

Institut für Theoretische Physik
Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
Technische Universität Dresden

Ladungsanregungen im ungeordneten t-t'-t''-J-Modell

Dissertation
zur Erlangung des
akademischen Grades
Doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt von
Christian Kühnert
geboren am 19. April 1974 in Mittweida

Dresden 2008

Eingereicht am

1. Gutachter: _____

2. Gutachter: _____

3. Gutachter: _____

Verteidigt am _____

Kurzfassung

Für die theoretische Beschreibung verschiedener Substanzen, so z.B. für diverse Kuprate die Anwendungen als Hochtemperatur-Supraleiter finden, spielt das t - J -Modell eine wichtige Rolle. In vielen Fällen kann man Abweichungen der Verbindungen vom idealen translationsinvarianten Festkörper vernachlässigen, für bestimmte Eigenschaften ist jedoch der Einfluß von Störstellen, z.B. Dotieratomen, bedeutsam. Um solche Verunreinigungen einzubeziehen, behandelt die vorliegende Arbeit das t - J -Modell mit einer zusätzlichen on-site-Energie mit über die Gitterplätze zufallsverteilten Werten. Um für dieses Modell die Einteilchen-Greensfunktion zu bestimmen, wird ein Verfahren entwickelt, welches auf der Projektionstechnik basiert und die Einbeziehung des Unordnungsterms ermöglicht. Die notwendige Mittelung über die möglichen Unordnungsanordnungen erfolgt näherungsweise durch Faktorisierung und ist verwandt mit der sogenannten average T-matrix approximation, wird hier jedoch auf ein stark korreliertes System erweitert.

Zur Illustration wird der Grundzustand von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ bei einem zusätzlichen Ladungsträger über Halbfillung untersucht. Wie Bandstrukturrechnungen zeigen, ruft die Dotierung der elektronendotierten Substanz gerade einen solchen Zufallsterm hervor. Dies wurde in der bisherigen Literatur meist vernachlässigt. Bei der Übertragung der Bandstrukturergebnisse in die Modellparameter des t - t' - t'' - J -Modells zeigt sich, daß der Einfluß der Dotieratome bei $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ um etwa eine Größenordnung geringer ist als in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Als wichtige Ursache hierfür wird der Einfluß der Apex-Sauerstoffatome angesehen, die im Fall von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ die Seltenerd-Dotieratome gegenüber der Kupferoxidebene abschirmen.

Für das mit diesen Parametern belegte Modell wird anschließend die Einteilchen-Greensfunktion berechnet, die Ausgangspunkt der Berechnung verschiedener Observablen ist. Die für die elektronendotierte Substanz auftretende lokale Mode gibt zu dem Vorschlag Anlaß, daß die unterschiedliche Stabilität der antiferromagnetischen Phase für die beiden betrachteten Substanzen nicht nur auf die Art der Ladungsträger zurückzuführen ist, sondern auch auf die Struktur der Elementarzelle.

Abstract

The t - J -Modell can be applied to several classes of materials, e.g. high- T_c cuprate superconductors. Often translational invariance can be assumed, but sometimes it is necessary to take into account the effects of the doping atoms at randomly distributed sites. Therefore a t - J -Modell with an additional randomly distributed on-site energy is investigated.

To calculate the one-particle Green's function considering this term of disorder, a method is developed which bases on projection technique. The average over the possible configurations of the dopand atoms is approximated by factorization and is similar to the so-called average T-matrix approximation. Here it is extended to a model with strong correlations.

In order to illustrate the methode the single-particle ground state of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ is analyzed. Band-structure calculations exhibit that for the electron-doped case the doping atoms (in first approximation) induce indeed a term of disordered on-site energies. The transformation of the values of this energies at the copper sites into the parameters in the $t - t' - t'' - J$ -model shows that the influence of doping in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ is by about an order of magnitude smaller than in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. The existence of apex oxygen atoms between the rare-earth plane and the copper-oxygen plane in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ is one important reason for that effect.

The single-particle Greens function for the t - t' - t'' - J -model with these parameters is calculated. A local mode appears in the electron-doped case, which suggests that the differences of the stability of the antiferromagnetic phases in both compounds are not only due to the type of charge carriers but also due to the structure of the unit cell.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Grundlegende Eigenschaften von Kupratsystemen und Modelle zu ihrer Beschreibung	11
2.1	Struktur und elektronische Eigenschaften	11
2.2	Elektronische Eigenschaften und Emery-Modell	14
3	Verunreinigungsmodell für LSCO und NCCO	17
3.1	Einführung effektiver Einband-Modelle mit Verunreinigungen	17
3.2	Bandstrukturrechnungen	22
3.3	$t-t''-J$ -Modell mit Verunreinigung	26
3.3.1	Lochdotiertes System - $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$	33
3.3.2	Elektronendotiertes System - $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$	37
3.4	Modell	40
4	Modifizierte Verunreinigungsmittelung für Greensfunktionen	43
4.1	Modell	44
4.2	Elektronische Anregungen bei Halbfüllung	46
4.2.1	Greensfunktion	46
4.2.2	Mittelung	47
4.2.3	Projektionstechnik	48
4.2.4	Einführung von Stringoperatoren	49
4.2.5	Diskussion der Resultate	58
5	Anwendung auf Kupratsysteme	67
5.1	Gültigkeitsbereich der Näherungen	67
5.2	Numerische Umsetzung	68
5.3	Einfluß der weiterreichenden Hüpfterme t' und t''	69
5.4	Dotiertes $t-t''-J$ -System	71
6	Diskussion und Ausblick	77
Anhang A	Berechnung von Ω^ϵ	81

Anhang B	Gemittelte Greens-Funktions-Matrix	83
Anhang C	Matrix des Hamiltonoperators	87
Anhang D	Vorfaktoren bei der Modelltransformation	89
Anhang E	Unterraum der zweifachbesetzten Plaketten	91
	Literaturverzeichnis	93

1 Einleitung

Die moderne theoretische Festkörperphysik ist zwar noch nicht sehr alt, hat aber bereits viele interessante Phänomene erklären können. Im Gegensatz zu anderen Gebieten der Physik konnten allerdings bisher nur wenige experimentelle Befunde von der Theorie *vorhergesagt* werden. Immerhin gelang es in der letzten Zeit mit der Entwicklung der Computertechnik und (z.T. damit verbunden) von Methoden zur Beschreibung der Systeme, wie Dichtefunktionaltheorie oder Dichte-Matrix-Renormierungs-Gruppe, beim „Wettlauf“ zwischen Experimentatoren und Theoretikern den zeitlichen Abstand zwischen experimenteller Entdeckung und theoretischer Beschreibung etwas zu verkürzen. Das große Problem der theoretischen Festkörperphysik ist dabei die hohe Anzahl der Teilchen, die in einem Festkörper enthalten sind. Abgesehen von einigen Sonderfällen wie z.B. Nanosystemen bewegt sie sich in der Größenordnung von 10^{23} . Auch die modernsten Rechenanlagen erlauben es nicht, die Zustände eines Systems mit dieser Zahl von Freiheitsgraden exakt zu bestimmen. Man ist deshalb gezwungen, Näherungsverfahren einzusetzen oder Symmetrien und andere Eigenschaften auszunutzen, um unabhängige entkoppelte Gleichungen zu gewinnen. Eine äußerst wichtige Symmetrie, die glücklicherweise bei vielen Festkörpern auftritt bzw. näherungsweise angenommen werden kann, ist die Translationsinvarianz bezüglich der Gitterplätze. Sie gestattet die Anwendung des Bloch-Theorems, das eine entsprechende Entkopplung ermöglicht.

Bei vielen physikalischen Systemen spielen Verunreinigungen jedoch eine große Rolle. Ein bekanntes Beispiel hierfür sind die 1986 entdeckten Hochtemperatursupraleiter. Bei diesen hängen verschiedene physikalische Eigenschaften wie die Sprungtemperatur oder Phasengrenzen von der Konzentration sogenannter Dotieratomen ab. Diese sind in geringer Konzentration in den Supraleitern vorhanden und sorgen für die Erzeugung beweglicher Ladungsträger. Gleichzeitig führen sie zu Unordnungseffekten, die die Translationssymmetrie brechen. Zur Beschreibung von Hochtemperatur-Supraleitern sind somit Methoden nützlich, die Verunreinigungen berücksichtigen. Als zusätzliche Erschwernis kommt noch hinzu, daß diese Supraleiter i.a. stark korrelierte Systeme sind. Häufig werden sie mit dem Hubbard-Modell oder dem t - J -Modell beschrieben. Die starken Korrelationen werden dabei in Form des Hubbard- U oder dem Ausschluß von Doppelbesetzungen im t - J -Modell berücksichtigt.

Das ist eine der Schwierigkeiten bei der theoretischen Beschreibung der Hochtemperatursupraleiter und der mit ihnen verwandten Substanzen. Viele Eigenschaften dieser Stoffe sind noch nicht befriedigend theoretisch geklärt. So besteht beispielsweise ein deutlicher Unterschied zwischen loch- und elektronendotierten Hochtemperatursupraleiter in der Stabilität ihrer antiferromagnetischen Phase gegenüber der Dotierkonzentration.

Dadurch motiviert soll in der vorliegenden Arbeit ein Verfahren entwickelt werden, welches Verunreinigungen bei der Beschreibung einbezieht. Die niedereenergetischen Eigenschaften von unterdotierten Kupratsystemen spiegeln sich in einem erweiterten t - J -Modell wider. Dieses wird im folgenden betrachtet. Im niedereenergetischen Bereich spielen für die Dynamik der beweglichen Ladungsträger nur die Kupferoxidebenen eine Rolle. Die Kopplungen zu den anderen Ebenen, aus denen die Kuprate bestehen, sind relativ schwach bzw. können statisch (z.B. als äußeres Feld) mit einbezogen werden. Das Modell reduziert die elektronische Struktur somit auf die Bewegung der Ladungsträger vor einem magnetischen Hintergrund, welcher durch die starke Wechselwirkung der Ladungsträger untereinander entsteht und in Form eines Heisenberg-Austauschterms geschrieben wird. Die Bewegung der Ladungsträger wird über Hüpfprozesse erfaßt, welche die Bewegung eines Ladungsträgers von einem Gitterplatz zu einem anderen beschreiben. Im vorliegenden Fall werden dabei Bewegungen zum nächsten sowie zweit- und drittnächsten Nachbarplatz einbezogen. Die Erweiterung besteht darin, daß die on-site-Energien an den einzelnen Gitterplätzen abhängig von den benachbarten Atomen sind. Für eine benachbarte Dotierstelle ist die on-site-Energie anders, als wenn der Platz nur von normalen Substratomen umgeben ist. Dies reflektiert die Tatsache, daß ein Dotieratom, welches einen Ladungsträger an die Kupferoxidebene abgibt, ein anderes elektrostatisches Potential in seiner Umgebung erzeugt, als ein Substratatom, welches das nicht tut. Das elektrostatische Potential wirkt dann auf die Ladungsträger in der Kupferoxidebene.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut:

Im Kapitel 2 der Arbeit werden zunächst einige Kupratsysteme und ihre Eigenschaften vorgestellt. Dies dient der Motivation der Untersuchungen in den folgenden Teilen, so wie die Beschäftigung mit diesen Systemen die Arbeit insgesamt motiviert hat. Insbesondere geht es um die beiden Kupferoxidsysteme Lanthan-Strontium-Kupferoxid und Neodym-Cer-Kupferoxid. Sie sind beide (bei entsprechender Dotierung) Hochtemperatursupraleiter, unterscheiden sich aber in der Art ihrer Ladungsträger und ihrer Struktur. Eine Konsequenz dieses Unterschiedes wird in der vorliegenden Arbeit untersucht.

Das folgende Kapitel betrachtet geeignete Modelle, welche die für diese Arbeit relevanten Eigenschaften der Kuprate beschreiben. Dabei wird zunächst auf das detailliertere Emery-Modell eingegangen und die einzelnen Terme betrachtet, bevor zu einfacheren wie dem erweiterten t - t' - t'' - J -Modell übergegangen wird, das analy-

tischen Verfahren leichter zugänglich ist. Beim Übergang zum einfacheren Modell wird genauer betrachtet, wie sich die einzelnen Parameter des einen Modells auf das andere Modell abbilden. Dies ist von Bedeutung, weil einige Modellparameter für die konkret betrachteten Substanzen mittels Bandstrukturrechnungen gewonnen werden. Der zentrale Parameter, welcher den unterschiedlich starken Einfluß der Dotieratome auf die Kupferoxiden widerspiegelt, wird jedoch auf diese Weise für einen Term des Emery-Modells ermittelt, während die späteren Rechnungen für das $t-t'-t''-J$ -Modell durchgeführt werden.

Die Methode für diese Rechnungen wird im vierten Kapitel dargelegt. Sie ist eine Erweiterung der Projektionstechnik zur Berechnung der Einteilchen-Greensfunktion, welche die Einbeziehung diagonaler Unordnungseffekte erlaubt. Die Untersuchungen werden für solche Parameterbereiche durchgeführt, bei denen die Kuprate antiferromagnetisch geordnet sind. Als Näherung für den Grundzustand wird deshalb ein Néel-Zustand mit einem zusätzlichen Ladungsträger verwendet. Diesem werden sogenannte String-Zustände beigemischt, welche die Störung des Néel-Zustandes durch die Bewegung charakterisieren. Es werden einige Grenzfälle der Methode untersucht. Anschließend wird sie in Kapitel 5 auf das erweiterte $t-J$ -Modell angewendet, wobei die für die Kuprate ermittelten Modellparameter eingesetzt werden. Es werden die Dispersionsrelationen und die Anregungsenergien bestimmt und die Unterschiede zwischen beiden Substanzen ermittelt.

Zum Abschluß werden in Kapitel 6 Schlußfolgerungen hinsichtlich der Stabilität der antiferromagnetischen Phase diskutiert und ein Ausblick gegeben.

2 Grundlegende Eigenschaften von Kupratsystemen und Modelle zu ihrer Beschreibung

In diesem Kapitel soll ein neues Modell zur Beschreibung von Kupratsystemen vorgestellt werden. Dazu werden zunächst strukturelle, elektronische und magnetische Eigenschaften von Kupratsupraleitern diskutiert und in Verbindung zum Emery-Modell gesetzt, das sich als Modell zur Beschreibung von Kupratsystemen etabliert hat. Es dient als Ausgangspunkt zur Herleitung effektiver Einband-Modelle, welche niederenergetische Kuprateigenschaften beschreiben können. Es folgt die Diskussion der Einband-Modelle im Hinblick auf die antiferromagnetische Phase und eine anschauliche Motivation dafür, daß die Dotieratome die Gitterplatzenergien verschieben. Um dies auch quantitativ zu untermauern sowie um die Parameter des Modells zu finden, werden Bandstrukturechnungen, die in Zusammenarbeit mit H. Rosner entstanden sind, herangezogen. Sie berücksichtigen den Einfluß der Dotierung auf die Kupferplatzenergien. Diese werden beim Übergang zum effektiven Einband-Modell mit bestimmten Anteilen der Sauerstoffplätze zur Einteilchenenergie der Gitterplätze zusammengefaßt. Deshalb wird in diesem Kapitel geprüft, wie sich Änderungen der Kupferplatzenergien auf die Gitterplatzenergien des Einband-Modells auswirken.

Zur Konstruktion eines effektiven erweiterten t - J -Modell werden die wichtigsten Effekte anhand des Emery-Modells kurz dargestellt und dann so abgeändert, daß der Einfluß der Dotieratome auch im effektiven Modell berücksichtigt wird.

2.1 Struktur und elektronische Eigenschaften

Mittlerweile ist eine beachtliche Anzahl verschiedener Kupratsupraleiter bekannt. Alle diese Verbindungen weisen, ungeachtet der unterschiedlichen enthaltenen chemischen Elemente, im wesentlichen eine gleiche Struktur auf (Abb. 2.1): Sie bestehen aus Kupferoxidschichten, die sich mit Lagen von Seltenerdmetallen abwechseln. In verschiedenen Substanzen können die Kupferatome auf unterschiedliche Weise von Sauerstoffatomen umgeben sein. So sind diese in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ oktahedral angeordnet, in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ planar und in $\text{Nd}_{2-x-y}\text{Ce}_x\text{Sr}_y\text{CuO}_{4-\delta}$

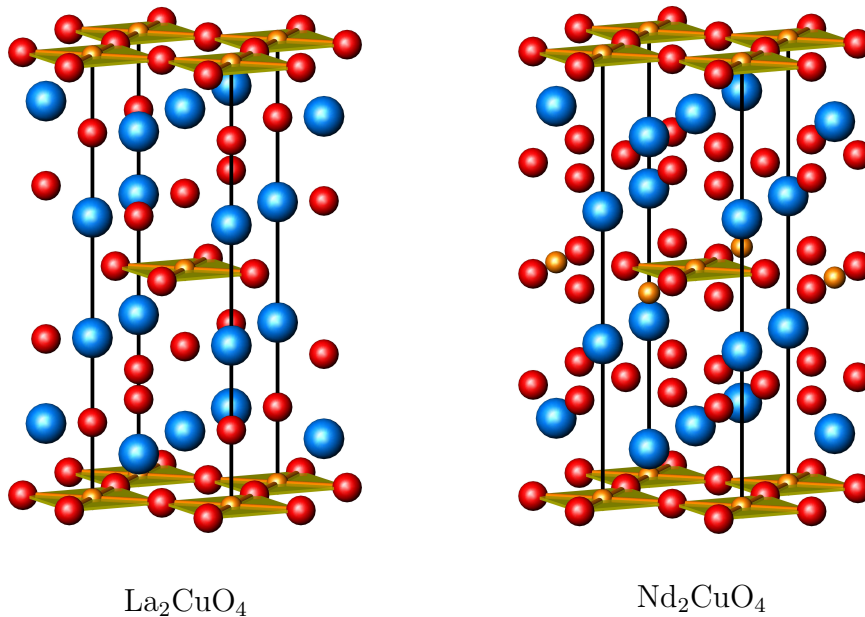


Abbildung 2.1: Elementarzellen von La_2CuO_4 und Nd_2CuO_4

pyramidal [Klauda 1993, Fulde 1995]. Es wird inzwischen allgemein angenommen, daß die Supraleitung in der Kuperoxidebene stattfindet, während die Seltenerd-schichten deren Ladungsträgerkonzentration beeinflussen. Die Kopplungen zwischen den einzelnen Schichten sind schwach im Vergleich zu den Wechselwirkungen innerhalb der Schichten. Obwohl sie prinzipiell eine Rolle spielen, z.B. bei der Erklärung der Existenz der magnetischen Ordnung (die sonst durch das Mermin-Wagner-Theorem verboten wäre), werden Kopplungen zwischen den Kupferoxidebenen für die theoretische Beschreibung zur Vereinfachung i.a. vernachlässigt, weshalb man diese Systeme näherungsweise als zweidimensional ansehen kann.

In undotierten Ausgangssubstanzen wie La_2CuO_4 oder Nd_2CuO_4 findet man die $3d$ -Schale des Kupfers neunfach besetzt [Fulde 1995], d.h. bis zur vollbesetzten $3d^{10}$ -Struktur fehlt ein Elektron. Man spricht dann von Halbfüllung, da sich dieser Zustand auf ein Gittermodell abbilden läßt, wo jeder Platz mit einem von zwei möglichen Ladungsträgern gefüllt ist.

Durch Dotierung mit Seltenerd-Atomen anderer Valenz als in den Ausgangssubstanzen lassen sich zusätzliche Ladungsträger in die Kupferoxidschichten einbringen. Dabei können sowohl Elektronen an die Kupferoxidebene abgegeben werden (*Elektronendotierung*) als auch aus ihr entfernt werden. Im letztgenannten Fall wirken die Löcher, d.h. die entstandenen Elektronenlücken, als Ladungsträger, man spricht deshalb hier von *Lochdotierung*. Die in Abb. 2.1 dargestellten Verbindungen sind Beispiele für beide Arten. Bei $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ handelt es sich um einen lochdotierten und bei $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ um einen elektrondotierten Supraleiter.

Mit Änderung der Konzentration dieser Dotieratome kann man demnach die Ladungsträgerkonzentration in der Kupferoxidebene variieren. Liegt diese

Konzentration innerhalb eines gewissen Bereichs (der von der jeweiligen Substanz abhängt), so läßt sich Supraleitung erreichen.

Ein zweiter Weg hierzu besteht in der Beeinflußung des Sauerstoffanteils (siehe unten), er wird z.B. bei $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$ besprochen.

Mit der Veränderung der Ladungsträgerkonzentration ändern sich auch die physikalischen Eigenschaften der Substanzen, wie sich am Phasendiagramm (Abb. 2.2) ablesen läßt. Im Fall von Halbfüllung bzw. bei kleinen Dotierkonzentrationen liegt

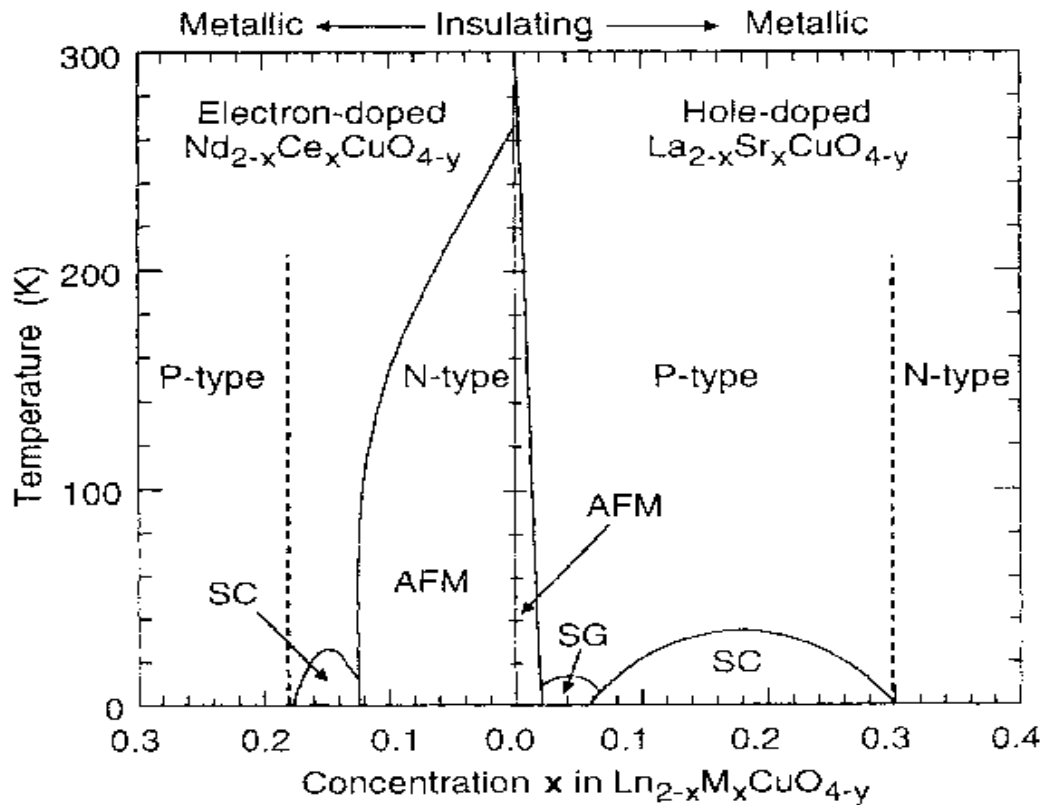


Abbildung 2.2: Phasendiagramm, aus [Gooding 1994] entnommen. Für die antiferromagnetische Phase, welche sich direkt an die T -Achse anschließt, erkennt man deutlich die wesentlich höhere Stabilität im elektronendotierten Fall.

unterhalb einer gewissen Néel-Temperatur eine langreichweitige antiferromagnetische Ordnung (AFM) vor. Mit wachsender Dotierung sinkt die Néel-Temperatur, bis schließlich ein Phasenübergang stattfindet. Für $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ führt dieser direkt in die supraleitende Phase (SC). Für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4-y}$ existiert dazwischen noch eine Phase mit lokaler antiferromagnetischer Ordnung (SG). Wird der Anteil der Dotieratome noch weiter erhöht, so erreicht die Sprungtemperatur der supraleitenden Phase ein Maximum. Für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4-y}$ beträgt dieses $T_c^{\text{max}} \approx 40\text{K}$ bei einer Konzentration von $x \approx 0,15$ [Cox 1992], im Falle von $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ lauten

die entsprechenden Werte $T_c^{\max} \approx 25K$ und $x \approx 0,16$ [Cox 1992]. Bei noch höheren Dotierungen zeigt sich schließlich metallisches Verhalten.

Für die vorliegende Arbeit interessiert vor allem die langreichweitig geordnete antiferromagnetische Phase. Ein bemerkenswerter Unterschied zwischen $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ besteht in der Stabilität gegenüber der Dotierung x . In der graphischen Darstellung, siehe Abb. 2.2, äußert sich das in den unterschiedlichen Ausdehnungen entlang der Konzentrationsachse. Während bei lochdotiertem $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ die Ordnung bereits bei einem sehr geringen Sr-Anteil, etwa bei $x \approx 0,02$, zusammenbricht, besteht sie für die elektronendotierte Verbindung $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ bis zu ungefähr $x \approx 0,14$. Wie Experimente zeigen, spielt die Änderung des Sauerstoffanteils für die Grenze der antiferromagnetischen Phase keine große Rolle. In $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+y}$ liegt sie für die unbehandelte Substanz $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($y = 0$) bei etwa $x = 0,021$, während sie in der auf $y = 0,03$ reduzierten Verbindung auf ungefähr $x = 0,017$ absinkt [Cho 1993]. Aber auch im elektronendotierten $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, dessen reduzierte Form dem $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ sehr ähnelt [Takagi 1989], besteht die antiferromagnetische Ordnung noch bis mindestens $x = 0,125$ [Thurston 1990].

Im folgenden ist deshalb nur noch von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ die Rede. D.h. obwohl das Phasendiagramm in Abb. 2.2 eigentlich für die reduzierten Substanzen ermittelt wurde, ist die Änderung des Sauerstoffanteils für die Stabilität der antiferromagnetischen Phasen nicht wichtig.

2.2 Elektronische Eigenschaften und Emery-Modell

Da inzwischen allgemein angenommen wird, daß die Supraleitung vor allem in den Kupferoxidschichten erfolgt, sollen diese etwas genauer betrachtet werden. Die Cu^{2+} -Ionen in der CuO_2 -Ebene besitzen die Elektronenkonfiguration $[\text{Ar}]3d^9$, d.h. es fehlt zur vollen Besetzung der 3d-Schale ein Elektron im $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital. Der Sauerstoff mit der Valenz -2 hat die Konfiguration $[\text{He}]2s^22p^6$. Die $3d_{x^2-y^2}$ -Orbitale des Kupfers überlappen mit den $2p_x$ - bzw. $2p_y$ -Orbitalen des Sauerstoffs, wie in Abb. 2.3 dargestellt.

