Arbeitszimmer.

Mein besonderer Dank gilt meiner Familie, ohne deren Unterstützung mein Studium nicht möglich gewesen wäre.