25.e Diagonalisierung

Für diese 45 Möglichkeiten kann man sich numerisch die Matrizen $V_{k,q}$ und die Entropiefaktoren f_k berechnen und hat dann die Eigenwerte zu untersuchen, das heißt man bestimmt die Eigenwerte von $\frac{U}{t}A + (\frac{U}{t})^2 B + 1$. Sobald einer negativ wird, wird das System instabil. Man beachte, dass f, A und B nur von T/t abhängen. Daher bestimmt man für festes T/t den kritischen Eigenwert $(U/t)_{\rm c}$, für den erstmals ein Eigenwert 0 wird.

Falls die Gittersymmetrie nicht s_+ ist oder $Q = -1$, dann verschwindet der Beitrag aus A und man bestimmt dann den niedrigsten Eigenwert λ von B und erhält das zugehörige $(U/t)_{\rm c} = 1/\sqrt{-\lambda}$.

Wir geben unten die berechneten Instabilitäten an. Wir müssen sie auch interpretieren. Das Auftreten der Instabilitäten bedeutet, dass das System in einen Zustand niedrigerer freier Energie kommt, indem es den symmetrischen Zustand verlässt und in einen übergeht, für den ν oder Δ verschieden von 0 ist. Gäbe es nur die betrachteten quadratischen Terme in der freien Energie, dann würden ν oder Δ beliebig groß werden. Tatsächlich gibt es Terme höherer Ordnung in der Entropie, die wir nicht berechnet haben, die aber dafür sorgen, dass ν und Δ endlich bleiben. Wir setzen nun die Erwartungswerte von ν und Δ ein und gehen zu der sich daraus ergebenden neuen Normal-Ordnung über. Dann erhalten wir zum Beispiel aus dem $V_{\rm B}$-Term von (23.23)

$$\frac{1}{2V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_{\rm B}(\mathbf{k},\mathbf{q}) : (\Delta^*_{\mathbf{k}s,-\mathbf{k}s'} + c^\dagger_{\mathbf{k}s} c^\dagger_{-\mathbf{k}s'})(\Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} + c_{-\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{q}s}) : \tag{25.48}$$

Summieren wir nun

$$\begin{aligned} \frac{1}{2V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{q}} V_{\rm B}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \Delta_{\mathbf{q}s,-\mathbf{q}s'} &= \epsilon_{ss'} \frac{1}{2V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{q}} V_{\rm B}(\mathbf{q},\mathbf{k}) \Delta^{\rm s}_{\mathbf{q}} + \sum_\alpha e^\alpha (\epsilon\sigma^\alpha)_{s,s'} \frac{1}{2V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{q}} V_{\rm B}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \Delta^{\rm t}_{\mathbf{q}} \\ &= \hat{V}^{\rm s}_{\rm B}(\mathbf{k}) \epsilon_{ss'} + \hat{V}^{\rm t\alpha}_{\rm B}(\mathbf{k}) (\epsilon\sigma)_{ss'} \end{aligned} \tag{25.49}$$

mit

$$\sigma = \sum_\alpha e^\alpha \sigma^\alpha. \tag{25.50}$$

Dabei ist $\mathbf{e}$ ein Einheitsvektor. Es kommt hier zum Ausdruck, dass alle Komponenten des Tripletts entartet sind, so dass man eine beliebige Überlagerung haben kann. Dann bleibt schließlich außer einer Konstanten, die die Energieabsenkung beschreibt und Termen $: c^\dagger c^\dagger c c :$ in der neuen Normal-Ordnung

$$\sum_{\mathbf{k},s,s'} (\hat{V}^{\rm s}_{\rm B}(\mathbf{k}) \epsilon_{ss'} + \sum_\alpha \hat{V}^{\rm t\alpha}_{\rm B}(\mathbf{k}) (\epsilon\sigma)_{ss'}) : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c^\dagger_{-\mathbf{k}s'} : \tag{25.51}$$

Ähnliches gilt für die anderen Kanäle. Wir geben das Verfahren noch explizit für $V_{\rm H}$ und $V_{\rm F}$ an. Aus