Durch das einzelne, zur vollbesetzten Schale fehlende Elektron im Kupfer läßt sich die CuO_4 -Plakette (Kupferplatz mit den umgebenden Sauerstoffplätzen) auf einfache Weise in einem Lochbild durch ein einzelnes Loch mit Spin $\frac{1}{2}$ beschreiben, welches sich vorrangig am Kupferplatz aufhält. Wird jedoch ein weiteres Loch hinzugefügt, so ist dieses nicht mehr am Kupferplatz lokalisiert, sondern weist nach EELS-Experimenten und quantenchemischen Rechnungen [Fulde 1995] zu 85% O-2p-Charakter auf. Dies zeigt eine starke Hybridisierung zwischen den Kupfer- und Sauerstoffplätzen an. Da jedes Sauerstoffion der Kupferoxidebene zwei benachbarte Kupferionen besitzt, wird durch diese starke Hybridisierung zwischen Cu $3d_{x^2-y^2}$ und O $2p_{x(y)}$ ein Transfer der Löcher zwischen den CuO-Plaketten vermittelt.

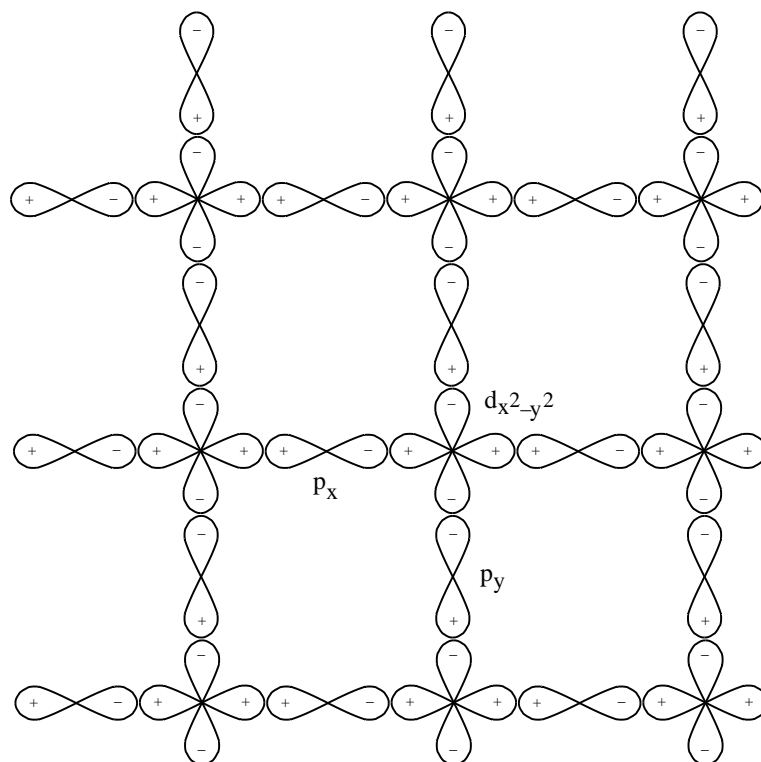


Abbildung 2.3: Anordnung der Kupfer- $3d_{x^2-y^2}$ -Orbitale und der Sauerstoff- $2p_x$ - bzw. $2p_y$ -Orbitale in der Kupferoxidebene .

Diese Eigenschaften der Kupferoxidebene werden im Emery-Modell[*Emery 1987*] erfaßt. Sein Hamiltonoperator lautet im Lochbild

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i\sigma} \varepsilon_i^d n_{i\sigma}^d + \sum_{\mathbf{i}} U_{\mathbf{i}}^d n_{\mathbf{i}\downarrow}^d n_{\mathbf{i}\uparrow}^d \\
 & + \sum_{\mathbf{ij}\sigma} t_{\mathbf{ij}}^{pd} (d_{\mathbf{i}\sigma}^+ p_{\mathbf{j}\sigma} + p_{\mathbf{j}\sigma}^+ d_{\mathbf{i}\sigma}) + \sum_{\langle \mathbf{ij} \rangle} U^{pd} n_{\mathbf{i}}^d n_{\mathbf{j}}^p \\
 & + \sum_{\mathbf{jj}'\sigma} t_{\mathbf{jj}'}^p (p_{\mathbf{j}\sigma}^+ p_{\mathbf{j}'\sigma} + p_{\mathbf{j}'\sigma}^+ p_{\mathbf{j}\sigma}) + \varepsilon^p \sum_{\mathbf{j}\sigma} n_{\mathbf{j}\sigma}^p + U^p \sum_{\mathbf{j}} n_{\mathbf{j}\downarrow}^p n_{\mathbf{j}\uparrow}^p.
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Der Begriff „Lochbild“ ist dabei in dem Sinne zu verstehen, daß die Fermi-Operatoren $d_{\mathbf{i}\sigma}^+$ und $p_{\mathbf{j}\sigma}^+$ Elektronen mit Spin σ aus dem gefüllten Cu- $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital am Platz \mathbf{i} bzw. dem O- $2p_{x(y)}$ -Orbital am Platz \mathbf{j} entfernen, wonach diese Orbitale somit gegenüber der Ausgangskonfiguration Löcher aufweisen. Der Index \mathbf{i} bezeichnet hier stets Kupferplätze, der Index \mathbf{j} Sauerstoffplätze. Das Hüpfintegral $t_{\mathbf{ij}}^{pd}$ erfaßt die erwähnte Hybridisierung zwischen den Kupfer- und Sauerstofforbitalen, dabei gilt $t_{\mathbf{ij}}^{pd} = \pm t^{pd}$ mit positivem Vorzeichen bei $\mathbf{j} = \mathbf{i} + \mathbf{e}_x/2$ oder $\mathbf{j} = \mathbf{i} - \mathbf{e}_y/2$, wie es sich

aus der bindenden oder antibindenden Kombination der Orbitale ergibt (siehe Abb. 3.5). Die Größen U^p, U_i^d und U_{ij}^{pd} beschreiben die Coulomb-Abstoßungen zwischen zwei Löchern auf den Sauerstoff- bzw. Kupferplätzen. Dabei ist $U_{ij}^{pd} = U^{pd}$ für unmittelbar benachbarte Sauerstoff- und Kupferplätze, d.h. für $\mathbf{i} - \mathbf{j} \in \{\pm \mathbf{e}_x/2, \pm \mathbf{e}_y/2\}$ und $U_{ij}^{pd} = 0$ sonst. Mit ε^d bzw. ε^p sind die d - und p -Orbitalenergien bezeichnet. Außerdem existiert noch ein direktes Hüpfen zwischen einander am nächsten liegenden Sauerstoffplätzen. Typische Werte dieser Parameter sind

$$\begin{aligned} U^d &= 10,5eV, \quad U^p = 4,0eV, \quad U^{pd} = 1,2eV, \\ \Delta^{pd} &:= \varepsilon^p - \varepsilon^d = 3,6eV, \quad t^{pd} = 1,3eV, \quad t^p = 0,65eV. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Sie wurden aus Bandstrukturrechnungen sowie Clusterrechnungen gewonnen [Mila 1988, McMahan 1988, Hybertsen 1989, Hybertsen 1990].

3 Verunreinigungsmodell für LSCO und NCCO

3.1 Einführung effektiver Einband-Modelle mit Verunreinigungen

Wie man bereits infolge der Vielzahl der Terme erwarten kann, ist das Emery-Modell (2.1) nicht gerade besonders einfach zu behandeln oder gar exakt analytisch zu lösen. Im Gegenteil, obwohl es bereits viele Näherungen enthält (z.B. keine Kopplung zwischen den Ebenen, keine weiterreichenden Hüpfterme) ist es bisher nur numerischen Berechnungen wie exakter Diagonalisierung[*Stephan 1989, Hirsch 2003, Eskes 1990, Eskes 1991a, Eskes 1991b, Meinders 1993, Tohyama 1992, Ohta 1992, Tohyama 2005*] auf kleinen Systemen und Monte-Carlo-Simulationen[*Dopf 1990, Dopf 1992, Scalettar 1991*] auf etwas größeren Gittern zugänglich. Für ausgedehnte Systeme müssen Näherungsverfahren wie z.B. Projektionstechnik[*Forster 1990, Fulde 1995, Becker 1990*] angewendet werden. Für die Untersuchung des Tieftemperaturverhaltens kann man jedoch zu einfacheren Modellen übergehen, welche das niederenergetische Verhalten gut beschreiben und dabei teilweise mit analytischen Methoden behandelbar sind. Das in diesem Sinne am häufigsten verwendete Modell ist das t - J -Modell, welches zur Beschreibung der Supraleiter vorgeschlagen wurde[*Anderson 1987*] und aus dem Emery-Modell abgeleitet werden kann, siehe Kapitel 3.3 und [*Zhang 1988, Mueller-Hartmann 2001, Belinicher 1994a, Belinicher 1994b*]. Auch wenn z.T. noch die Anwendbarkeit dieses Modells auf die Kupratsupraleiter diskutiert wird[*Su 2005*], liefert es doch in vielen Fällen Resultate, welche mit den experimentellen Befunden übereinstimmen und ist deshalb auch weitgehend als ein einfaches Modell für verschiedene Eigenschaften der Hochtemperatursupraleiter akzeptiert.

In seinen niederenergetischen Gültigkeitsbereich fallen beispielsweise die Anregungsenergien von Spinwellen in der Kupferoxidebene der Kupratsupraleiter. Der effektive Hamiltonoperator des Einband-Modells eignet sich dementsprechend zur Beschreibung des magnetischen Verhaltens in der antiferromagnetisch geordneten Phase. Für undotierte Systeme reduziert er sich auf den Heisenberg-Austausch, mit dessen Hilfe die Resultate von Raman-Messungen[*Sulewski 1990*] oder inelastischer

Neutronenstreuung[*Hayden 1990*] an Kupratverbindungen reproduziert werden können. Im Fall von La_2CuO_4 ergibt sich dabei beispielsweise eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der Austauschkonstante $J = 0,126\text{eV}$, die entsprechend der Herleitung in [*Belinicher 1994a*] gewonnen wurde (auch wenn die dort genutzten Emery-Parameter etwas von an anderer Stelle wie z.B. [*Fulde 1995*] angegebenen Werten abweichen) und dem experimentell gefundenen Wert, der nach [*Sulewski 1990, Hayden 1990*] im Bereich $J = 0,131 \dots 0,134\text{eV}$ liegt.

Betrachtet man die magnetisch geordnete Phase der dotierten Systeme, so ist eine deutliche Asymmetrie in ihrer Stabilität zu erkennen. Während sie im lochdotierten Fall bis zu einer Dotierkonzentration von ca. 3% besteht, ist sie in elektronendotierten Substanzen ungleich stabiler und verschwindet erst bei einer etwa 15%-igen Dotierung (jeweils bei $T = 0$). Dies zeigt, daß der Heisenberg-Term und auch das t - J -Modell allein nicht zur Beschreibung dieser Substanzen genügen, da beide Modelle symmetrisch gegenüber der Dotierung sind. In der Literatur gibt es zur Erklärung dieses Stabilitätsunterschiedes eine Reihe von Ansätzen, die meist auf Betrachtungen und Modifizierung des t - J -Modells basieren.

Ein Ansatz zur Erklärung dieser Ungleichheit im Phasendiagramm beruht auf unterschiedlichen Lokalisierungen der Ladungsträger. So halten sich zusätzlich hinzugefügte Löcher vorrangig an den Sauerstoffplätzen auf und zerstören den antiferromagnetischen Zustand durch singlet-induzierte Frustration. Zusätzliche Elektronen lagern sich dagegen vorrangig an den Kupferplätzen an und reduzieren dort das magnetische Moment, was auf eine „Verdünnung“ (site-dilution) des Antiferromagneten hinausläuft[*Baumgärtel 1993, Gooding 1994*]. Diese stört die magnetische Ordnung weniger effektiv, wodurch sich eine höhere Stabilität der magnetischen Phase ergibt.

Als Ursache für dieses unterschiedliche Verhalten der Ladungsträger wird die unterschiedliche Anordnung der Apex-Sauerstoffatome in der Kristallstruktur vorgeschlagen[*Baskaran 2005*]. Diese führt dazu, daß die Ce-Dotieratome nicht die Kupferoxidebene mit Ladungsträgern versorgen, sondern die Spins an benachbarten Cu-Atomen auslöschen. Gleichzeitig führt die Dotierung zu chemischem Druck, welcher in der Kupferoxidebene einen Phasenübergang erster Ordnung von einem Mott-Isolator zu einem Supraleiter bewirkt. Dies führt zu einem selbstdotierenden Mott-Isolator mit gleicher Anzahl von positiven und negativen Ladungsträgern.

Für diese site-dilution gibt es experimentelle Indizien. So besitzt die Néel-Temperatur als Funktion der Konzentration in $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ - ebenfalls ein elektronendotierter Hochtemperatursupraleiter - den gleichen Anstieg wie in bekannten site-dilution-Systemen[*Keimer 1992*]. Außerdem bleibt die langreichweitige antiferromagnetische Ordnung in elektronendotierten Substanzen kommensurabel, im Unterschied zu lochdotierten Kupraten[*Baskaran 2005*].

Ein Problem bei diesem Erklärungsversuch ist die Beweglichkeit der Elektronen bzw. Löcher. Wie verschiedene Arbeiten nahelegen[*Takagi 1992, Uji 1992, Gooding 1994*],

sind die Ladungsträger in der Nähe der antiferromagnetischen Phasengrenze bei beiden Dotierarten mobil. Dies wird durch den site-dilution-Ansatz nicht konsistent wiedergegeben.

Ein anderer Erklärungsversuch besteht in der Einbeziehung einer Dreierplatz-Wechselwirkung für lochdotierte Substanzen [Val'cov 2002]. Dabei wird der Hüpfprozeß eines Ladungsträgers über einen Zwischenplatz als gesonderter Beitrag im Hamiltonoperator erfaßt. Wie in [Korshunov 2004] dargestellt ist, reicht jedoch der Effekt dieser Wechselwirkung allein nicht aus, um die Asymmetrie im Phasendiagramm zu erklären.

Ein weiterer Versuch zur Beschreibung der unterschiedlichen Stabilität beruht auf der Ergänzung des t - J -Modell um weitere Hüpfsterme. Hier spielt insbesondere das Hüpfen zwischen übernächsten Nachbarn eine wichtige Rolle, um die hohe Stabilität der antiferromagnetischen Phase von $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ gegenüber Dotierung zu erklären. Untersuchungen mittels Lanczos-Verfahren und mit Hilfe exakter Diagonalisierung auf kleinen Gittern [Gooding 1994, Tohyama 1994, Tohyama 2001, Tohyama 2003, Tohyama 2004] zeigen, daß ein positives Vorzeichen von t' die antiferromagnetischen Korrelationen unterstützt¹ und somit diese Phase stabilisiert, was für negative t' nicht der Fall ist. Dies beruht darauf, daß innerhalb der antiferromagnetisch geordneten Phase die Ladungsträger bei Hüpfen zu den zweitnächsten Nachbarplätzen auf demselben Untergitter bleiben. Sie bewirken damit bei entsprechendem Vorzeichen des Hopping-Integrals einerseits eine Energieabsenkung, andererseits erfolgt keine Energieerhöhung durch Spinddefekte und damit verbundene frustrierte Heisenberg-Wechselwirkungen, wie sie bei Bewegung zwischen Nachbarplätzen auftritt. Die Vorzeichen der Hüpfintegrale sind abhängig von den Dotierungsarten: Bei Elektronendotierung sind sie so, daß eine Energieabsenkung und damit eine Stabilisierung der antiferromagnetischen Phase auftritt, bei Lochdotierung hingegen eine Energieerhöhung. Für diese Hoppingparameter gibt es experimentelle Hinweise [Gooding 1994].

Allerdings sind auch bei diesem Modell die theoretisch ermittelten Beweglichkeiten der Ladungsträger zu hoch. Darauf wird z.B. in [Tohyama 1994] eingegangen, wo die Autoren auch auf die mögliche Bedeutung von Unordnung für die Reduktion der zu hohen Leitfähigkeit hinweisen.

Weiterhin könnte auch das unterschiedliche chemische Potential der beiden betrachteten Substanzen einen Beitrag zum unterschiedlichen Phasendiagramm leisten. Experimente mittels core-level-Photoemissions-Spektroskopie zeigen Unterschiede, daß das chemische Potential von $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ monoton mit

¹Wenn $H' = -t' \sum_{\langle i,j \rangle_{2\sigma}} (\tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{j\sigma} + \text{H.c.})$ gemäß [Tohyama 1994] der Beitrag des nächsten-Nachbar-Hüpfens zum Hamiltonoperator ist.

der Dotierungskonzentration wächst, das chemische Potential von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ hingegen relativ unabhängig davon ist. Begründen läßt sich dies damit, daß die Unterdrückung der Potentialverschiebung bei Hinzufügen von Ladungsträgern an starke stripe-Fluktuationen gekoppelt ist, welche bei $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ fehlen [Harima 2001]. Numerische Untersuchungen des t - t' - t'' - J -Modells (exakte Diagonalisierungsrechnungen auf kleinen Systemen) können dieses Verhalten reproduzieren [Tohyama 2003, Tohyama 2004]. Neuere Experimente zeigen allerdings auch Unterschiede zwischen verschiedenen lochdotierten Supraleitern, die noch weiterer Untersuchung bedürfen [Harima 2002].

In [Harima 2001] wurde auch der Unterschied des chemischen Potentials für beide Substanzen bei Halbfüllung untersucht, er liegt etwa in der Größenordnung $0,1 \dots 0,4\text{eV}$. Durch die verschieden großen Potentiale könnte bei gleicher Konzentration von Dotieratomen die Anzahl der Ladungsträger in der Kupferoxidebene unterschiedlich sein, sie wäre damit bei in den elektronendotierten Substanzen geringer, als es der Anteil an Ce angibt.

Das in der vorliegenden Arbeit verwendete Modell basiert auf dem t - J -Modell, welches um Hüpfterme zu zweit- und drittnächsten Nachbarn erweitert ist. Wie bereits erwähnt, kann mit seiner Hilfe eine Reihe experimenteller Befunde richtig widergegeben werden. Zusätzlich wird ein elektrostatisches Potential an den Dotierstellen berücksichtigt, welches anziehend auf die Ladungsträger in der Kupferoxidebene wirkt. Dieser Einfluß der Dotieratome in Form eines elektrostatischen Potentials wurde bereits verschiedenlich diskutiert [Gooding 1994, Baskaran 2005], jedoch nicht näher quantitativ untersucht. Die Betrachtung dieses Modells ist in der vorliegenden Arbeit durch mehrere Aspekte motiviert:

(i) Es wird vorgeschlagen, daß das elektrostatische Potential an den zufällig verteilten Dotierstellen einen Beitrag zum Unterschied im Phasendiagramm liefert. Wie bereits in Kapitel 2.1 erwähnt, sind die betrachteten Kupratsysteme dotiert und weisen deshalb in den Seltenerdschichten zwei verschiedene chemische Elemente (Nd und Ce bzw. La und Sr) auf. Diese sind zufällig angeordnet, so daß keine Translationsinvarianz vorliegt. Was ist nun der wesentliche Unterschied zwischen den Atomsorten? Das Ziel der Dotierung ist es, die Ladungsträgerkonzentration in der Kupferoxidebene durch die Aufnahme oder Abgabe von Elektronen zu beeinflussen. Demzufolge weisen die Ionenrümpfe der Substituenten Ce oder Sr der Elektronen- bzw. Lochsupraleiter andere positive Restladungen auf als die der Substratome Nd bzw. La. Es ist anzunehmen, daß diese veränderte Ionenladung in ihrer Umgebung, somit auch in benachbarten CuO_2 -Plaketten, als elektrostatisches Potential wirkt. Dieses Potential hat bei beiden Substanzen einen attraktiven Charakter: Im Falle von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ nimmt jedes Strontiumatom ein Elektron aus der Kupferoxidebene auf und hat deshalb eine geringere positive Restladung (+2) als die La-Ionenrümpfe (+3). Letztere ziehen die verbliebenen Elektronen deshalb stärker an, so daß sich die Löcher, die bei diesem System die

Ladungsträger sind, häufiger in der Nähe der Strontiumorte aufhalten. Umgekehrt gibt jedes Ce-Atom in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ein Elektron an die Kupferoxidebene ab und behält danach eine höhere Rumpfladung (+4) als die Nd-Ionenrümpfe (+3), wodurch es die Ladungsträger, diesmal die Elektronen, elektrostatisch anzieht.

Die Ladungsträger werden somit an den Dotierstellen auf Grund eines attraktiven Potentials (mehr oder weniger stark) lokalisiert. Dadurch hüpfen sie weniger zu nächsten Nachbarn. Dies ist mit einer Zunahme der Anregungsenergie von Spinwellen verbunden [Vojta 1995], da es die Bewegung der zusätzlichen Ladungsträger ist, welche Strings von Spindefekten, d.h. Defekte im Spinhintergrund, erzeugt, wodurch die Magnetisierung herabgesetzt wird. Durch Pinnen der Ladungsträger wird die antiferromagnetische Phase demzufolge stabiler.

Wäre das elektrostatische Potential für beide Dotierungsarten in vergleichbarer Stärke vorhanden, so würde man auch für beide eine etwa gleiche Stabilität der antiferromagnetischen Phase gegenüber der Dotierung erwarten. An den Elementarzellen in Abb. 2.1 kann aber man erkennen, daß $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ im Gegensatz zu $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ keine Apex-Sauerstoffatome enthält. Die Annahme, daß diese Apex-Sauerstoffplätze das elektrostatische Potential der Dotierionen abschirmen, läßt erwarten, daß die elektrische Anziehung der Ladungsträger in der elektronendotierten Substanz stärker ist als im lochdotierten Fall.

Damit wäre bei letzteren der Stabilisierungseffekt geringer und das Phasendiagramm entsprechend unterschiedlich.

Wenn auch die Begriffswahl hierbei etwas einfach ist, um eine bessere Veranschaulichung zu geben, so soll doch diese Überlegung zum Stabilitätsunterschied als Motivation dienen, um die betreffenden Kupratsysteme hinsichtlich des Einflusses der Dotieratome zu untersuchen.

(ii) Weiterhin ist die Annahme a posteriori begründet. Im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit wurden Bandstrukturechnungen durchgeführt, um die Stärke der elektrostatischen Potentiale für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ sowie für $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ zu bestimmen. Dabei zeigte sich (siehe Abschnitte 3.2 und 3.3), daß sie für die beiden Substanzen $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ in der Tat signifikant verschieden sind.

(iii) Wie im ersten Punkt beschrieben ist zu erwarten, daß durch die Attraktion an den Dotierstellen die Mobilität der Ladungsträger abnimmt. Möglicherweise könnte die Berücksichtigung dieses Potentialterms deshalb dazu beitragen, die oben beschriebenen Diskrepanzen zwischen berechneter und gemessener Ladungsträgermobilität zu überbrücken. Eine genauere Prüfung dieser Vermutung kann im Rahmen der vorliegenden Arbeit allerdings nicht erfolgen.

Dieses elektrostatische Potential der Dotieratome wird im folgenden in der einfachsten Näherung mittels eines ortsabhängigen on-site-Energietrms im erweiterten

Einband-Modell berücksichtigt. Der Hamiltonoperator des Systems lautet somit

$$H = - \sum_{\mathbf{ij}\sigma} t_{\mathbf{ij}} \bar{c}_{i\sigma}^{\dagger} \bar{c}_{j\sigma} + \sum_{\mathbf{i}} \epsilon_{\mathbf{i}} \bar{n}_{\mathbf{i}} + J \sum_{\langle \mathbf{ij} \rangle} \left(\mathbf{S}_{\mathbf{i}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{j}} - \frac{\hat{n}_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{j}}}{4} \right) \quad (3.1)$$

wobei J die Austauschkonstante ist. Für die Hüpfmatrixelemente wird

$$t_{\mathbf{ij}} = \begin{cases} t & \text{für nächste Nachbarn} \\ t' & \text{für zweitnächste Nachbarn} \\ t'' & \text{für drittnächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.2)$$

verwendet. $\epsilon_{\mathbf{i}}$ sind die ortsabhängigen lokalen Energieterme. Es ist zu erwarten, daß die Ersetzung eines Seltenerdatoms durch ein Atom mit anderer Valenz nicht nur die on-site-Energie, sondern auch andere Parameter des Modells (3.1) beeinflusst, also beispielsweise auch die Hoppingparameter. Die Größe dieser weiteren Effekte ist jedoch nicht bekannt, sie werden in dieser Arbeit nicht weiter berücksichtigt.

Die Form des on-site-Energieterms wird in Kapitel 3.3 noch genauer hergeleitet. Er erfaßt nur die Energien, an denen sich zwei Ladungsträger aufhalten. Dies ist eine Folge davon, daß das System bei Halbfüllung mit zusätzlichen Ladungsträgern betrachtet wird. Dadurch ist an jedem Platz wenigstens ein Ladungsträger vorhanden, die Summe über diese „Halbfüllungs“-Ladungsträger liefert lediglich eine Konstante.

3.2 Bandstrukturechnungen

Ein wichtiger Punkt bei der Anwendung effektiver Modelle wie (2.1) oder (3.1) auf reale Systeme ist die Bestimmung realistischer Modellparameter. Um dies zu erreichen, kann man z.B. Meßgrößen mit Hilfe des Modells berechnen und dabei die Parameter so einstellen, daß entsprechende experimentelle Daten richtig wiedergegeben werden. Ein anderer Weg ist die Ableitung der Parameter aus ab-initio-Rechnungen. Als solche kommen im Bereich der Festkörperphysik vor allem Bandstrukturechnungen in Betracht.

In dieser Arbeit sollen die Parameter des Modells mittels Bandstrukturechnungen ermittelt werden. Ein weiterer Grund für diese Rechnungen ist, daß der bisher nur spekulativ angenommene Einfluß der Dotieratome auf die CuO_4 -Plaketten und dabei insbesondere der Unterschied zwischen $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ untermauert und quantifiziert werden soll. Aus diesen Gründen wurden in Zusammenarbeit mit H. Rosner Bandstrukturechnungen für die o.g. Verbindungen vorgenommen, die auch die Substitution von Seltenerd-Atomen einbeziehen. Diese Ergebnisse

werden in diesem Kapitel dargestellt, da aus ihnen der Unterschied in den on-site-Energien abgeschätzt werden kann.

Die hier entwickelten Vorstellungen wurden anhand der Bandstrukturrechnungen von H. Rosner überprüft.

Für die Bandstrukturrechnungen wurden jeweils Systeme aus einer Elementarzelle mit 14 Atomen betrachtet, d.h. $\text{La}_4\text{Cu}_2\text{O}_8$ und $\text{La}_3\text{SrCu}_2\text{O}_8$ bzw. und $\text{Nd}_4\text{Cu}_2\text{O}_8$ und $\text{Nd}_3\text{CeCu}_2\text{O}_8$. Der zusätzlich eingebrachte Ladungsträger bewirkt, daß die Konzentration 50% beträgt (ein Elektron bei zwei Kupferatomen). Es wurde ein LDA-Verfahren verwendet, welches alle $3d$ -Orbitale des Kupfers sowie $2p$ -Orbitale des Sauerstoffs einbezog. Die Zuordnung der einzelnen Bänder erfolgt mit Hilfe ihrer Charaktere, siehe Abb.3.1.