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_{\rm H}(\mathbf{k},\mathbf{q}) : (\nu^*_{\mathbf{k}s,\mathbf{k}s} + c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s})(\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s'} + c^\dagger_{\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{q}s'}) : \\ - & \frac{1}{2V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s,s'} V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q}) : (\nu^*_{\mathbf{k}s',\mathbf{k}s} + c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s'})(\nu_{\mathbf{q}s',\mathbf{q}s} + c^\dagger_{\mathbf{q}s'} c_{\mathbf{q}s}) : \end{aligned} \tag{25.52}$$

erhalten wir die folgenden Beiträge $: c^\dagger c :$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s} (2V_{\rm H}(\mathbf{k},\mathbf{q}) - V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q})) \nu^{\rm s}_{\mathbf{q}} c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} - \frac{1}{V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{k},s,s',\alpha} V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu^{\rm t\alpha}_{\mathbf{q}} c^\dagger_{\mathbf{k}s} \sigma^\alpha_{ss'} c_{\mathbf{k}s'} \\ = & \sum_{\mathbf{k},s} \hat{V}^{\rm s}(k) c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} + \sum_{\mathbf{k},s} \hat{V}^{\rm t}(\mathbf{k}) c^\dagger_{\mathbf{k}s} \sigma_{ss'} c_{\mathbf{k}s'} \end{aligned} \tag{25.53}$$

mit

$$\hat{V}^{\rm s}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{q}} (2V_{\rm H}(\mathbf{k},\mathbf{q}) - V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q})) \nu^{\rm s}_{\mathbf{q}}, \tag{25.54}$$

$$\hat{V}^{\rm t}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{V_{\rm P}} \sum_{\mathbf{q}} V_{\rm F}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \nu^{\rm t}_{\mathbf{q}}. \tag{25.55}$$

Auch hier verwenden wir die Entartung des Tripletts.

Betrachten wir jetzt noch die Gittersymmetrie. Die Funktionen ν und Δ sind danch klassifiziert. Wegen der Invarianz von $V(\mathbf{k},\mathbf{q})$ unter den Symmetrie-Operationen, sind auch die neuen Funktionen $\hat{V}_{\mathrm{B}}(\mathbf{k})$, $\hat{V}^{\mathrm{s}}(\mathbf{k})$ und $\hat{V}^{\mathrm{t}}(\mathbf{k})$ danach zu klassifizieren. Wir geben nun die Funktionen mit den niedrigsten Fourier-Komponenten an

$$\begin{array}{r|c} s_+ & 1,\, \cos(k_xa)+\cos(k_ya) \\ s_- = g & \sin(k_xa)\sin(k_ya)(\cos(k_xa)-\cos(k_ya)) \\ d_+ & \cos(k_xa)-\cos(k_ya) \\ d_- & \sin(k_xa)\sin(k_ya) \\ p & \sin(k_xa),\, \sin(k_ya) \end{array} \tag{25.56}$$

Bei halber Füllung ist an der Fermikante $\cos(k_xa)+\cos(k_ya)=0$. Die zweite angegebene Funktion für s_+, die auch mit s^* bezeichnet wird, hat daher einen Knoten an der Fermikante. Sie ist aber nicht von der Abstoßung betroffen, das heißt der abstoßende Beitrag in erster Ordnung in U wirkt sich für diese Funktion nicht aus. Daher wurde auch sie als Kandidat für die Supraleitung diskutiert.

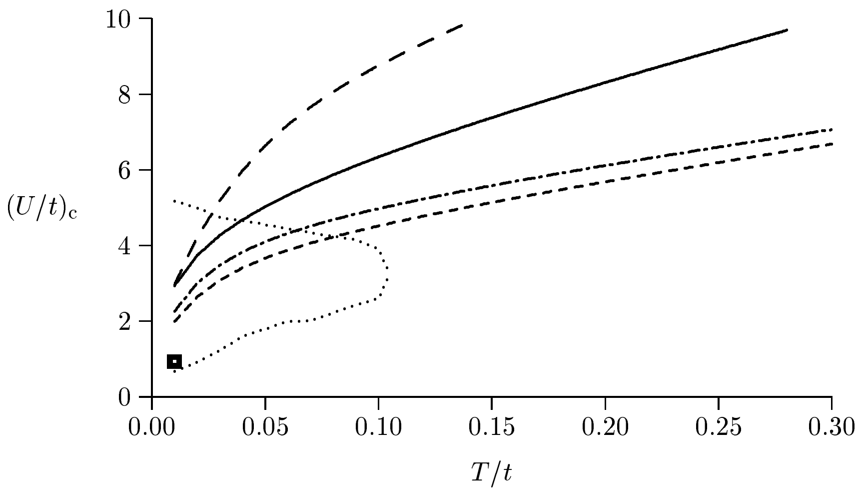
Für V_{A}, V_{C} und V_{Y} müssen wir noch zwischen $Q=+1$ und $Q=-1$ unterscheiden. Dann sind die Funktionen mit den niedrigsten Fourier-Komponenten

$$\begin{array}{r|cc} & Q=+1 & Q=-1 \\ \hline s_+ & 1 & \cos(k_xa)+\cos(k_ya) \\ s_- = g & \sin(k_xa)\sin(k_ya)(\cos(2k_xa)-\cos(2k_ya)) & \sin(k_xa)\sin(k_ya)(\cos(k_xa)-\cos(k_ya)) \\ d_+ & \cos(2k_xa)-\cos(2k_ya) & \cos(k_xa)-\cos(k_ya) \\ d_- & \sin(k_xa)\sin(k_ya) & \sin(2k_xa)\sin(k_ya)+\sin(k_xa)\sin(2k_ya) \\ p & \sin(2k_xa),\, \sin(2k_ya) & \sin(k_xa),\, \sin(k_ya) \end{array} \tag{25.57}$$

25.f Ergebnisse

	channel	line pattern
Antiferromagnetism	*ph tr* q_+ s_+	....
Pomeranchuk instability	*ph si* 0 d_+	- - - - - - - -
Band splitting	*ph si* q_- p	-·-·-·-·-·-
Superconductivity	*pp si* 0 d_+	———
Flux phases	*ph si/tr* q_- d_+	. . . .
Pomeranchuk instability	*ph si* 0 $s_-=g$	— — — —

In den Figuren (auch farbig erhältlich) zeigen wir die kritischen Werte der niedrigsten $(U/t)_{\mathrm{c}}$ als Funktion von T/t für zwei verschiedene Werte von μ/t. Zunächst sind in der Tabelle die wichtigsten auftretenden Instabilitäten angegeben. In der zweiten Reihe charakterisieren wir die Instabilitäten: *ph* steht für Teilchen-Loch (particle-hole), *pp* für Teilchen-Teilchen (particle-particle) *si* für Singulett, *tr* für Triplett, $q_\pm$ für $Q=\pm 1$, sonst 0.



Antiferromagnetismus Bei $\mu = 0$ (halbe Füllung) ist die niedrigste Instabilität die antiferromagnetische. Es stellt sich allerdings heraus, dass der Beitrag in zweiter Ordnung in U den Antiferromagnetismus unterdrückt. Das ist im Einklang damit, dass für große U die antiferromagnetische Kopplung wieder abnimmt. Wenn wir die halbe Füllung verlassen, wird der Antiferromagnetismus schwächer und verschwindet schließlich.

Die nächste Instabilität ist eine Pomeranchuk-d_+-Wellen-Instabilität. Sie ergibt einen die tetragonale Symmetrie brechenden Beitrag

$$2m \sum_{\mathbf{k},s} (\cos(k_x a) - cos(k_y a)) c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} = m \sum_{\mathbf{R},s} (c^\dagger_s(\mathbf{R}+\mathbf{a}_x) + c^\dagger_s(\mathbf{R}-\mathbf{a}_x) - c^\dagger_s(\mathbf{R}+\mathbf{a}_y) - c^\dagger_s(\mathbf{R}-\mathbf{a}_y)) c_s(\mathbf{R}). \tag{25.58}$$

Pomeranchuk-Instabilität und Verzerrung Diese Instabilität führt dazu, dass die Fermikante ihre tetragonale Symmetrie verliert und in einer Richtung ausgebuchtet wird. m kann ein beliebiges Vorzeichen haben und wächst betragsmäßig von T_c ab mit fallender Temperatur an. Dem entspricht bei Kopplung an das Gitter eine rhomboedrische Verzerrung und zwar eine rechteckige, die auch tatsächlich in einer Reihe von Hochtemperatur-Supraleitern gefunden wird.