In Abb. 3.2 und 3.3 sind die Ergebnisse der Rechnungen in Form der Energiebänder

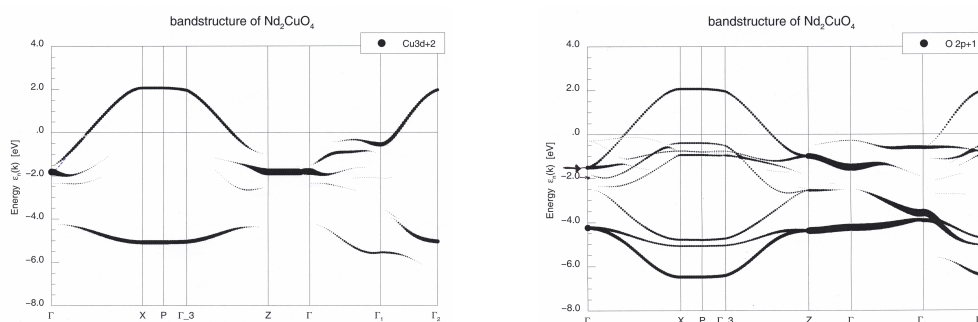


Abbildung 3.1: Charaktere der Bänder des Cu $3d^2$ -Orbitals (linkes Bild) bzw. des O $2p^1$ -Orbitals für Nd_2CuO_4

der La- und Nd-Kuprate dargestellt. Man erkennt in Abb.3.3 am Punkt Γ bei Nd_2CuO_4 eine deutliche Energielücke zwischen dem Cu $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital und dem O $2p_x$ - bzw. O $2p_y$ -Orbital, die die Größe des Hopping-Integrals t' bestimmt. Für La_2CuO_4 ist diese Energielücke wesentlich kleiner, siehe Abb.3.2, was auch einen geringeren Wert von t' zur Folge hat. Quantitativ findet man aus den Werten an den Symmetriepunkten Γ, M und X mittels tight-binding-fit die Werte der Hoppingintegrale t, t' und t'' . Sie sind in Tabelle 3.1 aufgeführt und stimmen mit Ausnahme von t' im der Literatur überein [Eskes 1991, Hybertsen 1990].

Für den Unordnungsterm des Modells (3.1) interessiert jedoch besonders der Einfluß der Dotierung auf die on-site-Energien ϵ_1 . Um ihn zu bestimmen, wurden die Rechnungen sowohl für dotiertes $\text{Nd}_3\text{CeCu}_2\text{O}_8$ als auch für undotiertes $\text{Nd}_4\text{Cu}_2\text{O}_8$ durchgeführt und miteinander verglichen. Als Verschiebung der on-site-Energie am Kupferplatz wurde die Differenz der Zustandsdichtekurve des zum Kupfer- $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital gehörenden Bandes an der Fermikante angenommen, siehe Abb. 3.4. Man erkennt in dieser Grafik deutlich, daß die Zustandsdichte der dotierten Substanz gegenüber der undotierten zu kleineren Energien hin verschoben ist, ansonsten aber einen ähnlichen Verlauf zeigt.

Die Bandstrukturrechnungen liefern die on-site-Energien ϵ_1^d am Kupferplatz.

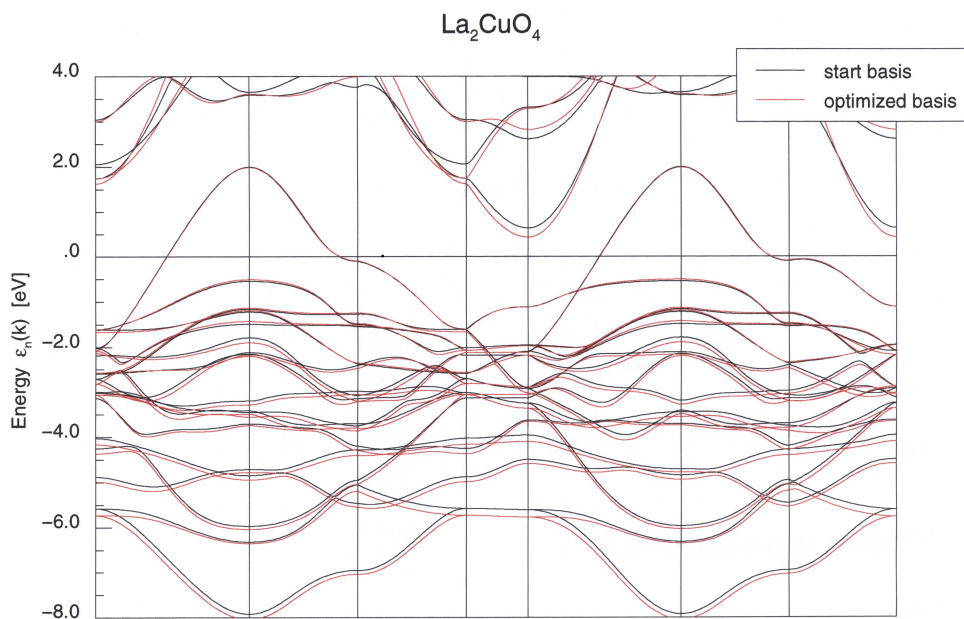


Abbildung 3.2: Bandstruktur von $\text{La}_3\text{SrCu}_2\text{O}_8$

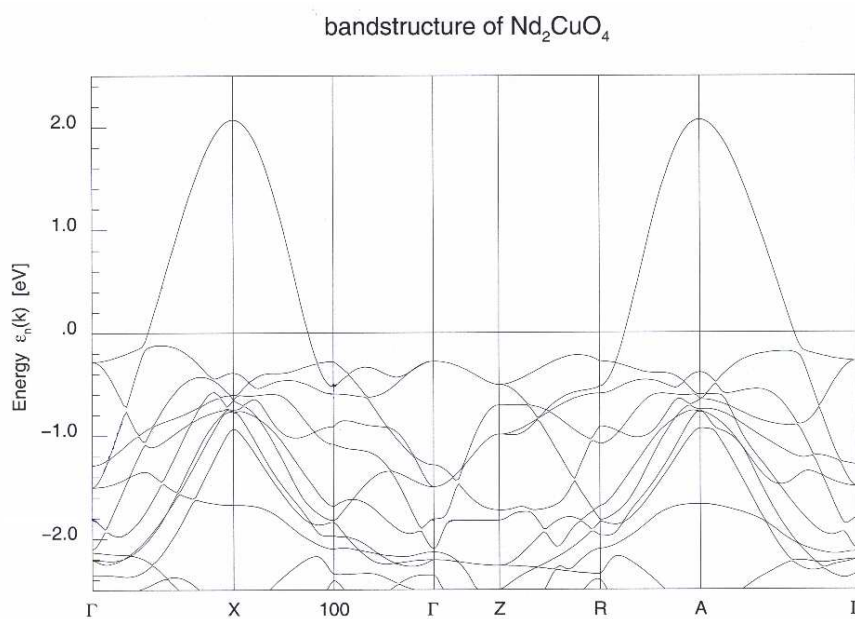


Abbildung 3.3: Bandstruktur von $\text{Nd}_3\text{CeCu}_2\text{O}_8$

Je nachdem, ob dieser Dotieratome (Sr bzw. Ce) oder ausschließlich Substratatomme (La bzw. Nd) als Nachbarn hat, ergeben sich unterschiedliche Energiewerte. Über diese Energiedifferenz wird in der vorliegenden Arbeit der Einfluß der Dotierung erfaßt. Die Untersuchungen erfolgen jedoch für das effektive t - t' - t'' - J -

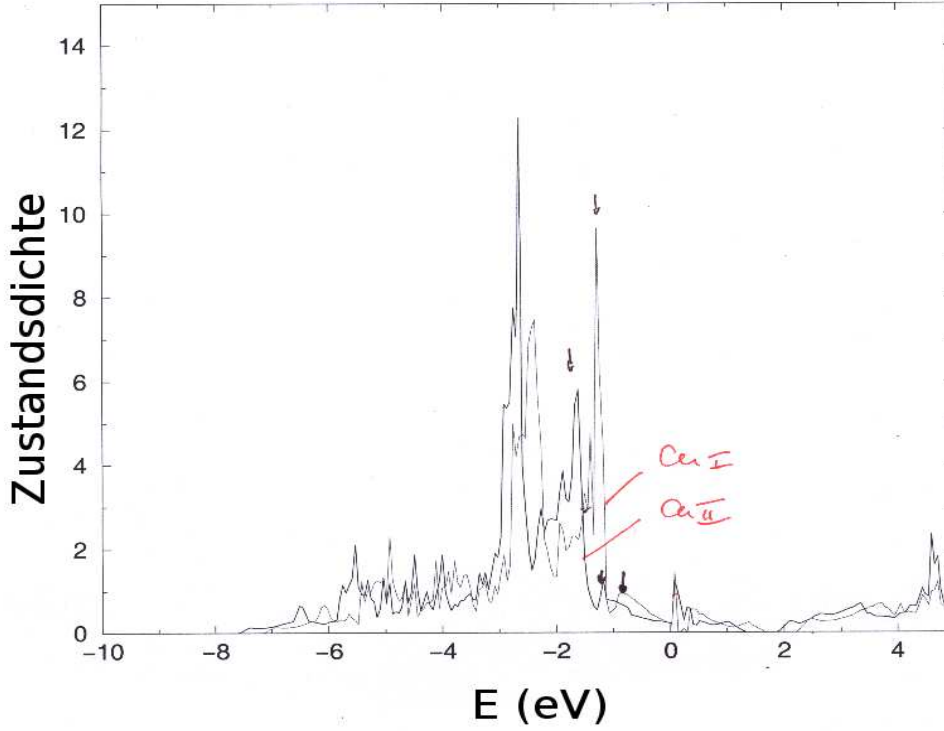


Abbildung 3.4: Vergleich der Zustandsdichten von $\text{Nd}_4\text{CuO}_2\text{O}_8$ und $\text{Nd}_3\text{CeCu}_2\text{O}_8$

Modell (3.1), bei dem die Kupferplätze und die umgebenden Sauerstoffplätze zu CuO_2 -Plaketten zusammengefaßt sind. Die on-site-Energien im effektiven Modell sind somit die on-site-Energien der Plaketten und damit nicht identisch mit den on-site-Energien der Kupferplätze im Emery-Modell. Damit sind auch die Werte der on-site-Energiedifferenzen infolge der Dotierung für beide Modelle unterschiedlich. Um den Einfluß der Dotierung auf das effektive Modell zu erfassen, wird deshalb im folgenden Kapitel die Energiedifferenz $\Delta(\varepsilon_{dot}^d - \varepsilon_{undot}^d)$ im effektiven Modell als Funktion der Differenz der Kupferplatzenergien $\varepsilon_{dot}^d - \varepsilon_{undot}^d$ bestimmt.

	t	t'	t''	$\varepsilon_{dot}^d - \varepsilon_{undot}^d$
$\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$	0,50	-0,0125	0,0125	< 0,1
$\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$	0,48	-0,078	0,047	0,4

Tabelle 3.1: Modellparameter (in eV) für die Hopping-Terme sowie die Energieverschiebung am Kupferplatz, abgeleitet aus den Bandstrukturechnungen. ε_{dot}^d bezeichnet dabei die on-site-Energie an den Kupferplätzen, die zu einem Dotieratom (Sr bzw. Ce) benachbart sind. ε_{undot}^d ist der Wert der on-site-Energie an den Kupferplätzen, die ausschließlich La- bzw. Nd-Atome als Nachbarn haben.

3.3 t - t' - t'' - J -Modell mit Verunreinigung

Obwohl die Ableitung des Einband-Modells aus dem Emery-Modell (2.1) heutzutage Standard ist und beispielsweise in [Mueller-Hartmann 2001, Belinicher 1994a, Belinicher 1994b] ausführliche Darstellungen zu finden sind, soll sie hier noch einmal für die beiden Dotierungsarten angegeben werden, um die on-site-Energie im effektiven Modell näher zu beleuchten. Diese spielte in der bisherigen Literatur keine Rolle, weil meist translationsinvariante Systeme betrachtet wurden, bei denen diese Energien an allen Plätzen gleich sind und dadurch bei gleichbleibender Zahl an Ladungsträgern nur eine unwesentliche Konstante liefern. In der vorliegenden Arbeit interessiert jedoch gerade der Einfluß der Unordnung, so daß diese on-site-Energie variiert. Die Abschätzungen für die on-site-Energien bei den verschiedenen benachbarten Substratatomten (Ce oder Nd bzw. Sr oder La), welche von den Bandstrukturrechnungen geliefert werden, entsprechen Parametern für ein Modell, das dem Emery-Modell ähnlich ist. Dagegen werden die späteren Berechnungen in dem einfacheren t - t' - t'' - J -Modell durchgeführt. Es ist deshalb wichtig zu wissen, wie sich die Parameter des einen Modells in die Parameter des anderen Modells transformieren. Deshalb wird auf die Ableitung des t - t' - t'' - J -Modells an dieser Stelle ausführlich eingegangen. Die Übertragung der Modellparameter ist dabei nicht im Sinne einer übertriebenen scheinbaren Genauigkeit zu verstehen, sondern sie soll helfen, eine *Abschätzung* für die Größenordnung zu finden, in welcher sich die Energieverschiebung infolge der Dotierung bewegt. Damit die Abschätzung nachvollziehbar ist, soll die Vorgehensweise bei der Vereinfachung zum Einband-Modell dargestellt werden. Sie besteht im Wesentlichen aus folgenden Schritten:

- Ersetzung der Einzelplatz-Sauerstoffoperatoren des Emery-Hamiltonoperators durch symmetrische und antisymmetrische Sauerstoffoperatoren bezüglich der tetragonalen Symmetrie
- Aufspaltung der so gefundenen Terme in einen bezüglich der Plaketten lokalen Anteil, einen Term, welcher die Hoppingprozesse erfaßt und einen Anteil, der die Coulomb-Wechselwirkungen auf den Kupferplätzen bzw. zwischen Kupfer- und Sauerstoffplätzen enthält
- Diagonalisierung des lokalen Anteils getrennt nach Besetzungszahlen, d.h. getrennt für die Unterräume mit einem und zwei Ladungsträgern
- Renormierung der Kupfer- und Sauerstoff-on-site-Energien durch die Coulomb-Terme
- Übergang zum Einband-Modell der Plaketten

Dieses Vorgehen sowie auch die entsprechenden Berechnungen dieses Kapitels 3.3 sind stark an die Ausführungen in [Belinicher 1994a] angelehnt, ohne daß dies im folgenden immer wieder erwähnt wird. Weitere Darstellungen hierzu sind in

[*Belinicher 1994b, Mueller-Hartmann 2001*] zu finden.

Neu ist jedoch die Beachtung der unterschiedlich dotierten Plätze.

Die Coulomb-Anteile enthalten vier Erzeugungs- oder Vernichtungsoperatoren, was beim Übergang zu den symmetrischen und antisymmetrischen Sauerstoffoperatoren zu komplizierten Ausdrücken führt, die nicht direkt für die weiteren Schritte verwendet werden können. Unter der Annahme, daß die starke Hybridisierung zwischen den Sauerstoff- und Kupferplätzen den Haupteffekt darstellt [*Belinicher 1994a*] werden die Coulomb-Terme näherungsweise über die Renormierung der on-site-Energien einbezogen. Sie müssen deshalb, anders als der Rest des Hamiltonoperators, nicht komplett auf die symmetrischen und antisymmetrischen Sauerstoffoperatoren umgeschrieben werden. Aus diesem Grund wird der Hamiltonoperator (2.1) zunächst in zwei Anteile aufgespalten, von denen der eine, H_0 , alle Hoppingprozesse und lokalen Einteilchen-Energien und die lokale Coulomb-Abstoßung auf den Kupferplätzen enthält, und der zweite, ΔH , die Coulomb-Abstoßung zwischen den Sauerstoff- und Kupferplätzen und auf den Sauerstoffplätzen umfaßt:

$$H = H_0 + \Delta H \quad (3.3)$$

mit

$$\begin{aligned} H_0 = & \sum_{i\sigma} \varepsilon_i^d n_{i\sigma}^d + \sum_i U_i^d n_{i\downarrow}^d n_{i\uparrow}^d \\ & + t^{pd} \sum_{i\sigma} \left\{ d_{i\sigma}^+ \left(p_{x,i-\frac{e_x}{2},\sigma} + p_{y,i+\frac{e_y}{2},\sigma} - p_{x,i+\frac{e_x}{2},\sigma} - p_{y,i-\frac{e_y}{2},\sigma} \right) + \text{h.c.} \right\} \\ & + t^p \sum_{i\sigma} \left\{ \left(p_{x,i-\frac{e_x}{2},\sigma}^+ p_{y,i-\frac{e_y}{2},\sigma} - p_{x,i-\frac{e_x}{2},\sigma}^+ p_{y,i+\frac{e_y}{2},\sigma} \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + p_{x,i+\frac{e_x}{2},\sigma}^+ p_{y,i+\frac{e_y}{2},\sigma} - p_{x,i+\frac{e_x}{2},\sigma}^+ p_{y,i-\frac{e_y}{2},\sigma} \right) + \text{h.c.} \right\} \\ & + \frac{\varepsilon^p}{2} \sum_{i\sigma} \left(n_{i+\frac{e_x}{2},\sigma}^{p_x} + n_{i-\frac{e_x}{2},\sigma}^{p_x} + n_{i+\frac{e_y}{2},\sigma}^{p_y} + n_{i-\frac{e_y}{2},\sigma}^{p_y} \right) \end{aligned} \quad (3.4)$$

und

$$\begin{aligned} \Delta H = & U^{pd} \sum_i n_i^d \left(n_{i+\frac{e_x}{2}}^{p_x} + n_{i+\frac{e_y}{2}}^{p_y} + n_{i-\frac{e_x}{2}}^{p_x} + n_{i-\frac{e_y}{2}}^{p_y} \right) \\ & + U^p \sum_i \left(n_{i+\frac{e_x}{2},\downarrow}^{p_x} n_{i+\frac{e_x}{2},\uparrow}^{p_x} + n_{i-\frac{e_x}{2},\downarrow}^{p_x} n_{i-\frac{e_x}{2},\uparrow}^{p_x} + n_{i+\frac{e_y}{2},\downarrow}^{p_y} n_{i+\frac{e_y}{2},\uparrow}^{p_y} + n_{i-\frac{e_y}{2},\downarrow}^{p_y} n_{i-\frac{e_y}{2},\uparrow}^{p_y} \right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Die Indizierung der Operatoren ist hier etwas ausführlicher als in (2.1), um eine größere Konsistenz mit den später verwendeten Operatoren zu erreichen. Weiterhin wurden die Ortsabhängigkeiten der Hoppingparameter t_{ij}^p und t_{ij}^{pd} sowie der Coulomb-Energie U_{ij}^{pd} vernachlässigt. Bei den Hüpfprozessen zwischen den Sauerstoffplätzen bzw. zwischen Kupfer- und Sauerstoffplätzen ist dies gerechtfertigt, weil die Ortsabhängigkeit ausschließlich eine Folge der Dotierung mit Ce bzw. Sr ist und die Eigenschaften des Kupferatoms erst in höherer Ordnung eine Rolle spielen. Für die Coulomb-Energie zwischen Kupfer- und Sauerstoffplatz wäre die Ladungsänderung infolge der Dotierung hingegen gerade ein wichtiger Effekt und somit eine Ortsabhängigkeit gegeben. Für die hier betrachtete Abbildung des Emery-Modells auf das t - t' - t'' - J -Modell ist diese Abhängigkeit jedoch bereits im wesentlichen durch die Änderung der on-site-Energie ε_i^d auf den dotierten Kupferplätzen erfaßt, da die Coulomb-Energien nur zur Renormierung der on-site-Energien verwendet werden.

Der erste Teil H_0 aus (3.4) wird nun auf symmetrische und antisymmetrische Kombinationen von Sauerstoffoperatoren umgeschrieben, welche die auftretende tetragonale Symmetrie widerspiegeln:

$$w_{1\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} w_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.6)$$

$$v_{1\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} v_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.7)$$

mit den Fouriertransformierten

$$w_{\mathbf{k}\sigma} = -\frac{v}{f(\mathbf{k})} \left(\sin \frac{k_x}{2} p_{x,\mathbf{k}\sigma} - \sin \frac{k_y}{2} p_{y,\mathbf{k}\sigma} \right) \quad (3.8)$$

$$v_{\mathbf{k}\sigma} = -\frac{v}{f(\mathbf{k})} \left(\sin \frac{k_y}{2} p_{x,\mathbf{k}\sigma} + \sin \frac{k_x}{2} p_{y,\mathbf{k}\sigma} \right) \quad (3.9)$$

$$f(\mathbf{k}) = \sqrt{1 - \frac{\cos k_x + \cos k_y}{2}} \quad (3.10)$$

Sie sind der Plakettenstruktur des Gitters angepaßt, bei der ein Kupferatom von vier Sauerstoffatomen umgeben ist. Den mit diesen Operatoren ausgedrückten Anteil H_0 des Emery-Modells kann man anschließend gemäß $H = H_{\text{loc}} + H_{\text{hop}} + \Delta H$ zerlegen

in einen Teil

$$H_{\text{loc}} = \sum_{\mathbf{l}} h_{\mathbf{l}} = \sum_{\mathbf{l}} \left\{ \varepsilon_{\mathbf{l}}^d n_{\mathbf{l}}^d + U_{\mathbf{l}}^d n_{\mathbf{l}\downarrow}^d n_{\mathbf{l}\uparrow}^d + 2t^{pd} \lambda_0 \sum_{\sigma} (d_{\mathbf{l}\sigma}^+ w_{\mathbf{l}\sigma} + \text{h.c.}) \right. \\ \left. + (\varepsilon^p + t^p \mu_0) \sum_{\sigma} w_{\mathbf{l}\sigma}^+ w_{\mathbf{l}\sigma} + (\varepsilon^p - t^p \mu_0) \sum_{\sigma} v_{\mathbf{l}\sigma}^+ v_{\mathbf{l}\sigma} \right\} \quad (3.11)$$

der nur die lokalen Prozesse auf den Plaketten beschreibt (die lokalen Coulomb-Abstoßungen durch U^{pp} und U^{pd} sind in ΔH berücksichtigt) und einen Teil, der Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Plaketten erfaßt:

$$H_{\text{hop}} = 2t^{pd} \sum_{\mathbf{l} \neq \mathbf{l}', \sigma} \lambda_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} (d_{\mathbf{l}\sigma}^+ w_{\mathbf{l}'\sigma} + \text{h.c.}) + t^{pp} \sum_{\mathbf{l} \neq \mathbf{l}', \sigma} \left\{ \mu_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} (w_{\mathbf{l}\sigma}^+ w_{\mathbf{l}'\sigma} - v_{\mathbf{l}\sigma}^+ v_{\mathbf{l}'\sigma}) \right. \\ \left. + \nu_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} (w_{\mathbf{l}\sigma}^+ v_{\mathbf{l}'\sigma} + \text{h.c.}) \right\} \quad (3.12)$$

Die Definitionen und Werte der Vorfaktoren $\lambda_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$, $\mu_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$ und $\nu_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$ sind in Anhang D angegeben. Bedeutsam ist, daß der Vorfaktor des t^{pd} -Hoppinganteils für Hüpfprozesse innerhalb einer Plakette mit $\lambda_0 = 0,958$ relativ groß ist, für Hüpfen zu weiter entfernten Plätzen aber schnell abfällt [Belinicher 1994a, Mueller-Hartmann 2001]. Dadurch wird ein wesentlicher Beitrag der Hybridisierung zwischen Kupfer- und Sauerstoffplätzen bereits auf der lokalen Plakette berücksichtigt.

Der lokale Anteil H_{loc} ist eine Summe von Einteilchenoperatoren $h_{\mathbf{l}}$, die somit einzeln diagonalisiert werden können. Eine Plakette kann mit maximal zwei Teilchen besetzt werden. Die Diagonalisierung kann für die beiden komplementären Unterräume, bei denen sich ein bzw. zwei Teilchen auf der Plakette befinden, getrennt durchgeführt werden.

Für den Unterraum mit einem Ladungsträger führt man die Basisvektoren

$$d_{\mathbf{l}\sigma}^+ |0\rangle, \quad w_{\mathbf{l}\sigma}^+ |0\rangle \quad \text{und} \quad v_{\mathbf{l}\sigma}^+ |0\rangle \quad (3.13)$$

ein. Die Diagonaldarstellung des Hamiltonoperators eingeschränkt auf diesen Unterraum lautet dann

$$H_{\text{loc}}^1 = \sum_{\mathbf{l}} h_{\mathbf{l}}^1 = \sum_{\mathbf{l}\sigma} \left(\varepsilon_{\mathbf{l}}^f X_{\mathbf{l}\sigma}^{ff} + \varepsilon_{\mathbf{l}}^g X_{\mathbf{l}\sigma}^{gg} + \varepsilon_{\mathbf{l}}^v X_{\mathbf{l}\sigma}^{vv} \right) \quad (3.14)$$

mit

$$X_{1\sigma}^{\alpha\beta} := |\alpha_{1\sigma}\rangle\langle\beta_{1\sigma}| \quad (3.15)$$

und den Eigenzuständen

$$|f_{1\sigma}\rangle = U_1 d_{1\sigma}^+ |0\rangle - V_1 w_{1\sigma}^+ |0\rangle \quad (3.16)$$

$$|g_{1\sigma}\rangle = V_1 d_{1\sigma}^+ |0\rangle + U_1 w_{1\sigma}^+ |0\rangle \quad (3.17)$$

Diese sind jeweils bezüglich des Spins entartet. Die Eigenwerte lauten

$$\varepsilon_1^{g,f} = \varepsilon^p - \frac{\varepsilon^p - \varepsilon_1^d - t^p \mu_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{t^p \mu_0 + \varepsilon^p - \varepsilon_1^d}{2}\right)^2 + \lambda_0^2 (t^{pd})^2} \quad \text{und} \quad (3.18)$$

$$\varepsilon_1^v = \varepsilon^p - \mu_0 t^p \quad (3.19)$$

Für die Vorfaktoren in den Eigenvektoren erhält man

$$U_1 = \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{1 + \frac{4\lambda_0^2 (t^{pd})^2}{\tilde{R}_1}}}} \quad \text{und} \quad V_1 = \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{1 + \frac{4\lambda_0^2 (t^{pd})^2}{\tilde{R}_1}}}} \quad (3.20)$$

mit $\tilde{R}_1 = (\varepsilon^p - \varepsilon_1^d + \mu_0 t^p)/2$. Bei den typischen Parametern für die hier betrachteten Systeme, siehe (2.2), ist ε_1^f der niedrigste Energiewert. Weiter unten sind die entsprechenden Werte für Plätze in der Nähe von Nd- bzw. Ce-Atomen angegeben.