Die damit verknüpfte Verzerrung kann man folgendermaßen verstehen: Die Hüpfmatrix-Elemente hängen vom Abstand der Atome ab, verändern sich also bei Verzerrung. Das führt zu einer Kopplung

$$\begin{aligned} & -(t - \tilde{t}\frac{\partial u_x}{\partial x}) \sum_{\mathbf{R}} (c^\dagger(\mathbf{R}+\mathbf{a}_x) + c^\dagger(\mathbf{R}-\mathbf{a}_x)) c(\mathbf{R}) + (x \to y) \\ = & -2(t - \tilde{t}\frac{\partial u_x}{\partial x}) \sum_{\mathbf{k}} \cos(k_x a) c^\dagger_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + (x \to y) \end{aligned} \tag{25.59}$$

Dabei beschreibt $\frac{\partial u_x}{\partial x}$ die verzerrung in x-Richtung. Mit dem Erwartungswert

$$A_x = \sum_{\mathbf{k}} \cos(k_x a) \langle c^\dagger_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \rangle \tag{25.60}$$

und analog für A_y erhält die freie Energie nun die Form

$$F = F_0(A_x, A_y) + 2\tilde{t}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}A_x + \frac{\partial u_y}{\partial y}A_y\right) + \frac{1}{2}C\left(\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)^2\right) \tag{25.61}$$

Dabei ist F_0 der Beitrag zur freien Energie des Hubbard-Modells ohne Ankopplung an die Verzerrungen. Der letzte Beitrag ist (in vereinfachter Form) die Elasitizitäts-Energie des Gitters. Wir müssen nun das Minimum der freien Energie aufsuchen. Bezüglich der Verzerrung führt das auf

$$\frac{\partial F}{\partial \frac{\partial u_x}{\partial x}} = 2\tilde{t}A_x + C\frac{\partial u_x}{\partial x} = 0, \tag{25.62}$$

was auf die Verzerrung

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = -\frac{2\tilde{t}}{C}A_x, \tag{25.63}$$

analog für $\partial u_y/\partial y$ führt. Da die Instabilität von d_+-Symmetrie ist, folgt $A_y = -A_x$ und damit $\partial u_y/\partial y = -\partial u_x/\partial x$.

p-Wellen-Instabilität Als nächstes folgt eine Teilchen-Loch-Instabilität, die zu einem Beitrag

$$\sum_{\mathbf{k},s} \mathrm{i}(m_x \sin(k_x a) + m_y \sin(k_y a)) c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} c_{\mathbf{k}s} \tag{25.64}$$

führt. Das ergibt dann Einteilchen-Eigenwerte

$$\hat{\epsilon}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + (m_x \sin(k_x a) + m_y \sin(k_y a))^2}, \tag{25.65}$$

was eine Aufspaltung in zwei Bänder beschreibt, die allerdings an den beiden Stellen $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$ und $m_x \sin(k_x a) + m_y \sin(k_y a) = 0$ zusammenhängen.

Supraleitungs-Instabilität Dieser schließt sich dann erst die Supraleitungs-Instabilität mit $d_{x^2-y^2}$-Symmetrie an, die allerdings wesentlich stärker als die anderen supraleitenden Instabilitäten ist. Die zugehörigen größten und kleinsten Eigenwerte λ bei halber Füllung multipliziert mit 100 sind in der folgenden Tabelle angegeben.

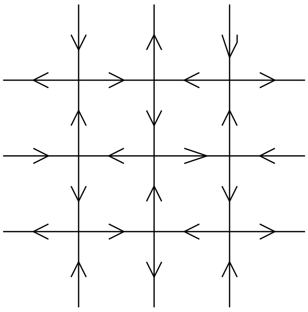
Symmetrie	$T = 0.1t$	$T = 0.03t$
s_+	12.51 ...-0.10	25.90 ...-0.39
$s_- = g$	0.00 ...-0.71	0.00 ...-1.75
d_+	0.01 ...-2.49	0.01 ...-5.49
d_-	0.69 ...-0.04	2.36 ...-0.06
p	1.35 ...-0.32	2.74 ...-0.97

Dabei ist nur der Beitrag zweiter Ordnung für s_+ berücksichtigt. Daraus ergeben sich kritische $(U/t)_c = 6.34$ für $T = 0.1t$ und 4.27 für $T = 0.03t$.