Der Unterraum mit zwei Ladungsträgern wird von insgesamt 15 Basisvektoren aufgespannt, diese sind in Anhang E angegeben. Für die hier vorgenommene Betrachtung genügt die Feststellung, daß der Grundzustand für diesen Fall eine Linearkombination

$$|c_1\rangle = U_1 |\psi_1\rangle + V_1 |\varphi_1\rangle + W_1 |\chi_1\rangle \quad (3.21)$$

ist mit den Basisvektoren

$$|\psi_1\rangle = d_{1\uparrow}^+ d_{1\downarrow}^+ |0\rangle \quad (3.22)$$

$$|\varphi_1\rangle = w_{1\uparrow}^+ w_{1\downarrow}^+ |0\rangle \quad (3.23)$$

$$|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{1\uparrow}^+ w_{1\downarrow}^+ - d_{1\downarrow}^+ w_{1\uparrow}^+) |0\rangle \quad (3.24)$$

Die zugehörige Energie ist damit der kleinste Eigenwert der Matrix

$$\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1^d + U_1^d & 2\sqrt{2}\lambda_0 t^{pd} & 2\sqrt{2}\lambda_0 t^{pd} \\ 2\sqrt{2}\lambda_0 t^{pd} & 2(\varepsilon^p + \mu_0 t^p) & 0 \\ 2\sqrt{2}\lambda_0 t^{pd} & 0 & \varepsilon_1^d + \varepsilon^p + \mu_0 t^p \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Der wesentliche Unterschied zwischen Loch- und Elektronendotierung besteht in der Besetzung der Orbitale der Kupfer- und Sauerstoffatome. Bei Halfüllung fehlt in beiden Fällen nur noch im Cu- $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital ein Elektron, alle anderen sind vollbesetzt. Im Lochbild des Emery-Modells entspricht das einem vorhandenen Loch. Übertragen auf die obige Ableitung bedeutet dies, daß die Lochdotierung auf den Raum der mit einem und zwei Löchern besetzten Zustände führt, die Elektronendotierung auf den Raum der leeren und einfachbesetzten Zustände. Entsprechend sind die Unterräume, auf welche das auf die symmetrischen und antisymmetrischen Sauerstoffatome umgeschriebenen Emery-Modell projiziert wird, für beide Fälle unterschiedlich.

Bei Lochdotierung besteht der betreffende Unterraum aus den Grundzuständen der beiden Unterräume mit einem bzw. zwei Ladungsträgern pro Plakette, bei Elektronendotierung erfolgt die Projektion auf das Produkt aus dem leeren Raum sowie dem Raum, der vom Grundzustand des Ein-Loch-Unterraumes aufgespannt wird.

Die Coulomb-Terme des Emery-Modells ergeben beim Übergang zu den kombinierten Operatoren $w_{1\sigma}$ und $v_{1\sigma}$ relativ komplizierte Ausdrücke. Sie werden deshalb, wie oben erwähnt, nur näherungsweise durch entsprechende Renormierung der on-site-Energien berücksichtigt.

Da im vorliegenden Fall nur die niedrigsten Singlett-Zustände den Projektions-Unterraum aufspannen, werden die Anteile von ΔH , welche Operatoren $v_{1\sigma}$ enthalten, vernachlässigt. Für die Renormierung der on-site-Energien sind ferner nur die lokalen Anteile von Belang. Die nichtlokalen Beiträge spielen z.T. bei der Renormierung der Hoppingparameter eine Rolle [Belinicher 1994a], die jedoch in diesem

Kapitel nicht von Interesse ist. Damit wird von ΔH aus (3.5) nur der Anteil

$$\Delta H_{\text{loc}} = U^{pd} \sum_{\mathbf{i}\sigma} n_{\mathbf{i}}^d w_{\mathbf{i}\sigma}^+ w_{\mathbf{i}\sigma} f_{\mathbf{i}\mathbf{l}} + U^p \sum_{\mathbf{l}\mathbf{l}'\sigma} h_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} w_{\mathbf{l}\sigma}^+ w_{\mathbf{l}\sigma} w_{\mathbf{l}'\sigma}^+ w_{\mathbf{l}'\sigma} \quad (3.26)$$

einbezogen. Die Definitionen der Vorfaktoren $f_{\mathbf{i}\mathbf{l}}$ und $h_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$ sind in Anhang D zu finden. Die Projektion auf die niederenergetischsten Eigenzustände $U_1 d_{\mathbf{l}\sigma}^+ |0\rangle - V_1 w_{\mathbf{l}\sigma}^+ |0\rangle$, siehe (3.16), im Raum mit einem Ladungsträger liefert

$$\begin{aligned} \Delta H_{\text{loc}} = \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}}^d U^{pd} \sum_{\mathbf{l}(\neq\mathbf{i})\sigma} V_1^2 f_{\mathbf{i}\mathbf{l}} + \sum_{\mathbf{l}\sigma} w_{\mathbf{l}\sigma}^+ w_{\mathbf{l}\sigma} U^{pd} \sum_{\mathbf{i}(\neq\mathbf{l})} U_{\mathbf{i}}^2 f_{\mathbf{i}\mathbf{l}} \\ + \sum_{\mathbf{l}\sigma} w_{\mathbf{l}\sigma}^+ w_{\mathbf{l}\sigma} U^p \sum_{\mathbf{l}'(\neq\mathbf{l})} h_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} V_{\mathbf{l}'}^2 \quad . \quad (3.27) \end{aligned}$$

Hier wird offensichtlich, daß diese Terme die on-site-Energien renormieren, man findet für diese die neuen Werte

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{l}}^d = \varepsilon_{\mathbf{l}}^d + U^{pd} \sum_{\mathbf{l}'(\neq\mathbf{l})} f_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} V_{\mathbf{l}'}^2 \quad (3.28)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{l}}^p = \varepsilon_{\mathbf{l}}^p + U^{pd} \sum_{\mathbf{l}'(\neq\mathbf{l})} f_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} U_{\mathbf{l}'}^2 + U^p \sum_{\mathbf{l}'(\neq\mathbf{l})} h_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} V_{\mathbf{l}'}^2 \quad . \quad (3.29)$$

Sie hängen von den Vorfaktoren des Einzelplatz-Grundzustandsvektors $|f_{\mathbf{l}\sigma}\rangle$ ab, welche wiederum Funktionen der on-site-Energien sind.

Anschaulich ist die Renormierung klar: Bei Halbfüllung renormiert jeder besetzte Sauerstoffplatz über die Kupfer-Sauerstoff-Coulombwechselwirkung die Energie auf benachbarten Kupferplätzen. Gleichzeitig wird die Energie jedes Sauerstoffplatzes renormiert, und zwar von benachbarten Kupferplätzen infolge der Kupfer-Sauerstoff-Wechselwirkung und von benachbarten Sauerstoffplätzen mittels Sauerstoff-Sauerstoff-Wechselwirkung. Dementsprechend gehen die Anteile U_1 und V_1 , mit denen die Kupfer- bzw. Sauerstoffplätze besetzt sind, in die Energieverschiebungen ein.

Die letzten beiden Gleichungen (3.28),(3.29) bilden somit gemeinsam mit (3.20) ein geschlossenes Gleichungssystem, dessen Lösung die gesuchten renormierten Werte ergibt. Wie man leicht erkennt, ist über die lokale Abhängigkeit der Koeffizienten des Grundzustandsvektors auch die Verschiebung der Energien ortsabhängig, also vor allem dadurch bestimmt, ob sich Dotieratome in der Umgebung befinden oder nicht. Für kleine Dotierungskonzentrationen wie im vorliegenden Fall kann man jedoch näherungsweise annehmen, daß die Summe über die U_1 bzw. V_1 nur wenig

von den Werten für dotierte Plaketten beeinflusst wird. Da überdies zumindest bei $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ diese Werte für eine Nd- und eine Ce-Umgebung fast gleichgroß sind, läßt sich $U_1 \approx U$ und $V_1 \approx V$ für alle Plätze l annehmen. Dabei stehen U und V für die Vorfaktoren des undotierten Systems. Die Gleichungen (3.28) und (3.29) vereinfachen sich damit zu

$$\tilde{\varepsilon}_1^d \approx \varepsilon_1^d + (2 - f_0) U^{pd} V^2 \quad (3.30)$$

$$\tilde{\varepsilon}_1^p \approx \varepsilon^p + (2 - f_0) U^{pd} U^2 + \left(\frac{1}{2} - h_0\right) U^p V^2 \quad . \quad (3.31)$$

Auch die Energie der zweifachbesetzten Zustände wird renormiert, durch Ersetzen der on-site-Energien der Matrix (3.25) ist die Energie des niederenergetischsten Zustands gleich dem kleinsten Eigenwert von

$$M = \begin{pmatrix} 2\tilde{\varepsilon}_1^d + U_1^d & 2\sqrt{2}\lambda_0 t^{pd} & 2\sqrt{2}\lambda_0 t^{pd} \\ 2\sqrt{2}\lambda_0 t^{pd} & 2(\tilde{\varepsilon}^p + \mu_0 t^p) & 0 \\ 2\sqrt{2}\lambda_0 t^{pd} & 0 & \tilde{\varepsilon}_1^d + \tilde{\varepsilon}^p + \mu_0 t^p \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

Im letzten Schritt spielt nun die Dotierungsart eine Rolle. Sie bestimmt, ob Löcher infolge der Dotierung hinzugefügt oder entzogen werden und damit, zwischen welchen Unterräumen der Zustand einer Plakette beim Hüpfen eines Teilchens wechselt.

3.3.1 Lochdotiertes System - $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

Bei Lochdotierung wird ein zusätzliches Loch erzeugt. Infolge der starken Hybridisierung zwischen Kupfer- und Sauerstoffplätzen entsteht dabei keine $\text{Cu-}3d^8$ -Konfiguration, sondern das hinzugefügte Loch bildet mit dem bereits vorher vorhandenen ein sogenanntes *Zhang-Rice-Singlett*, welches sich sowohl am Kupferplatz als auch an den benachbarten Sauerstoffplätzen aufhält [Zhang 1988, Fulde 1995]. Das wird durch die bereits erwähnten EELS-Messungen bestätigt [Neudert 1998, Richter 2000]. Jeder Plakette des Emery-Modells wird ein Gitterplatz des effektiven Einband-Modells zugeordnet. Ist die Plakette mit einem Loch besetzt, so wird auch der entsprechende Gitterplatz als einfach besetzt (mit dem Spin des Plakettenloches) definiert. Sind zwei Löcher, d.h. ein Zhang-Rice-Singlett, auf der Plakette vorhanden, so zählt diese als zweifach besetzt, siehe Abb.3.5.

Für Lochdotierung spielen sich die Prozesse (bzgl. des Emery-Modells) also im Unterraum mit einem oder zwei Löchern ab. Dementsprechend wird der Projektionsraum beim Übergang zum Einband-Modell von den niederenergetischsten Zuständen

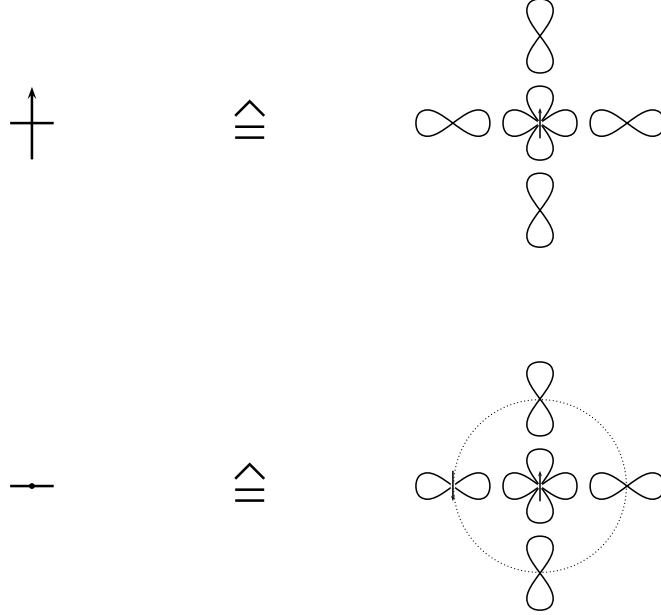


Abbildung 3.5: Abbildung des lochdotierten Emery-Modells auf ein effektives Einbandmodell. Die rechte Seite stellt die mit einem (oben) und zwei Löchern (unten) besetzte CuO-Plakette dar, die linke Seite gibt Besetzung des entsprechenden Platzes im Lochbild an.

mit einem bzw. zwei Löchern aufgespannt, d.h. er lautet

$$\text{Lin}_{\mathbf{C}} \{ |f_{1\downarrow}\rangle, |f_{1\uparrow}\rangle, |c_1\rangle \}, \quad (3.33)$$

Die Zustände $|f_{1\sigma}\rangle$ sind die beiden energetisch entarteten Zustände zum niedrigsten Eigenwert im Raum der Einfachbesetzung, $|c_1\rangle$ ist der Grundzustand bei zwei Löchern.

Aus diesem Raum hinausführende Beiträge werden mittels Störungstheorie erfaßt. Die Projektion auf die niedrigsten (lokalen) Zustände bei der Herleitung des Modells reflektiert die erwähnte Gültigkeit für niedrige Energien. Die direkte Projektion des Hamiltonoperators (3.11) und (3.12) ergibt die Hauptbeiträge der Hüpfprozeße sowie die on-site-Energie; die Störungsterme führen auf den Heisenbergaustausch und Korrekturen zu den Hüpftermen.

Drückt man die Übergänge zwischen den Zuständen über Hubbard-Operatoren

gemäß Abbildung 3.5 wie folgt aus,

$$\bar{c}_{1\sigma}^+ \hat{=} |c_1\rangle\langle f_{1,-\sigma}| \quad (3.34)$$

$$\bar{c}_{1\sigma} \hat{=} |f_{1,-\sigma}\rangle\langle c_1|, \quad (3.35)$$

wobei $\bar{c}_{1\sigma}^+$ und $\bar{c}_{1\sigma}$ die Erzeugung bzw. Vernichtung eines Zhang-Rice-Singulett mit einem zusätzlichen Loch beschreiben, so lautet der effektive Hamiltonoperator

$$H^{\text{eff}} = \sum_{1\sigma} \tilde{\varepsilon}_1^f \bar{c}_{1\sigma}^+ \bar{c}_{1\sigma} + \sum_{\mathbf{l}} \tilde{E}_1^c n_{1\downarrow} n_{1\uparrow} - \sum_{\langle ij, \sigma \rangle} t_{ij} \bar{c}_{i\sigma}^+ \bar{c}_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_j}{4} \right) \quad (3.36)$$

Die Hubbardoperatoren $\bar{c}_{i\sigma}^{(+)} = n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^{(+)}$ bewirken, daß nur einfach- und doppeltbesetzte Plätze auftreten. Der Operator $\hat{n}_1 = \sum_{\sigma} \bar{c}_{1\sigma} \bar{c}_{1\sigma}^+ = n_{1-\sigma}(1 - n_{1\sigma})$ liefert nur bei Anwendung auf einen genau einfachbesetzten Platz \mathbf{l} ein von 0 verschiedenes Ergebnis. Der Operator $\bar{n}_1 := \bar{c}_{1\sigma}^+ \bar{c}_{1\sigma} = n_{1\downarrow} n_{1\uparrow}$ „testet“, ob der Platz \mathbf{l} doppelt besetzt ist.

Die Einzelplatzenergie ϵ_1 berechnet sich also aus (3.18) unter Verwendung der renormierten on-site-Energien und aus (3.25). Durch die Dotierung treten mindestens zwei Werte für die Einzelplatzenergie auf, je nachdem, ob die betrachtete Plakette einem Dotieratom benachbart ist oder nicht. Prinzipiell kann sie auch zu mehr als ein Dotieratom als Nachbarn haben, so daß sich weitere Energiewerte ergeben, die vorliegende Arbeit beschränkt sich jedoch auf die beiden wichtigsten Fälle. Der Anteil der Einzelplatzenergie läßt sich umformen:

$$\sum_{1\sigma} \tilde{\varepsilon}_1^f \bar{c}_{1\sigma}^+ \bar{c}_{1\sigma} + \sum_{\mathbf{l}} \tilde{E}_1^c \bar{n}_1 = \sum_{\mathbf{l}} \left(\tilde{\varepsilon}_1^f + \tilde{E}_1^c \right) \bar{n}_1 \quad (3.37)$$

$$= \sum_{\mathbf{l} \in \text{La}} \left(\tilde{\varepsilon}_{\text{La}}^f + \tilde{E}_{\text{La}}^c \right) \bar{n}_1 + \sum_{\mathbf{l} \in \text{Sr}} \left(\tilde{\varepsilon}_{\text{Sr}}^f + \tilde{E}_{\text{Sr}}^c \right) \bar{n}_1 \quad (3.38)$$

$$= \left(\tilde{\varepsilon}_{\text{La}}^f + \tilde{E}_{\text{La}}^c \right) \sum_{\mathbf{l}} \bar{n}_1 + \sum_{\mathbf{l} \in \text{Sr}} \left[\left(\tilde{\varepsilon}_{\text{Sr}}^f + \tilde{E}_{\text{Sr}}^c \right) - \left(\tilde{\varepsilon}_{\text{La}}^f + \tilde{E}_{\text{La}}^c \right) \right] \bar{n}_1 \quad (3.39)$$

Der erste Term ist konstant und hängt nur vom Anteil an Sr ab, nicht von der Konfiguration der einzelnen Sr-Atome. Der zweite Term beschreibt gerade den Einfluß der ungeordneten Dotieratome auf die Ladungsträger, welcher in dieser Arbeit genauer untersucht werden soll. Die zugehörige Energie $\tilde{\varepsilon}_{\text{Sr}}^f + \tilde{E}_{\text{Sr}}^c - \tilde{\varepsilon}_{\text{La}}^f - \tilde{E}_{\text{La}}^c$ kann mit Hilfe der obigen Vorgehensweise abgeschätzt werden.

Die Bandstrukturrechnungen zeigen, daß die Kupfer-on-site-Energie an Stellen, die ein Sr-Dotieratom, als Nachbarn haben, höchstens um 0,1eV geringer als an undotierten, ausschließlich zu Nd benachbarten Plätzen. Diese Energieverschiebung um 0,1eV im Emery-Modell entspricht einer vernachlässigbaren Energieverschiebung um ca. 0,03eV im Einband-Modell. Da es in diesem Kapitel um die Abschätzung der Größenordnung der Energieverschiebung im Einband-Modell und um die Tendenz geht, mit welcher sich die Einflüsse der Dotierung auf das Einband-Modell übertragen, ist in Abbildung 3.6 die Differenz der Einzelplakettenenergien $\epsilon_{\text{La}} - \epsilon_{\text{Sr}} = \tilde{E}_{\text{La}}^c - \tilde{\epsilon}_{\text{La}}^f - \tilde{E}_{\text{Sr}}^c + \tilde{\epsilon}_{\text{Sr}}^f$ eines dotierten und eines undotierten Platzes in Abhängigkeit der Verschiebung der on-site-Kupferenergien $\epsilon_{\text{La}}^d - \epsilon_{\text{Sr}}^d$ graphisch dargestellt. Als Wertebereich ist dabei eine Umgebung des aus der Bandstrukturrechnung ermittelten Wertes gewählt. Für die übrigen Parameter wurden die Werte aus (2.2) eingesetzt, die Renormierung der Werte infolge der Coulomb-Terme ist hier gemäß Gleichungen (3.30),(3.31) und (3.32) berücksichtigt.

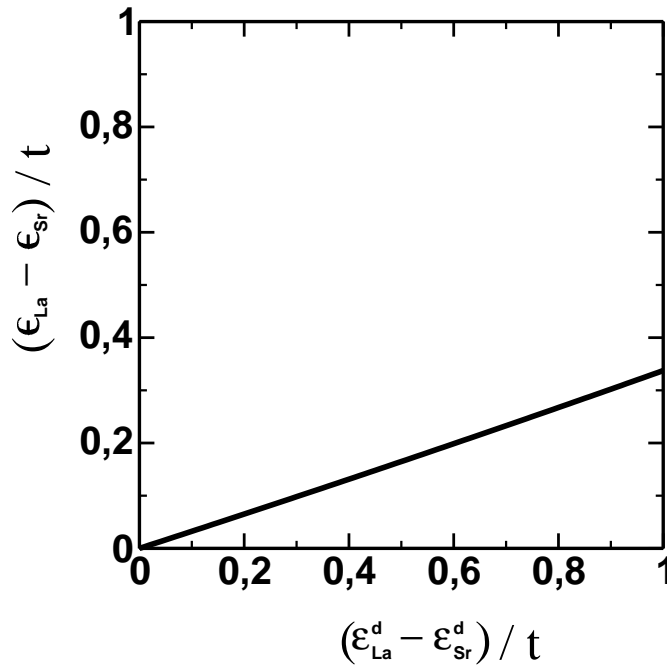


Abbildung 3.6: Zusammenhang zwischen dem dotierindizierten Energie-shift am Kupferplatz im Emery-Modell und am Gitterplatz im Einband-Modell für Lochdotierung. Auf der Abszisse ist die Änderung der (unrenormierten) Kupfer-on-site-Energie $\epsilon_{\text{La}}^d - \epsilon_{\text{Sr}}^d$ als Folge der Dotierung aufgetragen. Die Ordinate gibt die Differenz der Einzelplakettenenergien $\Delta_{\text{loch}} := \epsilon_{\text{La}} - \epsilon_{\text{Sr}}$ eines dotierten und eines undotierten Platzes an. Man erkennt einen annähernd linearen Zusammenhang, wobei die Energieverschiebung im Einband-Modell aber nur ca. ein Drittel derjenigen des Kupferplatzes beträgt.

3.3.2 Elektronendotiertes System - $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$

Bei der Dotierung mit Elektronen werden dem System Löcher entzogen. Für die Ableitung des Einband-Modells interessieren deshalb die Zustände der leeren oder einfachbesetzten Plaketten. Einem einfachbesetzten Gitterplatz im Einband-Modell entspricht eine mit einem Loch besetzte Plakette, einem doppeltbesetzten Platz eine leere Plakette, siehe Abb. 3.7. Da es nach der Abbildung auf das Einband-

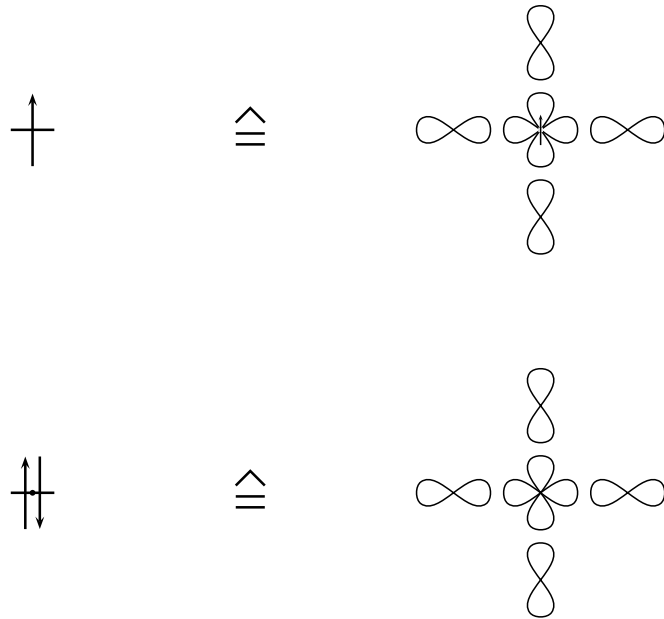


Abbildung 3.7: Abbildung des elektronendotierten Emery-Modells auf ein effektives Einband-Modell. Die rechte Seite stellt die mit einem Elektron besetzte (oben) und die leere CuO-Plakette dar, die linke Seite gibt die Besetzung des entsprechenden Platzes im Lochbild an.

Modell keine Rolle spielt, ob die Ladungsträger ursprünglich Löcher oder Elektronen sind, werden auch für die elektronendotierte Substanz die Hubbard-Operatoren mit $\bar{c}_{1\sigma}^{(+)}$ bezeichnet. Hier ist diese Schreibweise im Elektronenbild zu verstehen. D.h. für $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ beziehen sich die Hubbard-Operatoren mit Ausschluß der leeren Plätze auf die Erzeugung und Vernichtung von Elektronen, beim lochdotierten $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ hingegen auf die von Löchern. In Formeln entspricht also Abbildung 3.7 der Zuordnung

$$\bar{c}_{1\sigma}^+ \hat{=} |0\rangle\langle f_{1\sigma}| \quad (3.40)$$

$$\bar{c}_{1\sigma} \hat{=} |f_{1\sigma}\rangle\langle 0| \quad (3.41)$$

Dabei bedeutet $|f_{1\sigma}\rangle$ ein Zustand mit einem Elektron, $|0\rangle$ der Zustand mit zwei Elektronen (und somit ohne Loch). Man beachte, daß die Bedeutung der Erzeuger und Vernichter in (3.40) und (3.41) eine andere ist als in (3.34) und (3.35) sind. Letztere erzeugen ein Loch, erstere ein Elektron. Die Energie der Einzelplakette im Zustand $|0\rangle$ Fall ist $E_{n=0} = 0$; die Besetzung mit einem einzelnen Loch wurde bereits im vorigen Abschnitt behandelt. Wie im lochdotierten Fall ergibt auch hier die direkte Projektion von (2.1) die Hüpfsterme und die Einzelplatzenergie, während die zweite Ordnung Störungstheorie für Korrekturen dazu sowie den Heisenbergaustausch sorgt:

$$H^{\text{eff}} = \sum_{1\sigma} \tilde{\varepsilon}_1^f \bar{c}_{1\sigma} \bar{c}_{1\sigma}^+ - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \bar{c}_{i\sigma}^+ \bar{c}_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_j}{4} \right) \quad (3.42)$$

In diesem Fall sind leere Plätze ausgeschlossen, der effektive Hamiltonoperator enthält deshalb die Hubbard-Operatoren $\bar{c}_{i\sigma}^{(+)} = n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^{(+)}$.

Unter Verwendung von $\bar{c}_{1\sigma} \bar{c}_{1\sigma}^+ + \bar{c}_{1\sigma}^+ \bar{c}_{1\sigma} = n_{1-\sigma}$ läßt sich der erste Term analog zum lochdotierten Fall umformen:

$$\sum_{1\sigma} \tilde{\varepsilon}_1^f \bar{c}_{1\sigma} \bar{c}_{1\sigma}^+ = \sum_{1\sigma} \tilde{\varepsilon}_1^f n_{1,-\sigma} - \sum_{1\sigma} \tilde{\varepsilon}_1^f \bar{c}_{1\sigma}^+ \bar{c}_{1\sigma} \quad (3.43)$$

$$= \sum_1 \tilde{\varepsilon}_1^f n_1 - 2 \sum_1 \tilde{\varepsilon}_1^f \bar{n}_1 \quad (3.44)$$

$$= \sum_1 \tilde{\varepsilon}_1^f - \sum_1 \tilde{\varepsilon}_1^f \bar{n}_1 \quad (3.45)$$

$$= \sum_1 \tilde{\varepsilon}_1^f - \sum_{1 \in \text{Nd}} \tilde{\varepsilon}_{\text{Nd}}^f \bar{n}_1 - \sum_{1 \in \text{Ce}} \tilde{\varepsilon}_{\text{Ce}}^f \bar{n}_1 \quad (3.46)$$

$$= \sum_1 \tilde{\varepsilon}_1^f - \sum_1 \tilde{\varepsilon}_{\text{Nd}}^f \bar{n}_1 - \sum_{1 \in \text{Ce}} \left(\tilde{\varepsilon}_{\text{Ce}}^f - \tilde{\varepsilon}_{\text{Nd}}^f \right) \bar{n}_1 \quad (3.47)$$

Beim Übergang von der zweiten zur dritten Gleichung wurde die Vollständigkeit im Raum der ein- und zweifachbesetzten Zustände verwandt. Der Parameter für den Einfluß der Dotieratome ist die Differenz der Einzelplatzenergien einer Plakette mit und ohne Dotierung. Die Grundzustandsenergie $\tilde{\varepsilon}_1^f$ wird dabei mit den renormierten Werten der on-site-Energien gebildet. Die gemäß den Gleichungen (3.20),(3.30),(3.31) renormierten Differenzen $\tilde{\varepsilon}^p - \tilde{\varepsilon}_1^d$ betragen für Plätze ohne Dotierung

$$\tilde{\varepsilon}_{\text{Nd}}^p - \tilde{\varepsilon}_{\text{Nd}}^d = 4,66 \text{ eV}$$

und für Plätze mit Dotierung

$$\tilde{\epsilon}_{\text{Ce}}^p - \tilde{\epsilon}_{\text{Ce}}^d = 5,08\text{eV}$$

Dabei wurden die Parameter aus (2.2) verwendet und für die unrenormierte Energieverschiebung $\epsilon_{\text{Ce}}^d - \epsilon_{\text{Nd}}^d$ am Kupferplatz der in Tabelle 3.1 angegebene Wert von 0,4eV aus den Bandstrukturechnungen benutzt. Damit ist also

$$\Delta_{\text{el}} := \epsilon_{\text{Ce}} - \epsilon_{\text{Nd}} = \tilde{\epsilon}_{\text{Ce}}^f - \tilde{\epsilon}_{\text{Nd}}^f = 0,4\text{eV} \quad (3.48)$$

mit den renormierten Werten der Einzelplatzenergien gemäß Gleichungen (3.18), (3.28) und (3.29). In Abb.4.3 ist der Plaketten-Einzelplatzenergieshift in Abhängigkeit vom Energieshift der Kupfer-on-site-Energie des Emery-Modells dargestellt. Man erkennt einen näherungsweise linearen Zusammenhang, wobei die Energiever-

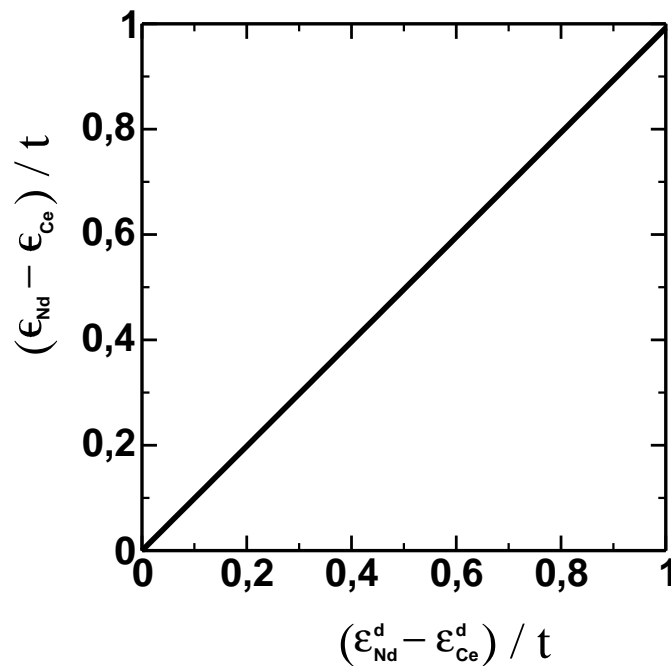


Abbildung 3.8: Zusammenhang zwischen dem dotierindizierten Energie-shift am Kupferplatz im Emery-Modell und am Gitterplatz im Einband-Modell für Elektronendotierung. Er ist, wie auch im lochdotierten Fall, näherungsweise linear, die Werte sind hier aber fast gleichgroß.

schiebung im Einband-Modell nur unmerklich geringer ist als der zugehörige Wert im Emery-Modell. D.h. die Differenz der on-site-Energien in den beiden Modellen ist von gleicher Größenordnung. Dem mit Hilfe der Bandstrukturrechnungen gefundenen Wert (Kupferplatzenergie infolge Ce-Dotierung um $0,4eV$ abgesenkt) entspricht im Einband-Modell ein Wert von $\Delta_{el} = -0,39eV$.

3.4 Modell

Ein-Band-Modelle und insbesondere das zweidimensionale t - J -Modell werden, wie ursprünglich von [Anderson 1987] vorgeschlagen, sehr häufig zur Beschreibung niederenergetischer Eigenschaften von Kupratsystemen verwendet. In letzter Zeit bestehen Zweifel an seiner Eignung zur Beschreibung der Eigenschaften, die für die Supraleitung wichtig sind. So führt [Su 2005] aus, daß es im zweidimensionalen Modell (mit Hüpfen ausschließlich zwischen nächsten Nachbarn) keine langreichweitigen d -Wellenkorrelationen gibt. Dennoch gibt es die qualitativen Eigenschaften des Normalzustandes wieder [Su 2005]. Da außerdem laut [Shih 2004] die Hopping-Terme zwischen zweit- und drittnächsten Nachbarn zu einer Verstärkung der d -Wellenkorrelation führen, wird das t - t' - t'' - J -Modell als Modell für die betrachteten Kupratsysteme verwendet.

In dieser Arbeit interessiert besonders der Einfluß der Dotieratome auf die Ladungsträger. Durch Verwendung von Hubbard-Operatoren, die an die jeweilige Ladungsträgerart angepaßt sind und im lochdotierten Fall Löcher, im elektronendotierten Fall Elektronen erzeugen bzw. vernichten, lassen sich die Hamiltonoperatoren der beiden Systeme auf die gleiche Weise schreiben:

$$\begin{aligned}
 H = \Delta \sum_{\text{l dotiert}} \bar{n}_1 &- t \sum_{\langle \mathbf{l}' \rangle, \sigma} \bar{c}_{\mathbf{l}\sigma}^+ \bar{c}_{\mathbf{l}'\sigma} - t' \sum_{\langle \mathbf{l}' \rangle_2, \sigma} \bar{c}_{\mathbf{l}\sigma}^+ \bar{c}_{\mathbf{l}'\sigma} - t'' \sum_{\langle \mathbf{l}' \rangle_3, \sigma} \bar{c}_{\mathbf{l}\sigma}^+ \bar{c}_{\mathbf{l}'\sigma} \\
 &+ J \sum_{\langle \mathbf{l}' \rangle} \left(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{l}'} - \frac{\hat{n}_1 \hat{n}_{\mathbf{l}'}}{4} \right)
 \end{aligned} \tag{3.49}$$

Die Bezeichnungen $\langle \mathbf{l}' \rangle_2$ und $\langle \mathbf{l}' \rangle_3$ bedeuten dabei, daß die zugehörigen Summen über zweit- bzw. drittnächste Nachbarn gebildet werden.

Dieses Modell wird im folgenden verwendet.

Der Einfluß der Dotieratome wird durch den Unterschied der Plaketten-on-site-Energien an dotierten und nichtdotierten Stellen beschrieben. Wie oben gezeigt, läßt sich hierfür der entsprechende Unterschied der Kupferplatz-on-site-Energien näherungsweise einsetzen. Diese Untersuchung war bisher noch nicht in der Literatur zu finden und wurde hier wahrscheinlich erstmalig angestellt.

Damit läßt sich der hier erfaßte Einfluß der Dotieratome auf die on-site-Energien der Gitterplätze in beiden Fällen relativ einfach berechnen. Es wäre natürlich wünschenswert, auch die energetischen Veränderungen der Sauerstoffatome zu berücksichtigen. Dem stehen jedoch an zwei Stellen Schwierigkeiten entgegen: Erstens ist die entsprechende energetische Verschiebung $\varepsilon_2^p - \varepsilon_1^p$ mit (1,2)=(Nd, Ce) bzw. (La, Sr) kaum aus den „Spaghettis“ der Bänder zu ermitteln. Während die Kupferbänder leicht aufzufinden und die Verschiebung an der Fermikante einfach abzulesen ist, ist die Zuordnung der Sauerstoffbänder sehr schwierig. Zweitens läßt sich auch die Änderung der Sauerstoff-on-site-Energie nicht so einfach aus dem Emery-Modell auf das Einband-Modell umrechnen, wie das beim Kupfer der Fall ist.

Es sei an dieser Stelle nochmals betont, daß diese Werte, auch wenn sie mit der obenstehenden Genauigkeit aufgeschrieben sind, vor allem die Größenordnung der Parameter angeben sollen. Es ist sicher unrealistisch, aus ihnen die Energiewerte auf einer 0,01eV-Skala genau ablesen zu wollen. Die wesentliche Erkenntnis aus diesem Kapitel ist jedoch, daß *bei Elektronendotierung* die Differenz der on-site-Energien zwischen einer dotierten und einem undotierten Plakette in etwa genauso groß ist wie die aus den Bandstrukturrechnungen gewonnene Verschiebung der on-site-Energie des Kupfers. Damit ist letztere ein guter Wert für den Parameter Δ des im folgenden verwendeten t - t' - t'' - J -Modells (3.49). Demgegenüber ist die Differenz der on-site-Energien im Einband-Modell im *Lochdotierungsfall* nur etwa ein Drittel so groß wie der Unterschied der Energien des Emery-Modells am Kupferplatz. Zusammen mit dem ohnehin kleinen Wert, welcher sich für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ aus den Bandstrukturrechnungen ergibt, ist die Energie Δ für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ eine Größenordnung kleiner als für das elektronendotierte $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Der elektrostatische Einfluß der Dopingatome ist somit für die beiden betrachteten Substanzen deutlich verschieden.

Zum Abschluß des Kapitels folgt eine Zusammenstellung der Parameter des Einband-Modell für die beiden betrachteten Systeme. Hierbei wird t als Energieeinheit gewählt, d.h. alle Energien werden durch t geteilt angegeben (und die Werte entsprechend gerundet). Die Parameter, wie sie auch im folgenden Kapitel verwendet werden, lauten damit folgendermaßen:

	t'/t	t''/t	Δ/t	J/t
$\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$	-0,03	0,03	0,1	0,26
$\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$	-0,16	0,10	0,8	0,23

Tabelle 3.2: Modellparameter im Einbandmodell (3.49), bezogen auf t . Die Werte für die Hopping-Integrale und Δ wurden hierbei aus den Bandstrukturrechnungen ermittelt, der Heisenbergaustausch in der letzten Spalte ist aus der Literatur übernommen [Sulewski 1990, Hayden 1990].

4 Modifizierte Verunreinigungsmittelung für Greensfunktionen

Für die Beschreibung von Kupratsystemen wurden bisher vor allem translationsinvariante Systeme betrachtet, bei denen das Bloch-Theorem anwendbar ist. Demgegenüber stellen aber die mit Seltenerd-Atomen dotierten Basissubstanzen der Kuprat-Hochtemperatursupraleiter Beispiele dar, bei denen zufällig im System angeordnete Teilchen große Auswirkungen auf physikalische Eigenschaften haben. Eine dieser Eigenschaften ist die Stabilität der antiferromagnetischen Phase (Abb. 2.2). Während diese beim lochdotierten $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ nur bis etwa 3% Dotierung mit Sr besteht, ist sie im elektronendotierten Fall von $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ wesentlich stabiler und besteht bis etwa 15% Dotierung mit Ce). Um die Einflüsse der ungeordneten Partikel zu berücksichtigen, müssen diese Unordnung auf geeignete Weise in das t - J -Modell integriert werden. Im vorliegenden Fall geschieht dies dadurch, daß zu den Hüpfer- und Heisenbergtermen noch ein Term mit gitterplatzabhängigen on-site-Energien addiert wird. Dieser Term soll in nullter Näherung den Einfluß repräsentieren, der durch die Rumpffunktionen der Dotieratome entsteht. Diese geben Ladungsträger an die benachbarte Kupferoxidebene ab, wodurch von ihnen selbst Rumpffunktionen zurückbleiben, die eine andere Ladung aufweisen als die Seltenerdionen der undotierten Substanz. Der o.g. Unordnungsterm soll den Einfluß des dadurch auftretenden elektrostatischen Potentials erfassen. Dieses wirkt attraktiv auf die Ladungsträger, wodurch sie an den Dotierstellen gepinnt werden. Wenn nun dieses Potential für die beiden Substanzen unterschiedlich ist, dann könnte die daraus resultierende unterschiedliche Beweglichkeit der Ladungsträger einen Mechanismus darstellen, der auf die unterschiedliche Stabilität der antiferromagnetischen Phase führt.

In diesem Kapitel soll eine Methode zur Untersuchung des erweiterten t - t' - t'' - J -Modell mit zufallsverteiltem Potential beschrieben werden. Dabei wollen wir den vergleichsweise einfachen Fall eines einzelnen zusätzlichen Ladungsträgers betrachten. Dies erleichtert die Interpretation der Ergebnisse, da keine Effekte infolge der Wechselwirkung zwischen Ladungsträgern in Betracht gezogen werden müssen. Trotzdem läßt auch dieser einfache Fall bereits Schlußfolgerungen über das

System mit höherer Ladungsträgerkonzentration zu [Tohyama 1994, Gooding 1994]. Auf diese wird später eingegangen.

4.1 Modell

Wie bereits in Abschnitt 3.1 angedeutet, wird ein erweitertes t - J -Modell betrachtet, welches durch den Hamiltonoperator

$$H = H_0 + H_\epsilon + H_B$$

mit den Anteilen

$$H_0 = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} \bar{c}_{i\sigma}^+ \bar{c}_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_j}{4} \right) \quad \text{mit } t_{ij} = \begin{cases} t & \text{für } |\mathbf{i} - \mathbf{j}| = 1 \\ t' & \text{für } |\mathbf{i} - \mathbf{j}| = \sqrt{2} \\ t'' & \text{für } |\mathbf{i} - \mathbf{j}| = 2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.1)$$

$$H_\epsilon = \sum_{\mathbf{l}} \epsilon_{\mathbf{l}} \bar{n}_{\mathbf{l}}$$

$$H_B = \sum_{\mathbf{l}} h_{\mathbf{l}} S_{\mathbf{l}}^z$$

beschrieben wird und auf einem zweidimensionalen Quadratgitter mit Basisvektoren der Länge 1 definiert ist. Jeder Platz soll stets mit einem oder zwei Ladungsträgern besetzt sein; leere Plätze sind durch die Verwendung der sog. Hubbard-Operatoren

$$\bar{c}_{i,\sigma}^+ = n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma}^+ \quad \text{und} \quad \bar{c}_{i,\sigma} = n_{i,-\sigma} c_{i,\sigma} \quad (4.2)$$

ausgeschlossen. Dies ist berechtigt, wenn leere Plätze eine sehr hohe Energie aufweisen. Für das hier behandelte Modell bedeutet dies, daß es bei oder oberhalb von Halfüllung betrachtet wird, d.h. die Ladungsträgeranzahl ist größer oder gleich der Anzahl der Gitterplätze.

Die Hubbard-Operatoren erfüllen nicht die normalen Fermi-Vertauschungsrelationen. Der Operator $\bar{c}_{i,\sigma}^+$ beschreibt die Erzeugung eines Ladungsträgers mit Spin σ am Platz \mathbf{i} unter der Bedingung, daß dort bereits ein Ladungsträger mit Spin $-\sigma$ vorhanden ist. Dabei kann es sich um ein Elektron oder Loch handeln, im folgenden wird der Kürze halber nur von Elektronen die Rede ist. Entsprechend

vernichtet $\bar{c}_{\mathbf{i},\sigma}$ ein Elektron mit Spin σ am Platz \mathbf{i} , wenn dort zwei Ladungsträger vorhanden waren. Schließlich wird noch die Abkürzung $\bar{n}_{\mathbf{i}} = n_{\mathbf{i}\downarrow} n_{\mathbf{i}\uparrow}$ verwendet, die, summiert über \mathbf{i} , die Anzahl der doppeltbesetzten Plätze ergibt.

Der Term H_0 in (4.1) repräsentiert ein verallgemeinertes translationsinvariantes t - J -Modell mit Hüpfanteilen zu den erst-, zweit- und drittnächsten Nachbarn sowie einem antiferromagnetischen Heisenbergaustausch zwischen benachbarten Plätzen.

Der Beitrag H_ϵ stellt die Erweiterung um die Unordnung dar. Er enthält eine Summe über Gitterplatzenergien $\epsilon_{\mathbf{i}}$ der Ladungsträger an den einzelnen Plätzen, wobei die Werte dieser Energien $\epsilon_{\mathbf{i}}$ an den einzelnen Plätzen verschieden sein können. Die Verteilung dieser Werte wird als zufällig angenommen, womit H_ϵ die Translationsinvarianz von H zerstört.

Schließlich wird noch ein *Zeeman-Term* H_B betrachtet. Er beschreibt die Kopplung der Spins an lokale magnetische Felder $h_{\mathbf{i}}$ an den einzelnen Gitterplätzen und ermöglicht damit die Berechnung von lokalen magnetischen Momenten. Desweiteren zerstört er die $SU(2)$ -Symmetrie der Spinoperatoren. In der vorliegenden Arbeit soll $h \rightarrow 0$ betrachtet werden, d.h. es wird nur der Effekt der Symmetriebrechung berücksichtigt. Sie ist für die Beschreibung der antiferromagnetischen Phase mit Hilfe der gewählten Methode wichtig. Da sonst jedoch kein weiterer Einfluß des Magnetfeldes betrachtet wird, wird dieser Term im folgenden in der Notation weggelassen, auch wenn er über die Symmetriebrechung einght.

Die Bedeutung der verschiedenen Beiträge des Hamiltonoperators ist in Bild 4.1 veranschaulicht.

Eine physikalische Anwendung des Modells (4.1) auf das Kupratsystem $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ wird in Kapitel 5 besprochen. Aufgrund dieser Anwendung sollen in dieser Arbeit vor allem die Parameterbereiche

$$\begin{aligned} t'/t &= -0,1 \dots 0,1 \\ t''/t &= -0,1 \dots 0,1 \\ J/t &= 0,2 \dots 0,3 \\ (\epsilon^{\max} - \epsilon^{\min})/t &= 0 \dots 0,8 \end{aligned} \tag{4.3}$$

diskutiert werden. Der Hüpfterm t zu nächsten Nachbarn soll als Normierung aller Energien verwendet werden. Nur die Verhältnisse t'/t , t''/t und J/t spielen für die physikalischen Eigenschaften des Modells eine Rolle. Neben den Korrelationseffekten als Folge des Ausschlusses von leeren Zuständen sind die magnetischen Kopplungen ein wesentliches Merkmal des Modells. Wegen $J > 0$ tragen sie antiferromagnetischen Charakter. Weiterhin ist der Hamiltonoperator teilchenzahlerhaltend, $[H, \sum_i n_i] = 0$, d.h. man kann seine Eigenzustände nach der Elektronenanzahl oder -dichte klassifizieren. Eine wichtige Rolle spielt dabei die sog. „Halbfüllung“. Darunter versteht man den Fall, daß gerade genau so viele Ladungsträger wie Gitterplätze vorliegen. Der Grundzustand von H wird hier durch ein antiferromagnetisch geordnetes Gitter, einen sogenannten „Quanten-Néel-Zustand“, beschrieben, bei dem

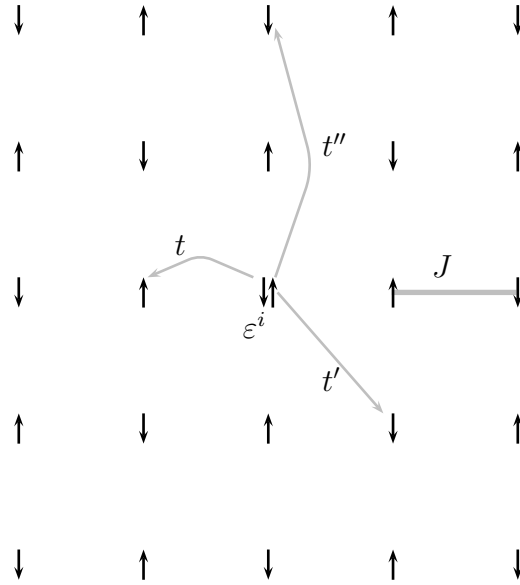


Abbildung 4.1: Wirkung der Terme des Hamiltonoperators (4.1): Hüpfen zu nächsten Nachbarn (t), übernächsten Nachbarn (t') und drittnächsten Nachbarn (t''). J symbolisiert den antiferromagnetischen Austausch zwischen nächsten Nachbarn, ε^i die on-site-Energie am Gitterplatz i .

an jedem Gitterplatz genau ein Elektron vorhanden ist und das Gitter in zwei Untergitter mit vorwiegend \uparrow - bzw. \downarrow -Ausrichtung des Spins zerfällt. Gegenüber dem klassischen Néel-Zustand sind im Quanten-Néel-Zustand noch zusätzlich Spinfluktuationen enthalten. Die Hüpfsterme ergeben bei Anwendung auf diesen Zustand 0, da infolge der Hubbard-Operatoren leere Gitterplätze ausgeschlossen sind, diese aber durch Hüpfen bei Halbfüllung zwangsläufig entstehen würden. Die Hoppingsterme erlangen somit erst Bedeutung, wenn in das halbgefüllte System weitere Ladungsträger eingebracht werden. Dieser Fall soll im nächsten Kapitel untersucht werden.

4.2 Elektronische Anregungen bei Halbfüllung

4.2.1 Greensfunktion

Ein erstes Ziel ist die Berechnung der Anregungsenergien, die auftreten, wenn dem halbgefüllten System ein einzelnes Elektron mit Impuls \mathbf{k} und Spin \uparrow hinzugefügt

wird. Dazu betrachten wir die Greensche Funktion bei Temperatur $T = 0$

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(z) = \langle \psi | \left[\bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}, \frac{1}{z - H} \bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \right]_+ | \psi \rangle \quad (4.4)$$

Hierbei ist $z = E + i\eta$ mit $\eta > 0$, d.h. wir betrachten eine retardierte Greensfunktion wobei noch der Grenzübergang $\eta \rightarrow 0^+$ zu bilden ist. Der Operator

$$\bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{i}\in\downarrow} e^{i\mathbf{k}\mathbf{i}} c_{\mathbf{i}\uparrow}^+ \quad (4.5)$$

erzeugt ein zusätzliches Elektron mit Spin \uparrow . Da die Summe nur über die Plätze des \downarrow -Untergitters läuft, führt $\bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+$ zu einer Doppelbesetzung im \downarrow -Untergitter ($\frac{N}{2}$ ist die Anzahl der Plätze in jedem der beiden Untergitter). Zunächst sei kein äußeres magnetisches Feld vorhanden (bis auf das oben erwähnte infinitesimale Feld, welches die Symmetriebrechung bewirkt), so daß die Anregungsenergien nicht von dem betrachteten Untergitter abhängen, auf welchem das Teilchen erzeugt wird. Zwar können die unterschiedlichen on-site-Energien (H_ϵ -Term) verschiedenartig auf die Untergitter verteilt sein, nach Durchführung der Konfigurationsmittelung spielt dies jedoch keine Rolle mehr (s.u.). Der Spinindex der Greenschen Funktion wird darum im folgenden zur Verkürzung der Schreibweise weggelassen.

Untersucht wird der Fall $T = 0$, d.h. der Vektor $|\psi\rangle$, mit dem die Greensche Funktion (4.4) gebildet wird, ist der Grundzustand des Hamiltonoperators (4.1) bei Halbfüllung. Das ist in diesem Fall gerade der Quanten-Néel-Zustand, da die Hüpfsterme und der on-site-Anteil in (4.1) infolge der Hubbard-Operatoren entfallen und sich der Hamiltonoperator auf den Heisenbergaustausch und den Zeeman-Term reduziert.

Der Grundzustand wird im weiteren durch den Néel-Zustand genähert, $|\psi\rangle \approx |\phi_{\text{Néel}}\rangle$, bei welchem benachbarte Spins streng antiparallel ausgerichtet und die Spinfluktuationen vernachlässigt sind. Diese Näherung sollte zwar die Ergebnisse quantitativ beeinflussen. Die grundlegenden Eigenschaften der Ladungsanregungen sollten jedoch erhalten bleiben.

4.2.2 Mittelung

Die Unordnung des Systems (4.1) wird durch die zufallsverteilten on-site-Energien $\epsilon_{\mathbf{i}}$ charakterisiert. Die Greensfunktion (4.4) und die daraus berechneten Größen sind für eine spezielle vorliegende Verteilung der möglichen Werte $\epsilon_{\mathbf{i}}$ auf die Gitterplätze (im folgenden auch als „Konfiguration“ bezeichnet) gültig. Für große reale Systeme

erwartet man jedoch, daß die makroskopischen physikalischen Eigenschaften nicht von der konkreten Konfiguration der einzelnen Atome abhängen, die zudem auch experimentell nicht bekannt ist. Dies gilt zumindest dann, wenn, wie hier, wirkliche Zufallsverteilung angenommen wird, also z.B. kein Clustern der Dotieratome auftritt. Aus diesem Grunde interessiert uns die über alle möglichen Verteilungen gemittelte Greensfunktion. Diese Mittelung wird nun durchgeführt. Dabei beschränkt sich die vorliegende Arbeit auf den Fall, daß nur endlich viele verschiedene on-site-Energiewerte vorliegen. D.h. für jeden Gitterplatz kann die on-site-Energie ϵ_i nur die Werte $\epsilon^1, \epsilon^2, \dots, \epsilon^n$ annehmen. Die zugehörigen Konzentrationen seien c_1, c_2, \dots, c_n . Die gemittelte Greensfunktion erhält man, indem man die Greensfunktionen zu allen Konfigurationen bildet, die mit den vorgegebenen Konzentrationen möglich sind, sie aufsummiert und durch ihre Anzahl teilt. Für eine Funktion $F(\epsilon_i)$, die ausschließlich von der Gitterplatzenergie an einem einzelnen Gitterpunkt \mathbf{i} abhängt, lautet z.B. der Mittelwert [Nolting 1997]

$$\overline{F(\epsilon_i)} = \sum_{\alpha=1}^n c_{\alpha} F(\epsilon^{\alpha}) \quad (4.6)$$

4.2.3 Projektionstechnik

Die Projektionstechnik von Mori und Zwanzig [Mori 1965, Forster 1990, Fulde 1995] hat sich als nützliches Verfahren zur Berechnung physikalischer Größen auch bei stark korrelierten Systemen erwiesen. Ihre Grundidee besteht darin, die Dynamik in einem Teilraum des Liouville-Raumes der linearen Operatoren exakt zu berechnen und den Einfluß des dazu komplementären Raumes in Form von Selbstenergien zu berücksichtigen. Die Dynamik des Systems wird durch sogenannte „relevante Operatoren“ oder „dynamische Variable“, eine Untermenge des Liouville-Raumes, beschrieben, die eine Basis des o.g. Teilraumes bilden.