Flussphasen-Instabilität Es folgt die sogenannte Flussphasen-Instabilität, die von verschiedenen Autoren (Kotliar, Affleck und Marston, Chakravarty) diskutiert wurde. (Für $\mu = 0$ ist sie mit der d_+-Supraleitungs-Instabilität entartet.) Für diese erhält man einen Beitrag zur Einteilchen-Energie

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{i}(\cos(k_x a) - \cos(k_y a)) c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0} c_{\mathbf{k}} = -\frac{\mathrm{i}}{2} \sum_{\mathbf{R}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}} (c^\dagger_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_x} + c^\dagger_{\mathbf{R}-\mathbf{a}_x} - c^\dagger_{\mathbf{R}+\mathbf{a}_y} - c^\dagger_{\mathbf{R}-\mathbf{a}_y}) c_{\mathbf{R}}. \qquad (25.66)$$

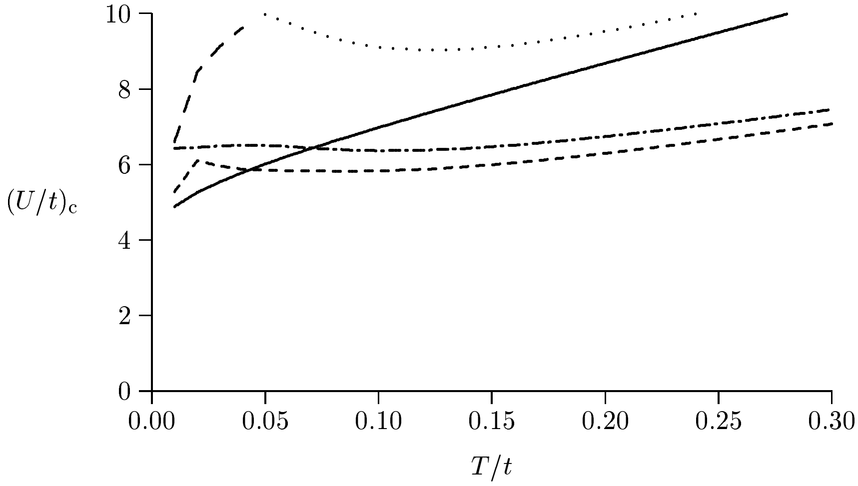
Wir können diesen imaginären Beitrag zum Hüpf-Matrix-Element dadurch veranschaulichen, dass wir jeweils einen Pfeil auf der Kante (link) zwischen den Nachbarpunkten in der Richtung einzeichnen, in der der Imaginärteil positiv ist. In Gegenrichtung ist er dann wegen der Hermitezität negativ.



Man sieht, dass auf dem Weg um eine Quadrat (Plaquette) alle Imaginärteile das gleiche Vorzeichen haben. Dies kann nicht weggeeicht werden. Vielmehr ist die Summe der Phasen invariant. Sie kann auch durch einen entsprechenden magnetischen Fluss durch das Quadrat erzeugt werden. Daher spricht man von einer Flussphase. Durch diese Störung entsteht ebenfalls eine Aufspaltung in zwei Bänder, die energetisch günstig ist.

Als nächstes kommt eine **g-Wellen-Pomeranchuk-Instabilität**.

Wir haben hier die Instabilitäten in der Reihenfolge ihrer Stärke aufgezählt. Zu beachten bleibt, dass eine Symmetriebrechung häufig andere unterdrückt, so dass sich die stärkste auswirkt. In wieweit die anderen ebenfalls auftreten, müsste separat untersucht werden.



Schließlich zeigen wir noch das Ergebnis für $\mu/t = 1/4$, was einer Dotierung $x = 0.1159$ bis $x = 0.1030$ entspricht. Die antiferromagnetische Instabilität ist völlig verschwunden. Es sei noch darauf hingewiesen, dass die Ergebnisse bei tiefen Temperaturen ($T/t < 0.05$) mit Unsicherheiten verbunden sind. Dies wird gegenwärtig verbessert.