Zur Entwicklung dieser Methode wird die Notation

$$(A|B) = \langle \psi \left| [A^+, B]_+ \right| \psi \rangle, \quad (4.7)$$

eingeführt. Die runden Klammern deuten dabei an, daß ein Ausdruck $(\cdot|\cdot)$ die Eigenschaften eines Skalarproduktes besitzt, was die Anwendung der Projektionstechnik begünstigt. Die Greensfunktion (4.4) schreibt sich damit als

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(z) = \left(\bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \left| \frac{1}{z - H} \right| \bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \right) \quad (4.8)$$

Mit Hilfe der relevanten Operatoren, die im folgenden mit $\{B_{\mu}\}$ bezeichnet und später genauer definiert werden, läßt sich eine Matrix von Greensfunktionen mit

den Matrixelementen

$$\mathcal{G}_{\mu\nu}(z) = \left(B_\mu \left| \frac{1}{z - H} B_\nu \right. \right) \quad (4.9)$$

definieren. Im Rahmen der Projektionstechnik erhält man für die Matrixelemente die Bewegungsgleichungen [Mori 1965, Zwanzig 1961, Forster 1990]

$$\sum_\lambda \left\{ z \delta_{\mu\lambda} - \sum_\kappa [\Omega_{\mu\kappa} + \Sigma_{\mu\kappa}(z)] \chi_{\kappa\lambda}^{-1} \right\} \mathcal{G}_{\lambda\nu}(z) = \chi_{\mu\nu} \quad (4.10)$$

Dabei wurden die Größen

$$\chi_{\mu\nu} = (B_\mu | B_\nu) \quad \Omega_{\mu\nu} = (B_\mu | H B_\nu) \quad (4.11)$$

$$\Sigma_{\mu\nu}(z) = (B_\mu | H \mathcal{Q} \frac{1}{z - \mathcal{Q} H \mathcal{Q}} B_\nu)$$

eingeführt. Die aus diesen Elementen bestehenden Matrizen werden oft als Suszeptibilitäts-, Frequenz- und Selbstenergiematrix bezeichnet. Die Frequenzmatrix ist die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators im Raum der relevanten Operatoren, wohingegen die Selbstenergiematrix den Einfluß des dazu komplementären Unterraumes beschreibt. Dabei ist \mathcal{Q} der Projektor auf diesen Komplementärraum. Um die Greensfunktion (4.4) berechnen zu können, müssen die Operatoren $\bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+$ in der Menge $\{B_\mu\}$ enthalten sein.

Die Gleichung (4.10) der Projektionstechnik ist zwar exakt, erfordert aber die Kenntnis der Selbstenergie. Da diese oft schwer bis gar nicht zu berechnen ist, sind Näherungen erforderlich. Deshalb ist es günstig, wenn der Projektionsraum so groß gewählt werden kann, daß er die wesentlichen Aspekte der Systemdynamik bereits enthält. Dann ist der Einfluß des dazu senkrechten Raumes gering und die Selbstenergie kann vernachlässigt werden.

4.2.4 Einführung von Stringoperatoren

In diesem Sinne sollen nun passende Operatoren $\{B_\mu\}$ für das vorliegende System gewählt werden. Dabei kann man sich an früheren Arbeiten [Becker 1993, Eder 1990a, Becker 1990, Eder 1990b, Vojta 1998, Vojta 1995] orientieren, die ähnliche Untersuchungen für das translationsinvariante t - J -Modell durchgeführt haben. Dort wurde im Fall von Halbfüllung mit einem zusätzlichen

Ladungsträger der Grundzustand näherungsweise durch eine Linearkombination sogenannter Stringzustände beschrieben. Diese spielen bei der Bewegung eines Lochs oder Elektrons in einem spinpolarisierten Hintergrund eine wesentliche Rolle. Ist dieser antiferromagnetisch geordnet, so bestehen diese Strings aus dem Ladungsträger verbunden mit einer Kette von Spinflips. Um verlässliche Resultate für die elektronischen Anregungen des normalen t - J -Modells zu finden, genügt es, nur wenige Strings mit relativ kurzer Länge (Anzahl der Spinflips) zu berücksichtigen. Für qualitative Aussagen genügen sogar schon Strings bis zur Länge zwei, d.h. Strings mit keinem, einem und zwei Spinflips. Die Mitnahme längerer Strings beeinflusst zwar die Bandbreite der Dispersionsrelation noch etwas [Vojta 1998], läßt ihre Form aber nahezu unverändert.

Sind diese Stringzustände auch ein sinnvoller Ansatz für das vorliegende Modell mit Hüpfen zu den zweit- und drittnächsten Nachbarn? Die Erweiterung um die zusätzlichen Hüpfsterme erfordert in dieser Hinsicht keine Veränderung des Basissatzes, da Zustände mit einem einzelnen Ladungsträger Eigenzustände zu diesen Termen sind, d.h. symbolisch

$$H_{t',t''} \bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ |\text{Néel}\rangle \sim \bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ |\text{Néel}\rangle.$$

Das ist deshalb der Fall, weil beide Zusatzterme ein Hüpfen auf demselben Untergitter vermitteln und der Erzeugungsoperator $\bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+$ ebenfalls nur auf einem Untergitter wirkt. Sind mehr Ladungsträger als bei Halbfüllung vorhanden, so gilt diese Aussage näherungsweise bei kleinen Konzentrationen, wenn man die Ladungsträger als unabhängig voneinander ansehen kann. Für ein einzelnes Elektron stimmt sie exakt. Bei der zweiten Erweiterung gegenüber dem t - J -Modell in Form der Gitterplatzenergien ist ebenfalls nicht davon auszugehen, daß sie eine andere Wahl der Basis nötig macht. Im Gegenteil, zumindest für die späteren Anwendungen auf die Kupratsysteme kann man erwarten, daß die Bewegung der Ladungsträger infolge der Dotieratome tendenziell abgeschwächt wird und dadurch Zustände mit längeren Strings weniger wichtig werden. Der Grund dafür ist, daß die on-site-Energien der Dotieratome niedriger sind als die der substituierten Atome (siehe Kapitel 2) und damit wie attraktive Potentiale wirken, welche die Ladungsträger mehr oder weniger stark lokalisieren.

Es sei noch bemerkt, daß weitere mögliche Anregungen wie z.B. Spinwellen sowie die Kopplung der Stringzustände zu diesen vernachlässigt werden. Diese Kopplung wird jedoch wichtig, wenn man Dotierkonzentrationen nahe der antiferromagnetischen Phasengrenze [Oles 1989, Ko 1990] betrachtet.

Im Gegensatz zum translationsinvarianten Modell, bei dem man Strings gleicher Länge, aber verschiedener Geometrie zu einem kompakten relevanten Operator zusammenfassen kann, müssen nun Strings verschiedener Anordnung einzeln betrachtet werden (siehe dazu auch [Vojta 1998]). Dies ist eine Folge des H_ϵ -Terms

in (4.1), der die Translationsinvarianz des Systems bricht.

Man muß nun vier Strings der Länge eins und zwölf der Länge zwei einführen, wenn man sich auf Strings bis zur Länge zwei beschränkt. Die gewählte Basis besteht somit aus den folgenden Elementen: Einem String der Länge null, was fouriertransformiert dem einfachen Erzeugungsoperator $\bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+$ eines Elektrons auf dem \downarrow -Untergitter entspricht:

$$B_0(\mathbf{k}) = \bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \quad (4.12)$$

vier Strings der Länge eins: ($m = 1, \dots, 4$)

$$B_m(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{i} \in \downarrow} e^{i\mathbf{k}\mathbf{i}} \bar{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{s}_m, \downarrow}^+ S_{\mathbf{i}}^+ \quad (4.13)$$

und zwölf Strings der Länge zwei: ($m = 5, \dots, 16$)

$$B_m(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{i} \in \downarrow} e^{i\mathbf{k}\mathbf{i}} \bar{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{t}_m, \uparrow}^+ S_{\mathbf{i}+\mathbf{s}_m}^- S_{\mathbf{i}}^+, \quad (4.14)$$

Die hier eingeführten Vektoren \mathbf{s}_m und \mathbf{t}_m kennzeichnen die verschiedenen Geometrien der Strings gemäß Abb. 4.2 und Tabelle 4.1.

Die in (4.9)-(4.11) verwendeten Indizes μ, ν bestehen somit jeweils aus dem Quasiimpuls \mathbf{k} sowie dem Geometrieindex m der Strings. Der Vektor \mathbf{k} läuft dabei über die Brillouin-Zone eines Untergitters. Sie ist infolge der größeren Gitterkonstante gerade halb so groß wie die Brillouin-Zone des zugrundeliegenden Kristallgitters, siehe Abb. 4.3. Die Brillouin-Zonen für die beiden magnetischen Untergitter sind identisch.

Damit lassen sich die Suszeptibilitäts- und die Frequenzmatrix berechnen. Die Selbstenergie wird vernachlässigt, da angenommen wird, daß die betrachteten Stringoperatoren bereits die wesentliche Physik beschreiben und weitere Prozesse deshalb geringen Einfluß auf die Greensfunktionsmatrix haben.

Man findet leicht, daß die Suszeptibilitätsmatrix orthonormal ist:

$$[\chi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}]_{mm'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{mm'} \quad (4.15)$$

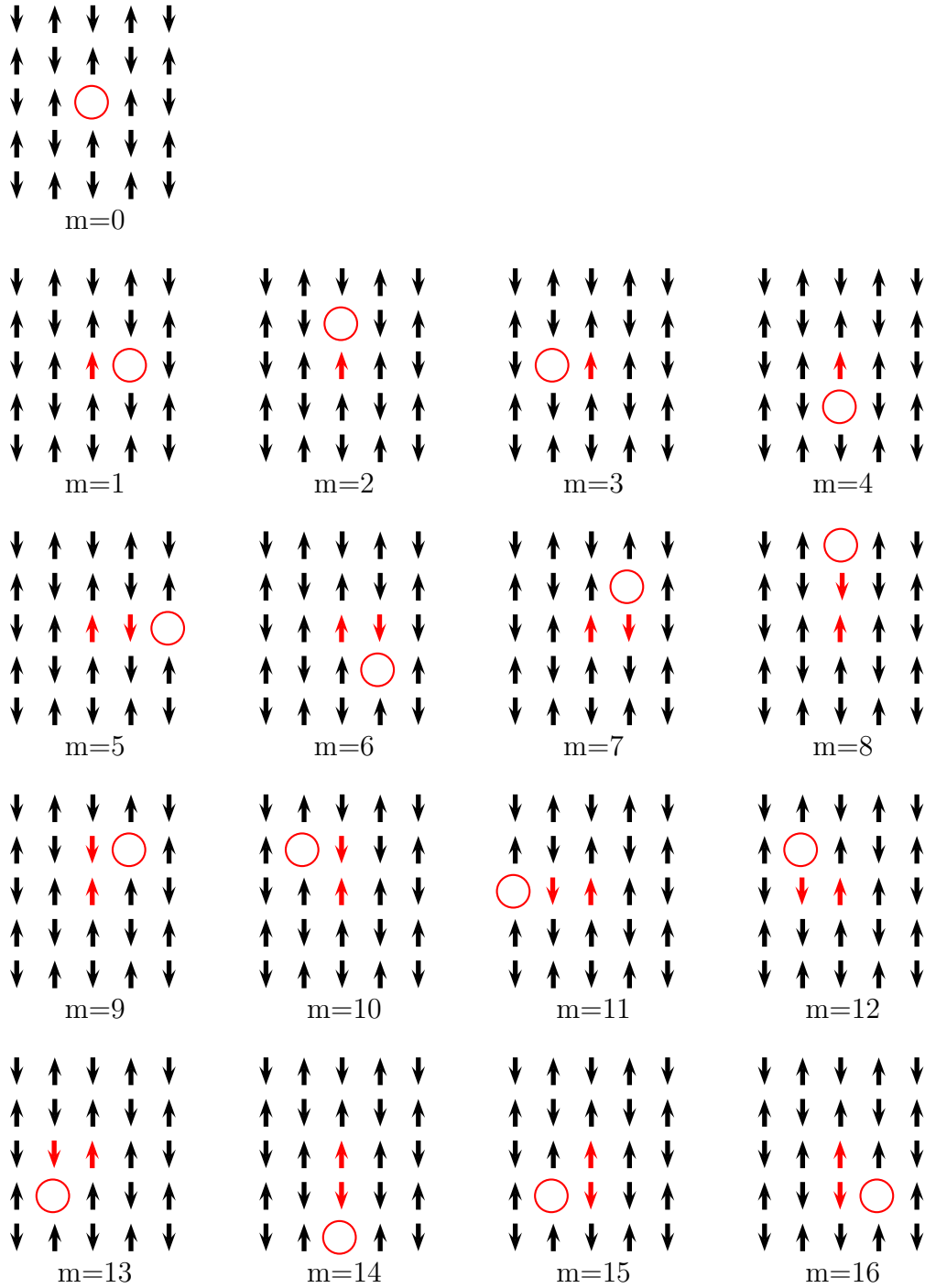


Abbildung 4.2: Stringoperatoren für die Längen 0, 1 und 2; vgl. auch [Vojta 1998]. Der Ausgangsplatz der Strings befindet sich jeweils im Zentrum des betrachteten Gitters, gegenüber dem Ausgangsgitter gedrehte Spins sind rot dargestellt.

Bei der Berechnung der Frequenzmatrix ist es sinnvoll, den Hamiltonoperator (4.1) in einen translationsinvarianten Anteil H_0 , der den Heisenbergaustausch sowie die Hüpfsterme umfaßt, und den on-site-Energierterm $H_\epsilon = \sum_1 \epsilon_1 \bar{n}_1$ aufzuspalten. Man

Index m	s_m	t_m
0	-	-
1	\mathbf{e}_x	-
2	\mathbf{e}_y	-
3	$-\mathbf{e}_x$	-
4	$-\mathbf{e}_y$	-
5	\mathbf{e}_x	$2\mathbf{e}_x$
6	\mathbf{e}_x	$\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y$
7	\mathbf{e}_x	$\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y$
8	\mathbf{e}_y	$2\mathbf{e}_y$
9	\mathbf{e}_y	$\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y$
10	\mathbf{e}_y	$\mathbf{e}_y - \mathbf{e}_x$
11	$-\mathbf{e}_x$	$-2\mathbf{e}_x$
12	$-\mathbf{e}_x$	$\mathbf{e}_y - \mathbf{e}_x$
13	$-\mathbf{e}_x$	$-\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y$
14	$-\mathbf{e}_y$	$-2\mathbf{e}_y$
15	$-\mathbf{e}_y$	$-\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y$
16	$-\mathbf{e}_y$	$\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y$

Tabelle 4.1: Geometrien der Stringvektoren

erhält damit (vor der Konfigurationsmittelung (4.6))

$$[\Omega_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0]_{mm'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (B_m(\mathbf{k}) | H_0 B_{m'}(\mathbf{k})) =: \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (\Omega_{\mathbf{k}}^0)_{mm'} \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} [\Omega_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\epsilon]_{mm'} &= \delta_{mm'} (B_m(\mathbf{k}) | H_\epsilon B_m(\mathbf{k}')) \\ &= \delta_{mm'} \frac{2}{N} \begin{cases} \sum_{\mathbf{j} \in \downarrow} \epsilon_{\mathbf{j}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{j}} & \text{für } m = 0 \\ \sum_{\mathbf{j} \in \uparrow} \epsilon_{\mathbf{j}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{j}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{s}_m} & \text{für } m \in \{1, \dots, 4\} \\ \sum_{\mathbf{j} \in \downarrow} \epsilon_{\mathbf{j}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{j}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{t}_m} & \text{für } m \in \{5, \dots, 16\} \end{cases} \quad (4.17) \end{aligned}$$

Die 17×17 -Matrix $(\Omega_{\mathbf{k}}^0)_{mm'}$ ist in Anhang C dargestellt.

Die Diagonalität von Ω^0 bezüglich der Quasiimpulse \mathbf{k}, \mathbf{k}' ist Folge der Translationsinvarianz von H_0 . Diese ist für den zweiten Anteil Ω^ϵ nicht gegeben, weshalb nichtverschwindende Matrixelemente zu verschiedenen Quasiimpulsen \mathbf{k}, \mathbf{k}' existieren. Ω^ϵ ist jedoch diagonal bezogen auf die Geometrie der Strings m . Das hat seine Ursache darin, daß H_ϵ weder die Position der Ladungsträger noch die Spins des Gitters beeinflusst und damit der String von Spindefekten, welcher in (4.17) durch die Anwendung von $B_{m'}(\mathbf{k}')$ auf dem Néelzustand erzeugt wird, von einem String gleicher Geometrie wieder vernichtet werden muß, d.h. für den Bra-Vektor $(B_m^+(\mathbf{k}) |$ muß gelten $m = m'$ (s. Anhang A).

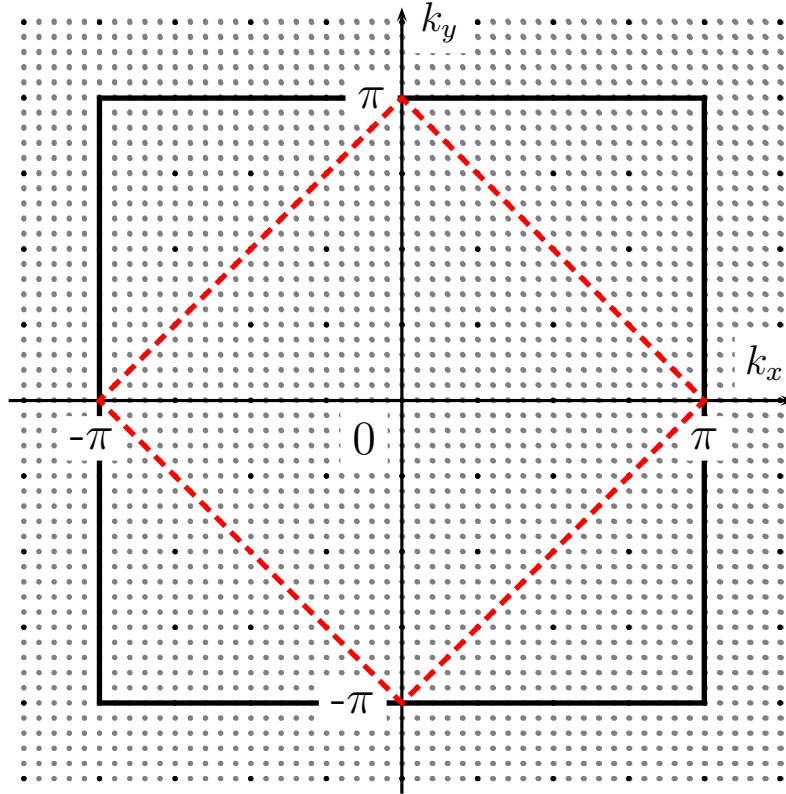


Abbildung 4.3: Brillouin-Zonen des Kristallgitters: Die durchgezogene Linie stellt die Zonengrenze des gesamten Kristallgitters dar, die gestrichelte Linie die Zonengrenze der einzelnen magnetischen Untergitter.

Zur Vereinfachung der Notation ist es günstig, zu einer Beschreibung mittels Matrizen bzgl. der Stringgeometrien überzugehen. Da der Basissatz der Strings 17 verschiedene Typen umfaßt, sind die entsprechenden Matrizen von der Dimension 17×17 . Sie hängen noch von den Quasimomenten \mathbf{k}, \mathbf{k}' ab. Die Bezeichnung „Matrix“ bezieht sich im folgenden also auf diese 17×17 -Matrizen bzgl. des Geometrieindex. Wir führen die Matrix der Greensfunktion des undotierten Hamiltonoperators

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{z - \Omega_{\mathbf{k}}^0}$$

ein und verwenden dabei, daß die Suszeptibilitätsmatrix gemäß (4.15) proportional der Einheitsmatrix ist: $\chi_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \mathbf{1}$. Aus (4.10) erhält man bei vernachlässigter Selbstenergie eine Dyson-Gleichung für die Matrix der Greensfunktionen

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \Omega_{\mathbf{k}\bar{\mathbf{k}}}^\epsilon \mathcal{G}_{\bar{\mathbf{k}}\mathbf{k}'} \quad (4.18)$$

Die 17×17 - Matrix $\Omega_{\mathbf{k}\tilde{\mathbf{k}}}^\epsilon$ ist der mit dem on-site-Energieterm H_ϵ gebildete Anteil der Frequenzmatrix. Entsprechend (4.17) faktorisieren ihre Summanden bezüglich der Quasiimpulse:

$$\Omega_{\mathbf{k}\tilde{\mathbf{k}}}^\epsilon = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{j}} \epsilon_{\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^* \mathcal{W}_{\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{j}} e^{i\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{j}} . \quad (4.19)$$

Die Matrix $\mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}}$ ist diagonal bezüglich der Stringoperatoren und läßt sich in Diagonalmatrizen $\mathcal{W}_{\downarrow\mathbf{k}}$ und $\mathcal{W}_{\uparrow\mathbf{k}}$ für die beiden Untergitter zerlegen:

$$\mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}} = \mathcal{W}_{\downarrow\mathbf{k}} \cdot \delta_{\mathbf{j}\in\downarrow} + \mathcal{W}_{\uparrow\mathbf{k}} \cdot \delta_{\mathbf{j}\in\uparrow} , \quad (4.20)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{\downarrow\mathbf{k}} &= \text{diag}(1, 0, 0, 0, 0, e^{-i\mathbf{k}t_5}, \dots, e^{-i\mathbf{k}t_{16}}) \\ \mathcal{W}_{\uparrow\mathbf{k}} &= \text{diag}(0, e^{-i\mathbf{k}s_1}, \dots, e^{-i\mathbf{k}s_4}, 0, \dots, 0) . \end{aligned} \quad (4.21)$$

Die Faktoren $\delta_{\mathbf{j}\in\sigma}$ sind gleich 1, wenn der Platz \mathbf{j} zum Untergitter der σ -Spins gehört, ansonsten 0. Einsetzen von (4.19) in (4.18) liefert

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{j}} \epsilon_{\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^* C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}} \quad (4.22)$$

mit der neu eingeführten Hilfsgröße

$$C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}} := \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{W}_{\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{j}} e^{i\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{k}'}$$

Die letzte Gleichung (4.22) stellt eine Integralgleichung dar, deren separabler Kern noch von der zufälligen Verteilung der on-site-Energien $\epsilon_{\mathbf{i}}$ abhängt. Führt man in (4.22) die Konfigurationsmittelung (4.6) durch, so erhält man den Ausdruck

$$\bar{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^* \overline{\epsilon_{\mathbf{j}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}} \quad (4.23)$$

der die Mittelung der Greensmatrix mit der von $\epsilon_{\mathbf{j}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}$ verknüpft. Gemäß Anhang B ergibt sich zunächst aus (4.22) nach Einführung der Einzelstreuermatrizen am Platz

1

$$t_1 = \frac{1}{1 - \epsilon_1 \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}1} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}1}^*} \epsilon_1$$

eine Gleichung für die Hilfsgröße $C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}$:

$$\overline{\epsilon_{\mathbf{j}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}} = \bar{t}_{\mathbf{j}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}'\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^0 + \bar{t}_{\mathbf{j}} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{l}(\neq \mathbf{j})} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^* e^{i\mathbf{k}(\mathbf{j}-\mathbf{l})} \overline{\epsilon_{\mathbf{l}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{l}}} \quad (4.24)$$

Die Summe auf der rechten Seite wurde dabei aufgespalten in die Summe über alle anderen Plätze $\mathbf{l} \neq \mathbf{j}$ und den Term für $\mathbf{l} = \mathbf{j}$. Als zentrale Näherung bei der Konfigurationsmittelung wird die Mittelung über verschiedene Plätze $\mathbf{j} \neq \mathbf{l}$ faktorisiert:

$$\overline{t_{\mathbf{j}} \epsilon_{\mathbf{l}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{l}}} \approx \bar{t}_{\mathbf{j}} \cdot \overline{\epsilon_{\mathbf{l}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{l}}} \quad \text{für } \mathbf{l} \neq \mathbf{j}. \quad (4.25)$$

Während $t_{\mathbf{j}}$ nur durch die lokalen Eigenschaften am Platz \mathbf{j} , d.h. von der Gitterplatzenergie $\epsilon_{\mathbf{j}}$, bestimmt ist, hängt der Wert von $C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}$, noch von der Gesamtkonfiguration ab, also auch von den $\epsilon_{\mathbf{l}}$ mit $\mathbf{l} \neq \mathbf{j}$. Deshalb ist die Faktorisierung (4.25) eine Näherung, da diese Abhängigkeit von $C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}$ von $\epsilon_{\mathbf{l}}$ vernachlässigt wird. Anschaulich gesprochen nimmt man an, daß das Quasiteilchen niemals an einen Platz zurückkommt, an dem es bereits einmal gestreut wurde, wenn es zwischendurch woanders gestreut wird [Nolting 1997].

Die gemittelte Einzelstreuermatrix lautet

$$\bar{t}_{\mathbf{l}} = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \frac{1}{1 - \epsilon_{\alpha} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^*} \epsilon_{\alpha} =: t_{\uparrow} \delta_{\mathbf{l}\in\uparrow} + t_{\downarrow} \delta_{\mathbf{l}\in\downarrow} \quad (4.26)$$

Die Zerlegung im letzten Schritt deutet dabei an, daß sich unterschiedliche Einzelstreuermatrizen ergeben, je nachdem, zu welchem der beiden magnetischen Untergitter der Platz \mathbf{l} gehört. Die Ursache dafür ist, daß das zur Halfüllung hinzugefügte Teilchen $\bar{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+$ nur auf einem Untergitter erzeugt wird. Mit (4.25) läßt sich umschreiben:

$$\begin{aligned} \overline{\epsilon_{\mathbf{j}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}} &= \bar{t}_{\mathbf{j}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}'\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^0 + \bar{t}_{\mathbf{j}} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{l}} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^* e^{i\mathbf{k}(\mathbf{j}-\mathbf{l})} \overline{\epsilon_{\mathbf{l}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{l}}} \\ &\quad - \bar{t}_{\mathbf{j}} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^* \overline{\epsilon_{\mathbf{j}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}} \end{aligned} \quad (4.27)$$

wobei in (4.24) die Summe über $l (\neq j)$ zerlegt wurde in eine Summe über alle l und den Term $l = j$. Durch Auflösen nach $\overline{\epsilon_j C_{\mathbf{k}'}}^j$ erhält man für die Greensfunktionsmatrix (4.23), vgl. Anhang B,

$$\overline{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \cdot \frac{1}{z\mathbf{1} - \Omega_{\mathbf{k}}^0 - \sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}^* \frac{1}{1 + t_\sigma \frac{2}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}} \overline{\mathcal{G}}_{\tilde{\mathbf{k}}}^0 \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}}^*} t_\sigma \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}} \quad (4.28)$$

Bei den später betrachteten physikalischen Anwendungen interessiert vor allem die Variante, daß nur zwei verschiedene Werte der on-site-Energie ϵ^1, ϵ^2 vorliegen. Da die Summe aller Konzentrationen gleich eins ist, folgt $c_2 = 1 - c_1$. Dieser Fall tritt z.B. dann auf, wenn eine Substanz Verunreinigungen aufweist (z.B. infolge einer Dotierung) und diese Impurities eine Verschiebung der on-site-Energie bewirken. Man kann dann beispielsweise c_1 mit der Konzentration der Dotieratome identifizieren, d.h. $c_1 = 0$ entspricht der undotierten Basissubstanz. In diesem Sinne werden später die Kupratsubstanzen $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ behandelt. Setzt man $\Delta := \epsilon^1 - \epsilon^2$, $\epsilon^2 = 0$ (was einer konstanten Energieverschiebung der Gesamtenergie entspricht) und $c_1 := x$, so reduziert sich das obige Ergebnis (4.28) auf die etwas einfachere Formel $\overline{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \overline{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}$ mit (vgl. Anhang B)

$$\boxed{\overline{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z\mathbf{1} - \Omega_{\mathbf{k}}^0 - x\Delta \sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}^* \frac{1}{1 - (1-x)\Delta \frac{2}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}} \overline{\mathcal{G}}_{\tilde{\mathbf{k}}}^0 \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}}^*} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}} \quad (4.29)}$$

Die gesuchte Greensfunktion (4.4) ist das (0,0)-Element der Matrix (4.29). Sie hängt über die Gleichung

$$S_{\mathbf{k}}(z) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\overline{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}(z) \right)_{00} \quad (4.30)$$

mit der Spektralfunktion zusammen. Das Resultat (4.29) stellt ein zentrales Ergebnis der Arbeit dar.

Der hier entwickelte Formalismus ist verwandt mit der *Blackman-Esterling-Berk coherent-potential approximation (BEB-CPA)* [Koepernick 1997, Koepernick 1998] zur Behandlung von Unordnungen bei Bandstrukturrechnungen. Das Ziel bei der BEB-CPA ist die Einbeziehung von nicht-diagonaler Unordnung [Blackman 1971]. Dabei wurden allerdings schwach korrelierte Systeme betrachtet, während im vorliegenden Fall stark korrelierte Systeme behandelt werden sollen, was die Untersuchung enorm erschwert.

4.2.5 Diskussion der Resultate

In diesem Abschnitt werden einige allgemeine Betrachtungen von Gleichung (4.29) angestellt sowie verschiedene Grenzfälle bezüglich der Größen c und Δ untersucht. Das Ziel ist, Aussagen über den Anwendungsbereich und mögliche prinzipielle Grenzen zu gewinnen. So stellt sich z.B. die Frage, ob die gefundenen Gleichungen den translationsinvarianten Fall, bei dem alle on-site-Energien gleichgroß sind, richtig wiedergeben. Außerdem soll die Abhängigkeit des Spektrums von den Konzentrationen sowie den Schwankungen der Gitterplatzenergien untersucht werden, wobei diese Größen die Unordnungseffekte charakterisieren. Die anderen Modellparameter werden demgegenüber konstant gehalten und (solange nicht anders angegeben) wie folgt gewählt:

$$t'/t = -0,165, \quad t''/t = 0,098, \quad J/t = 0,225$$

Diese Werte sind identisch mit den Resultaten von Bandstrukturechnungen bzw. Raman-Messungen für $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [Sulewski 1990]. Zur Vereinfachung sind alle Energien auf t skaliert.

Zuerst soll auf den Unterschied eingegangen werden, der zwischen der Verwendung der kompakten dynamischen Variablen

$$A_0(\mathbf{k}) = B_0(\mathbf{k}) \tag{4.31}$$

$$A_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{z_0}} \sum_{m=1}^4 B_m(\mathbf{k}) \tag{4.32}$$

$$A_2(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{z_0(z_0 - 1)}} \sum_{m=5}^{16} B_m(\mathbf{k}) \tag{4.33}$$

$$\tag{4.34}$$

aus [Vojta 1995] und den hier gewählten nicht aufsummierten $B_m(\mathbf{k})$ besteht. Dazu betrachten wir das t - J -Modell für beide Fälle. Für diese Betrachtung soll $t' = t'' = 0$ gesetzt werden und ebenso $x = \Delta = 0$.

In diesem translationsinvarianten Fall ist die Greensfunktionsmatrix gleich $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0$. Abb. 4.4 zeigt die Anregungsspektren für den Quasiimpuls $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$, einmal bei Verwendung kompakter Operatoren (4.31)-(4.33) und zum anderen mit den Operatoren aus Abb. 4.2. Im zweiten Fall sind theoretisch 17 verschiedene Anregungsenergien möglich, da der Hilbertraum auf einen 17-dimensionalen Projektionsraum eingeschränkt wird. Die Hamiltonmatrix in diesem Raum hat somit maximal 17 verschiedene Eigenwerte, entsprechend weist $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0$ maximal 17 Polstellen auf. Die im

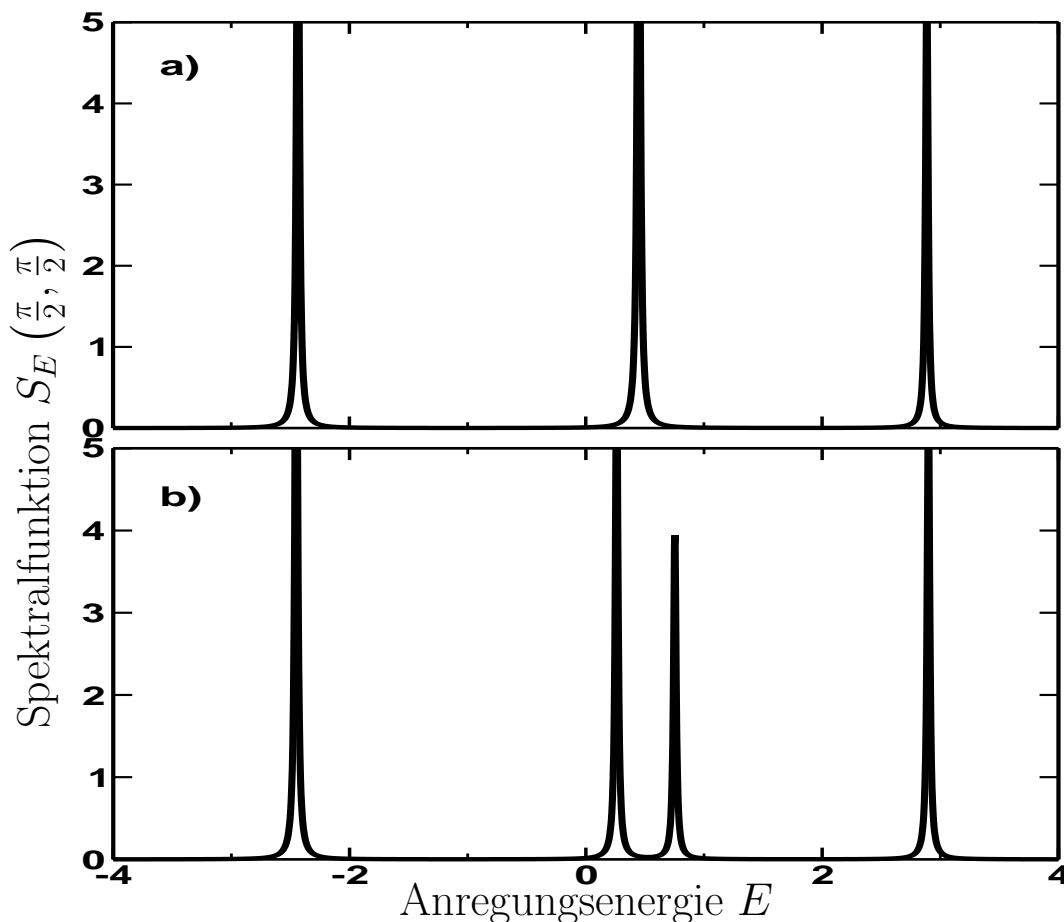


Abbildung 4.4: Spektrum des t - J -Modells für verschiedene Projektionsräume. In Teilbild a) ist die Spektralfunktion für die kompakten Operatoren (4.31)-(4.33) dargestellt, in Teilbild b) für die Operatoren aus (4.12)-(4.14). Die Werte des Modells sind $t = 1, J = 0,225$; der Impuls der Quasiteilchen beträgt $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$.

t - J -Modell vorhandenen Symmetrien reduzieren die tatsächlich vorkommende Anzahl an unterschiedlichen Anregungsenergien auf vier. Das ist eine mehr als die drei Anregungen im Falle der kompakten Operatoren, bei denen die Anzahl der Freiheitsgrade durch die starre Linearkombination von Strings gleicher Länge eingeschränkt ist. Diese Einschränkung ist auch die Ursache für die höhere Grundzustandsenergie im Vergleich zu der $B_m(\mathbf{k})$ -Basis. Der Zustandsvektor des energetisch niedrigsten Zustands für $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ lautet mit den kompakten Operatoren

$$|q\rangle_{\text{kompakt}} = A_0\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) + 1,17A_1\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) + 0,72A_2\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$$

mit dem Basissatz (4.12)-(4.14) hingegen

$$|q\rangle = B_0\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) + 0,58 \sum_{m=1}^4 B_m\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) + 0,23 \sum_{m \in \{6,10,12,16\}} B_m\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right) \\ + 0,16 \sum_{m \in \{5,7,8,9,11,13,14,15\}} B_m\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right).$$

Wie man sieht, tragen die Vektoren mit $\mathbf{s}_m = \pm(\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y)$ mit einem höheren Vorfaktor zum Grundzustand bei als die übrigen Basisvektoren der Stringlänge zwei. Dies kann bei einem kompakten Operator, der die Summe über alle Zustände der Länge zwei darstellt, nicht berücksichtigt werden. Offensichtlich ist der Zustandsvektor aber immer noch invariant unter Drehung um $\frac{\pi}{2}$, d.h. diese Symmetrie ist nicht verletzt.

Grenzfälle

Nach dieser Vorbemerkung werden nun diverse Grenzfälle für das t - t' - t'' - J -Modell untersucht.

Ein einfacher Fall liegt vor, wenn alle on-site-Energien des Systems gleich sind. Formal läßt sich dies in (4.29) auf folgende Weise erreichen: Entweder existieren keine Verunreinigungen (Konzentration $x = 0$) bzw. nur Verunreinigungen ($x = 1$), oder die on-site-Energie für beide Sorten sind gleichgroß: $\Delta = \epsilon^1 - \epsilon^2 = 0$. Wie leicht zu erkennen ist, gibt (4.29) die Fälle $\Delta = 0$ und $x = 0$ richtig wieder, da sich der Ausdruck in den geschweiften Klammern auf $\mathbf{1}$ reduziert und man die Greensfunktionsmatrix $\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0$ des ungestörten Systems erhält.

Für $x = 1$ läßt sich die spezielle Struktur von $\mathcal{W}_{\uparrow,\downarrow}$ verwenden. Der vereinfachte Ausdruck (4.23) reduziert sich auf $\overline{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}} = [z \cdot \mathbf{1} - \Omega_{\mathbf{k}}^0 - \Delta \mathbf{1}]^{-1}$. Das ist genau die Greensfunktionsmatrix für ein translationsinvariantes System, bei dem die Energien um den konstanten Werte Δ verschoben sind. Dies entspricht der Erwartung, daß das Auftreten von Verunreinigungen an jedem Gitterplatz die Verschiebung aller lokalen Energien um Δ bewirkt und damit zu modifizierten Anregungsenergien führt. Die Verschiebung läßt sich auch an der graphischen Darstellung der Spektren von Abb. 4.5 ablesen. Dort ist die Spektralfunktion $S_{\mathbf{k}}(E)$ für den Quasiimpuls $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ und die Konzentrationen $x = 0$, $x = 0,5$ und $x = 1$ dargestellt.

Charakteristisch für die Translationsinvarianz ist die geringe Zahl der Peaks. Sobald echte Unordnungsdefekte vorhanden sind, tritt eine viel höhere Zahl an Peaks auf. Das wird an der Kurve für $x = 0,5$ deutlich. Dann tragen neben \mathbf{k} , vermittelt durch den Term $\sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{G}_{\tilde{\mathbf{k}}}^0 \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}}^*$ in (4.29), auch andere Quasiimpulse zur Greensmatrix $\overline{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}$ bei. Physikalisch gesehen bewirkt die Unordnung der Streuer, daß sich der Quasiimpuls des erzeugten Teilchens um beliebige Vektoren und nicht nur

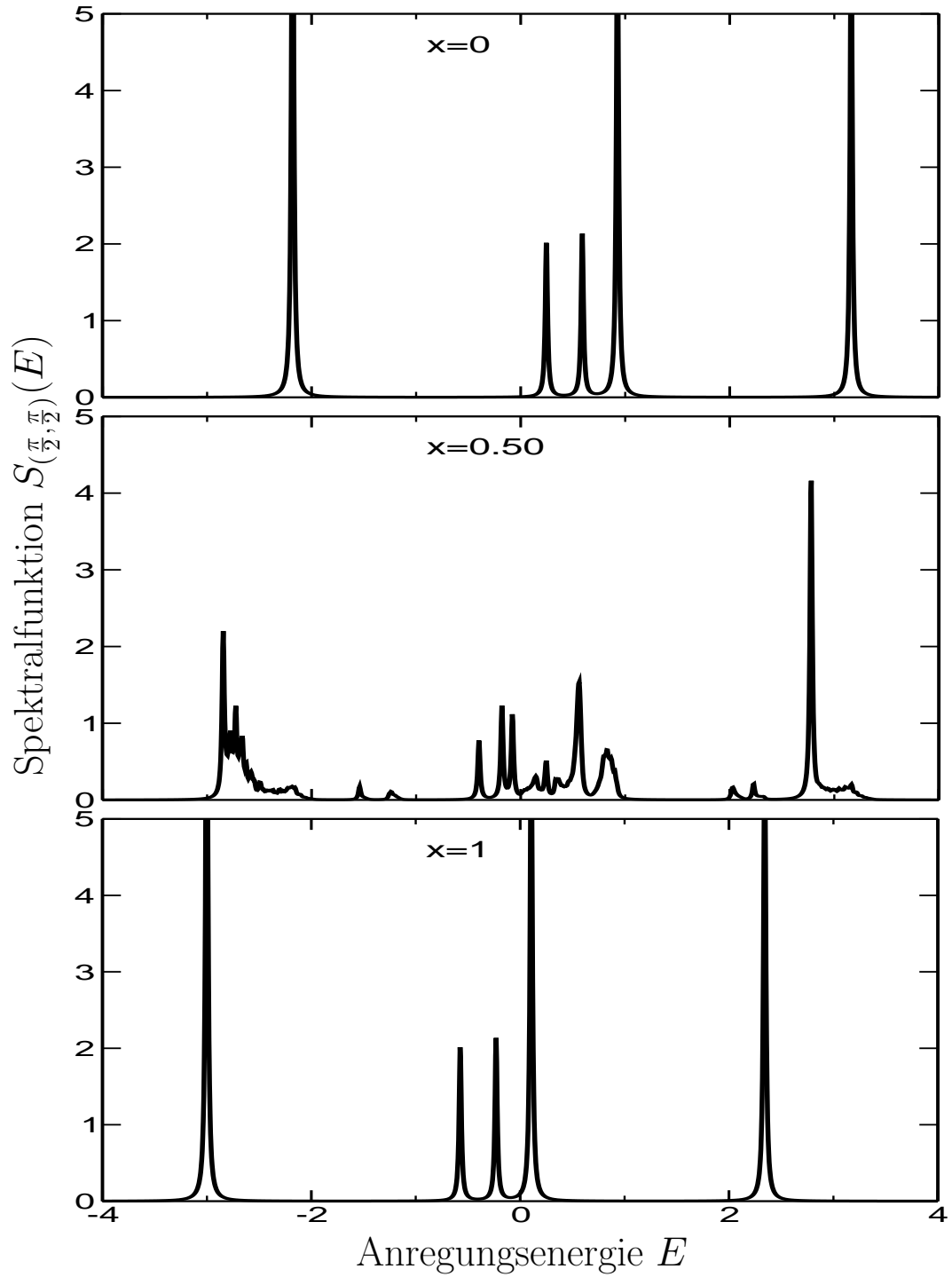


Abbildung 4.5: Spektralfunktion für das t - t' - t'' - J -Modell mit $\Delta = -0.8$ und Quasiimpuls $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ für verschiedene Konzentrationen $x = 0, 0.5$ und 1 .

um reziproke Gittervektoren ändern kann, da in den Anregungen Stringzustände mit verschiedenen \mathbf{k} -Werten enthalten sind. Es werden mehr mögliche Kombinati-

nen der Stringzustände angekoppelt, was sich in einem reichhaltigeren Spektrum äußert.

Zuletzt wird das Verhalten bei sehr großem Einfluß der Verunreinigungen auf die on-site-Energien untersucht. Dies entspricht dem Grenzfall $\Delta \rightarrow -\infty$. Die on-site-Energie ist betragsmäßig die größte Energie im System, während die anderen Terme nur kleine Beiträge liefern. Unter der Annahme, daß ϵ^1 und damit Δ negativ sind, erwartet man Anregungen, bei denen die Teilchen an den dotierten Plätzen erzeugt werden und dort (fast) lokalisiert sind. Die zugehörigen Anregungsenergien müssen dann in der Nähe der on-site-Energie Δ liegen. Dies ist in Abb. 4.6 zu erkennen.

Unterhalb der niedrigsten Anregungsenergie des translationsinvarianten Systems findet man einen Peak, der sich für betragsmäßig große Werte von Δ auch ungefähr bei Δ befindet. Zur analytischen Untersuchung dieses Verhaltens bestimmt man die Polstellen von (4.29) in der Nähe von $E = \text{Re}(z) \approx -\Delta \rightarrow \infty$. Bezeichnet man mit $\omega_{\mathbf{k}}^{0(\lambda)}$ die Eigenwerte der Matrix $\Omega_{\mathbf{k}}^0$, so kann (4.29) unter Verwendung von $|\omega_{\mathbf{k}}^{0(\lambda)}/z| \ll 1$ nach z aufgelöst werden. Die resultierende Anregungsenergie lautet

$$E_{\mathbf{k}} \approx \Delta + x \omega_{\mathbf{k}}^0$$

wobei $\omega_{\mathbf{k}}^0 = \min_{\lambda} \omega_{\mathbf{k}}^{0(\lambda)}$ der kleinste Eigenwert der Matrix $\Omega_{\mathbf{k}}^0$ ist. Der Faktor x im zweiten Summanden bewirkt, daß die Bandbreite dieser Mode mit der Konzentration x variiert. Um dies darzustellen, wurde das Spektrum für viele Quasimomente \mathbf{k} berechnet und die jeweils niedrigste Anregungsenergie bestimmt. Aufgetragen gegen die Werte \mathbf{k} ergibt sich die Dispersionsrelation des angeregten Zustandes, d.h. des Grundzustandes für das System bei Halbfüllung plus einem Ladungsträger. Abbildung 4.7 zeigt diese Dispersionsrelation. Man erkennt, daß mit steigender Konzentration x die Bandbreite zunimmt, bis sie bei $x = 1$ maximal wird. Diese Abhängigkeit der Bandbreite von der Konzentration ist etwas stärker als linear, wie in Abb. 4.8 deutlich wird. Hier ist das Verhältnis der jeweiligen Breite zur maximalen Bandbreite als Funktion der Konzentration aufgetragen.

Die Näherung, welche zur Herleitung der vorliegenden Gleichung (4.29) benutzt wurde, kann als eine Verallgemeinerung der „average T-matrix approach“ (ATA) angesehen werden. Sie ist damit nur bei kleinen Konzentrationen x anwendbar. Bisher wurde sie auf Systeme ohne Elektronenwechselwirkung angewendet [Nolting 1997]. Im Unterschied dazu gilt das hier gefundene Resultat für ein System mit starken elektronischen Korrelationen.

Eine Erweiterung hin zu einem selbstkonsistenten Verfahren wie der *Coherent-Potential Approximation (CPA)*, welche als beste single-site Näherung gilt [Fulde 1995], wäre wünschenswert, muß jedoch späteren Arbeiten vorbehalten bleiben.

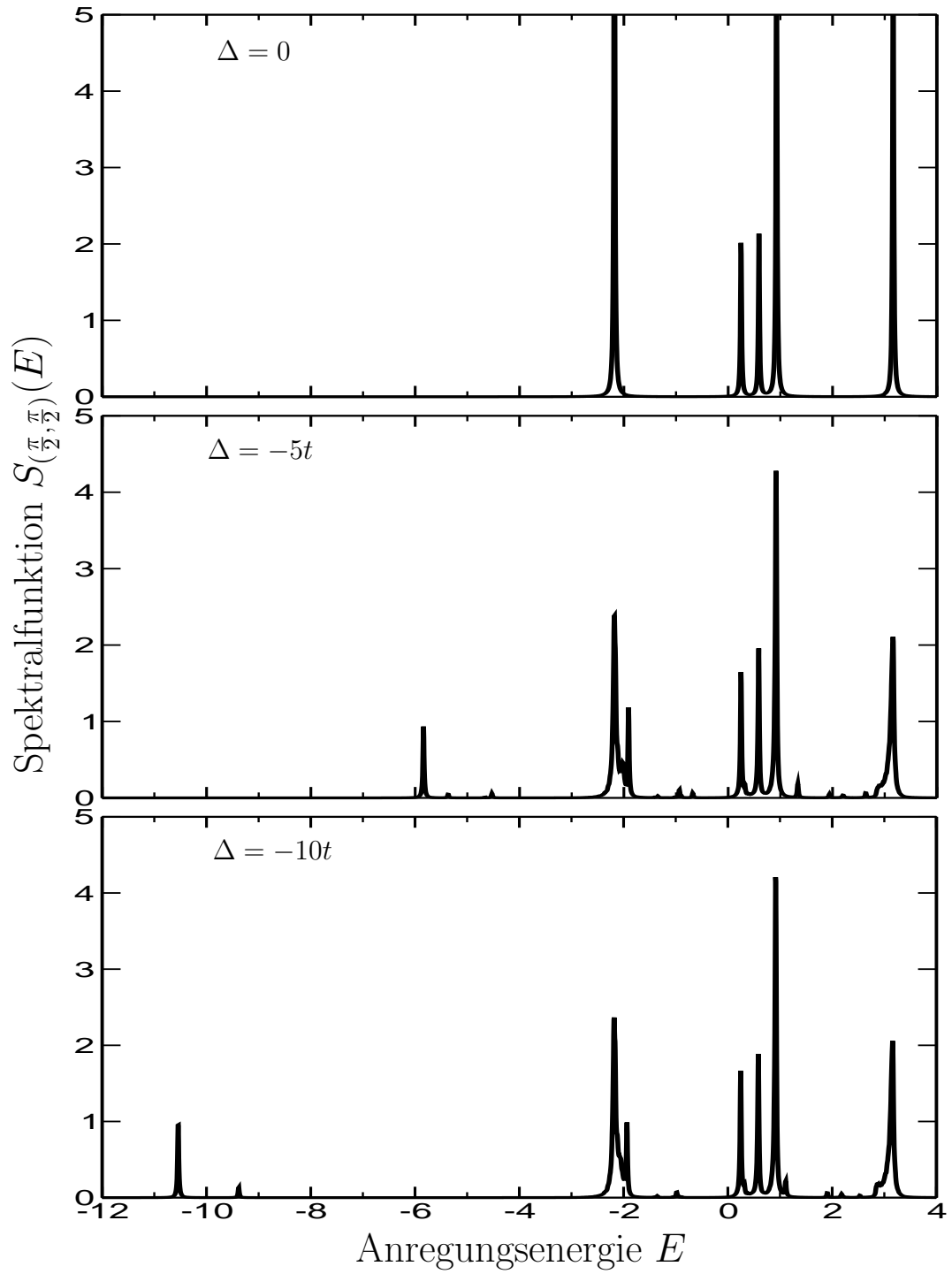


Abbildung 4.6: Spektralfunktion für das t - t' - t'' - J -Modell Quasiimpuls $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ und Konzentration $x = 0,05$ für verschiedene Werte von Δ .

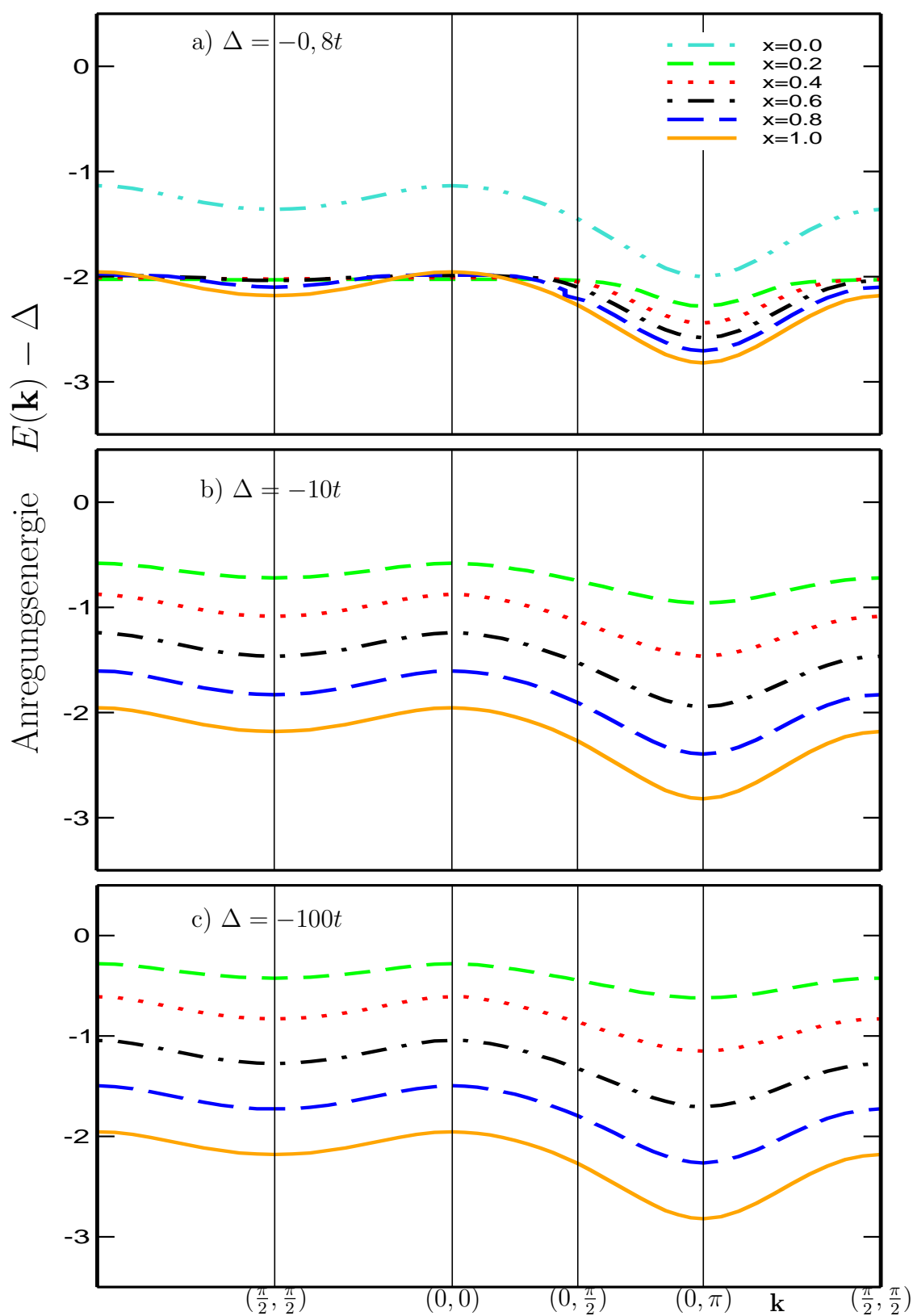


Abbildung 4.7: Dispersionsrelation des Grundzustandes des t - t' - t'' - J -Modells mit einem Ladungsträger über Halbfüllung für verschiedene Differenzen der on-site-Energie Δ und verschiedene Konzentrationen x .

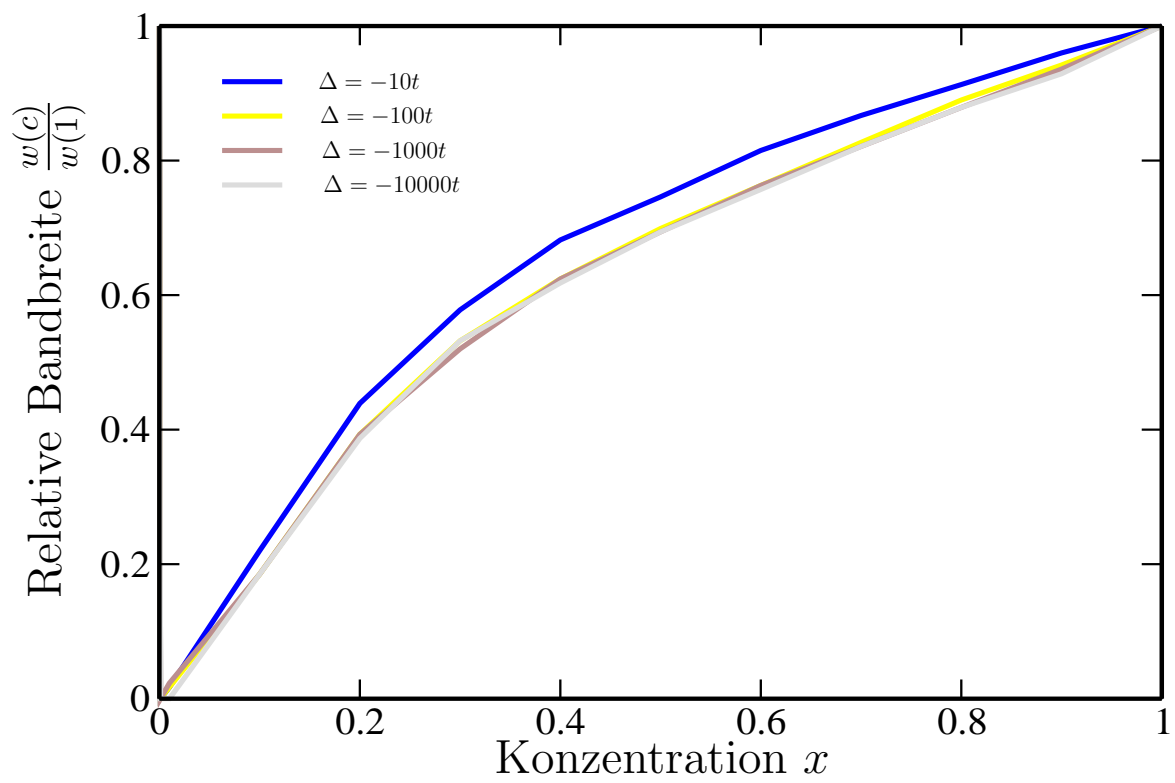


Abbildung 4.8: Bandbreite vs. Konzentration für $\Delta = -10t; -100t; -1000t$ und $-10000t$

5 Anwendung auf Kupratsysteme

In diesem Abschnitt wird das Modell (4.24) verwendet, um Grundzustandseigenschaften von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ zu untersuchen. Dazu werden die im vorigen Kapitel ermittelten Parameterwerte eingesetzt und mittels der Greensfunktion die Spektralfunktion sowie verschiedene Anregungsenergien berechnet.

5.1 Gültigkeitsbereich der Näherungen

Um festzustellen, unter welchen Bedingungen die im Abschnitt 4 gefundenen Ergebnisse auf die Kupratsysteme anwendbar sind, muß man sich an die bei der Herleitung gemachten Näherungen erinnern. Besonders interessant ist, bis zu welchen Dotierungskonzentrationen sie anwendbar sind, da die Konzentration der einzige freie Parameter ist. Dagegen sind die Energien durch die Werte in Tabelle 3.2 festgelegt.

Die antiferromagnetische Phase von $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ existiert bis zu einer Cer-Konzentration von etwa $x = 15\%$ [Thurston 1990, Luke 1990], während sie für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ bis zu einem Sr-Anteil von ungefähr $x = 3\%$ besteht. Die Werte stellen damit obere Schranken für die Gültigkeit des Resultates (4.29) dar, da die antiferromagnetische Ordnung des Grundzustandes eine grundlegende Annahme bei der Herleitung war.

Als weitere Näherung wurde verwendet, daß nur die Bewegung *eines* Ladungsträgers zusätzlich zur Halbfüllung untersucht wird. Die Dotieratome spielen im verwendeten Modell nur die Rolle von Streupotentialen, was sich in ortsabhängigen Gitterplatzenergien ϵ_1 äußert. In realen Systemen ist jedoch auch ein anderer Effekt der Dotierung von Bedeutung, nämlich die Abgabe von Ladungsträgern an die Kupferoxidebenen. Mit steigender Konzentration der Sr- bzw. Ce-Atome erhöht sich auch die Zahl der Löcher bzw. Elektronen in den Kupferoxidebenen. Die Festlegung auf ein Teilchen mehr als bei Halbfüllung führt demnach dazu, daß dieser Einfluß der Dotieratome weggelassen wird. Die Näherung ist dann sinnvoll, wenn die Ladungsträgerdichte klein genug ist. In diesem Fall lassen sich die Quasiteilchen als unabhängig voneinander betrachten. Der Zustandsvektor eines Quasiteilchens ist im Rahmen der Näherungen eine Linearkombination aus Stringzuständen bis zur Länge zwei, er umfaßt damit ungefähr 13 Gitterplätze. Die maximale Dichte für

nichtüberlappende Quasiteilchen beträgt deshalb $1/13$ oder 7%. Für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ spielt diese Grenze keine Rolle, da bei einer so großen Lochkonzentration die antiferromagnetische Ordnung bereits zerstört ist. Bei $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ist das jedoch nicht der Fall, d.h. die Näherung unabhängiger Quasiteilchen schränkt die Anwendbarkeit des Verfahrens weiter ein. Diese Einschränkung wird durch die Existenz des zufallsverteilten Potentials etwas abgemildert, indem es die Elektronen an den dotierten Plaketten (mehr oder weniger) festhält und den Wechselwirkungsradius zwischen den gepinnten Elektronen verringert. Die Annahme unabhängiger Teilchen sollte daher bis zu einer etwas höheren Dichte als 7% möglich sein.

Da das Verhältnis zwischen der Zahl der abgegebenen Elektronen und der Ce-Konzentration, mit anderen Worten die Hybridisierung zwischen den Seltenerd- und Kupferoxidschichten, nicht genau bekannt ist, könnte es sein, daß einige der überschüssigen Ce-Elektronen nicht in die Kupferoxidebene abgegeben werden. Damit würde ein Betrag von $x = 0,15$ nicht automatisch eine Elektronenkonzentration von 15% bedeuten. Aus diesem Grunde werden die Rechnungen im folgenden zwar bis zu einer Ce-Dotierung von $x = 0,15$ durchgeführt in der Hoffnung, daß man auch bei diesem Wert das Verfahren anwenden kann (was spätere Untersuchungen zeigen oder widerlegen müssen). Es sei an dieser Stelle jedoch betont, daß dies mit Sicherheit nur bis etwa $x = 0,05$ der Fall ist.

5.2 Numerische Umsetzung

Die Gleichung (4.29) ist ein analytischer Ausdruck für die gemittelte Greensfunktionsmatrix. Doch läßt sich die Berechnung im konkreten Fall aufgrund der hohen Dimension der Matrizen von 17×17 nur numerisch durchführen. Dies erfolgt mit einem selbstentwickeltem C++ -Programm. Für die zeitkritischen Matrixinvertierungen wurden lapack-Routinen eingesetzt, die für den verwendeten PC optimiert wurden (ATLAS-Paket, [ATLAS]). Dadurch ergab sich eine deutliche Rechenzeitverkürzung (etwa Faktor 4 bis 5 pro Greensfunktionsmatrix) gegenüber der Invertierung mit Hilfe der aus [Press 1999] entnommenen Routinen.

Als Systemgröße wurden 30×30 Gitterplätze gewählt. Die Rechnungen erfolgten mit einem Imaginärteil von $\eta = \text{Im}(z) = 0,013$, um eine künstliche Linienbreite zu erzeugen und dadurch Singularitäten zu vermeiden. Wie sich zeigt, sind bei diesem Wert die Peaks einerseits breit genug, um bei der hier verwendeten Schrittweite geeignet dargestellt werden zu können, und andererseits schmal genug, damit sich die einzelnen Peaks nicht wesentlich überschneiden.

Die Spektralfunktionen wurden gemäß Gleichung (4.30) ermittelt, zur Bestimmung der Dispersionsrelationen wurden die Spektren an 50 Punkten der Brillouin-Zone berechnet und daraus die niedrigsten Anregungsenergien gewonnen.

Die Berechnung eines Spektrums mit 50 Punkten auf einem Intel-Pentium-I-Computer dauerte etwa 25min. Der Rechenaufwand steigt in etwa quadratisch mit der Größe der Greensfunktionsmatrix. Die relativ kurze Rechenzeit stellt einen Vor-

teil der verwendeten Methode dar.

5.3 Einfluß der weiterreichenden Hüpfsterme t' und t''

Der eigentliche Gegenstand der Untersuchungen in dieser Arbeit ist der Einfluß der Unordnung auf physikalische Eigenschaften des t - t' - t'' - J -Modells. Zunächst soll jedoch die Bedeutung der Hüpfprozesse zum zweit- und drittnächsten Nachbarn dargestellt werden. Wie bereits erwähnt, wirken sich diese Terme auf die Stabilität der magnetischen Ordnung aus [Tohyama 1994]. Nach [Gooding 1994] beeinflusst der Quasiimpuls des Einteilchen-Systems das Auftreten von inkommensurablen Spinstrukturen. Während für einen Quasiimpuls $(0, \pi)$ keine derartigen Strukturen vorhanden sind, existieren sie für $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ und führen zu einer Phase mit kurzreichweitiger magnetischer Ordnung, wie sie in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ beobachtet wird.

Die niedrigsten Anregungsenergien eines Teilchens, das im halbgefüllten Zustand erzeugt wird, entsprechen den Grundzustandsenergien des Einteilchensystems. Sie sind in Abb. 5.1 für das t - t' - t'' - J -Modell bei Loch- und Elektronendotierung als Funktion des Quasiimpulses dargestellt. In beiden Bildern ist zum Vergleich die Dispersionsrelation des t - J -Modells mit den jeweiligen Parametern eingetragen. Man erkennt deutlich, wie stark sich im Fall von Elektronendotierung die weiterführenden Hüpfsterme auswirken. Die Bandbreite wird gegenüber dem einfachen t - J -Modell verdreifacht ($4, 1J$ gegenüber $1, 2J$) und der Quasiimpuls des Grundzustandes liegt bei $(0, \pi)$. Dagegen läßt sich für Lochdotierung nur eine geringe Verbreiterung auf $1, 3J$ feststellen. Außerdem besitzt der Grundzustand den Quasiimpuls $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$. Dies stützt die oben zitierten Aussagen in [Gooding 1994]. Wie man im Bild erkennen kann, ist im translationsinvarianten Fall im t - J -Modell die Dispersion zwischen $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ und $(0, \pi)$ flach und minimal, d.h. die Anregungsenergie für beide Punkte ist gleich groß. Dies entspricht der Eigenschaft des t - J -Modells, symmetrisch bezüglich der Dotierungsart zu sein. D.h. es bedeutet keinen Unterschied, ob aus dem halbgefüllten Zustand ein Teilchen entfernt wird oder eines hinzukommt.

Der Unterschied bei Hinzunahme der Hüpfsterme zu zweit- und drittnächsten Nachbarn beruht zum einen auf den unterschiedlichen Werten der Hoppingintegrale t' und t'' . Für $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ sind t' ca. fünfmal und t'' etwa viermal so groß wie für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (vgl. Tabelle 3.1). Zum anderen ist auch die Art der Ladungsträger von Bedeutung. So beträgt die Energieabsenkung bei Lochdotierung für den Quasiimpuls $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ etwa $-4|t''|$. Für den elektronendotierten Fall lautet der entsprechende Wert am Quasiimpuls $(0, \pi)$ hingegen $-4(|t'| + |t''|)$ [Tohyama 2001]. Den Werten aus Tabelle 3.1 entspricht somit eine Energiereduzierung um $0.5J$ für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und um ca. $4J$ für $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Diese Beträge liegen in der Größenordnung der Werte, welche in Abb. 5.1 zu sehen sind. Die geringen Differenzen sind vermutlich darauf zurückzuführen, daß die Berechnungen für Abb. 5.1 (im Gegensatz zu denen in [Tohyama 2001]) im Unterraum der Stringzustände bis zur Länge zwei durch-

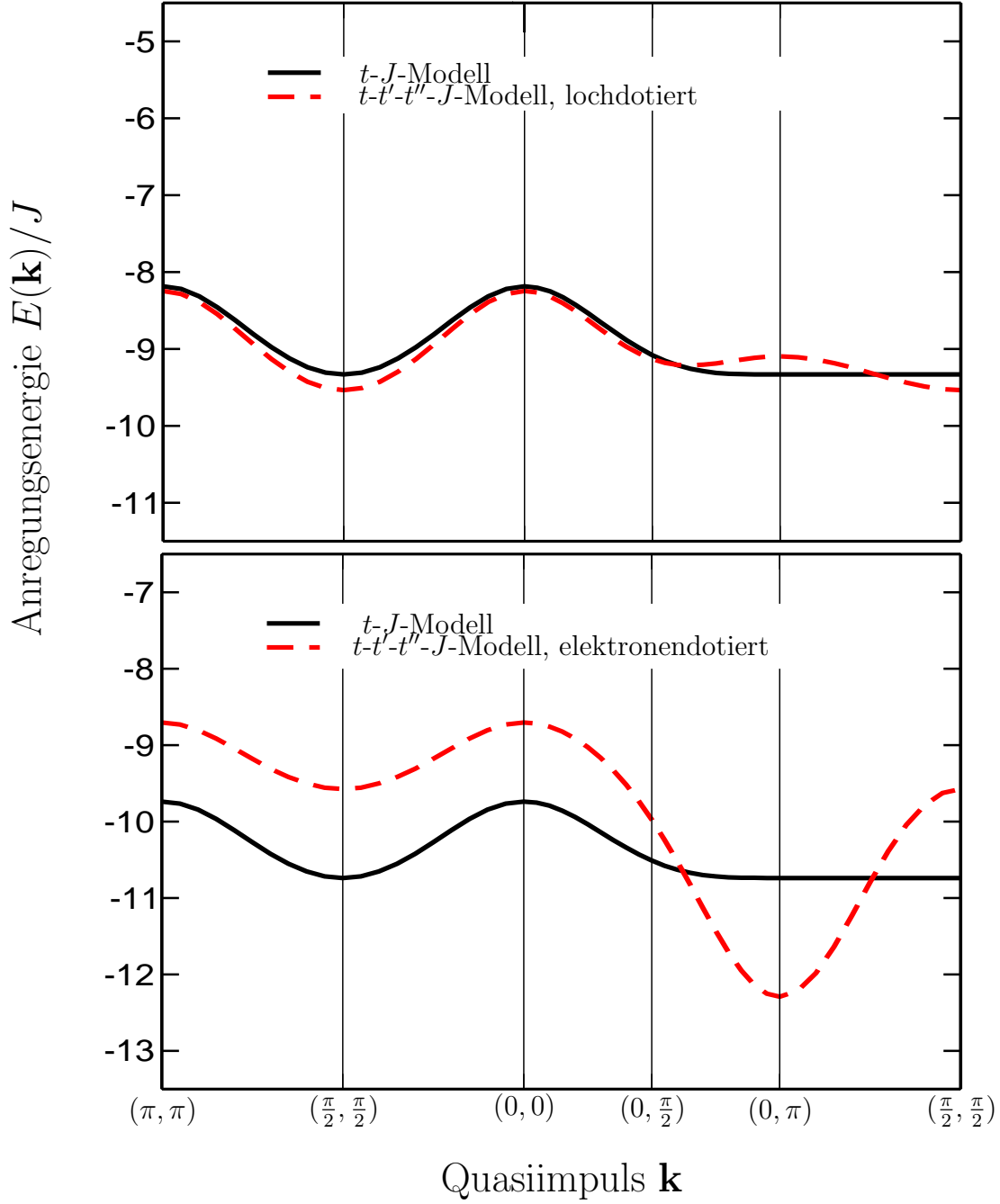


Abbildung 5.1: Dispersionsrelationen für Lochdotierung (oberes Teilbild) und Elektronendotierung (unteres Teilbild) im t - J - und t - t' - t'' - J -Modell ohne Verunreinigungen ($\Delta = 0$). Die verwendeten Parameter sind für den lochdotierten Fall: $t' = -0,03$, $t'' = 0,03$, $J = -0,26$ mit $t < 0$ und für den elektronendotierten Fall $t' = -0,16$, $t'' = 0,10$ und $J = 0,23$ mit $t > 0$.

geführt werden.

5.4 Dotiertes $t-t'-t''$ - J -System

Im folgenden wird die Dispersion des dotierten Systems betrachtet. Zunächst ist in Bild 5.2 die jeweils niedrigste Anregungsenergie im Fall von Elektronendotierung für verschiedene Konzentrationen x an Störstellen dargestellt. Bei $x = 0$ liegt das aus

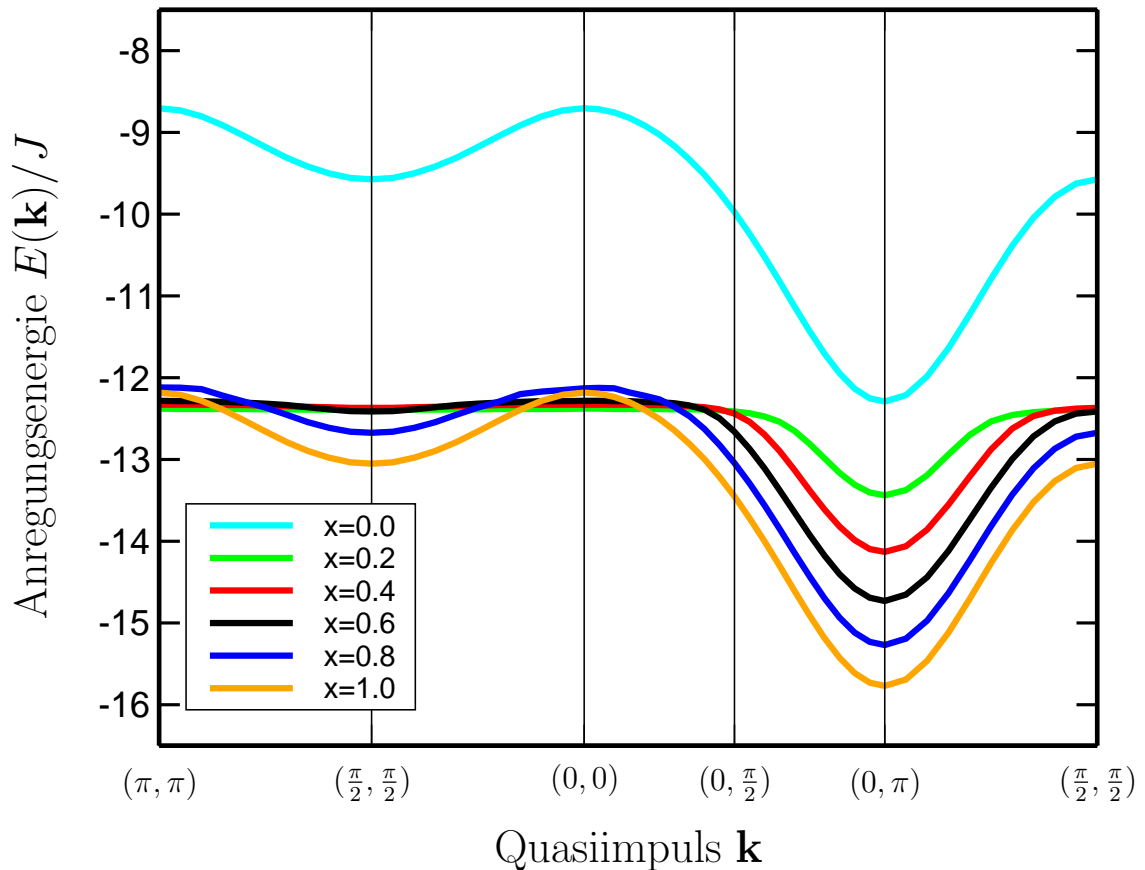


Abbildung 5.2: Anregungsenergie des elektronendotierten Systems für Verunreinigungskonzentrationen von $x = 0$ bis $x = 1$. Die verwendeten Modellparameterwerte betragen $t' = -0,16t$, $t'' = 0,10t$, $J = 0,23t$ und $\Delta = -0,8t$. Dabei gilt $t > 0$.

Abb. 5.1 bekannte Bild vor. Sobald jedoch Dotieratome vorhanden sind, bildet sich unterhalb des Dispersionsbandes des undotierten Zustandes eine neue Mode der Anregungsenergie. Für kleine, aber endliche Konzentrationen x ist diese niedrigste Mode sehr flach. Das ist ein Zeichen dafür, daß dieses Band einen lokalisierten Zustand beschreibt. Mit einer wachsenden Anzahl von Dotieratomen steigt die Bandbreite an. In Abb. 5.2 ist die Abhängigkeit der niedrigsten Anregungsenergie von der Konzentration dargestellt, wobei die hohen Konzentrationen ab $x = 0,15$

in Abb. 5.2 nur der Illustration des Verhaltens der verwendeten Methode dienen¹. Die Bandbreite der neuen tiefsten Anregungsmode wächst mit zunehmender Konzentration an Störstellen.

Ob eine neue, lokalisierte Mode entsteht hängt vom Unterschied Δ zwischen den on-site-Energien dotierter und undotierter Plätze ab. Für genügend große Werte dieses Parameters werden die Ladungsträger an den Dotierstellen mehr oder weniger stark lokalisiert und in ihrer Bewegung stark gehemmt. Dadurch tragen die Hopping-Energien nur relativ wenig zur Anregungsenergie bei. Da sie die einzigen Energieanteile sind, welche vom Quasiimpuls abhängen, hat dieser folglich wenig Einfluß auf die Anregungsenergie und die Mode ist flach. Dies gilt jedoch nur bei kleinen Konzentrationen. Nimmt die Zahl der Störstellen zu, so werden die Hüpfsterme wieder begünstigt, da die Wahrscheinlichkeit von Pfaden steigt, welche mehrere dotierte Plätze enthalten. Anschaulich gesprochen bekommen die Teilchen die Energie, welche sie aufwenden mußten um die on-site-Energie der einen Dotierstelle zu überwinden, wieder zurück, wenn sie sich zu einer weiteren Dotierstelle bewegen. Somit steigt mit der Konzentration auch der Anteil der Hoppingenergien an der Anregungsenergie. Dadurch wächst die Bandbreite mit größer werdender Konzentration x .

Die Quasiimpulse der Minima und Maxima bleiben gegenüber dem undotierten System unverändert, da die Dotierstellen statistisch verteilt sind und somit nach der Mittelung keinen Einfluß auf die räumliche Symmetrie besitzen. Die bevorzugten Richtungen hängen also auch bei Dotierung nur von den Werten der Hoppingintegrale ab und sind damit dieselben wie im undotierten Fall.

In Abb. 5.3 ist die niedrigste Anregungsmode noch einmal für den Konzentrationsbereich von $x = 0$ bis $x = 0,14$ dargestellt. Diese Konzentrationswerte liegen innerhalb des physikalisch relevanten Bereichs. Die Bandbreite beträgt z.B. bei $x = 0,02$ nur $0,17J$. Bei einer Konzentration von $x = 0,14$ hat sie mit $0,92J$ einen Wert, der etwas kleiner als die Bandbreite des reinen t - J -Modells ist.

Man beachte, daß der Quasiimpuls des Grundzustandes auch bei den flachen Dispersionsrelationen der lokalisierten Mode stets bei $(0, \pi)$ liegt. Dies ist im Einklang mit den Ausführungen zur (In-)Kommensurabilität der Spinstrukturen bei etwas höheren Konzentrationen in [Gooding 1994].

Für den lochdotierten Fall erhält man eine konzentrationsabhängige Dispersion wie in Abb. 5.4. Es entsteht keine lokalisierte Mode wie bei $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Stattdessen ist die niedrigste Anregungsenergie bei höheren Dotierkonzentrationen x nur parallelverschoben zur Mode im undotierten Fall $x = 0$. Dies läßt sich damit erklären, daß für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ der Einfluß der Dotierung, d.h. der Wert von

¹Sie haben keine physikalische Bedeutung, da bei $x = 0,15$ die Phasengrenze des antiferromagnetischen Zustandes erreicht ist und spätestens dann die bei der Herleitung von (4.29) verwendeten Voraussetzungen nicht mehr zutreffen.

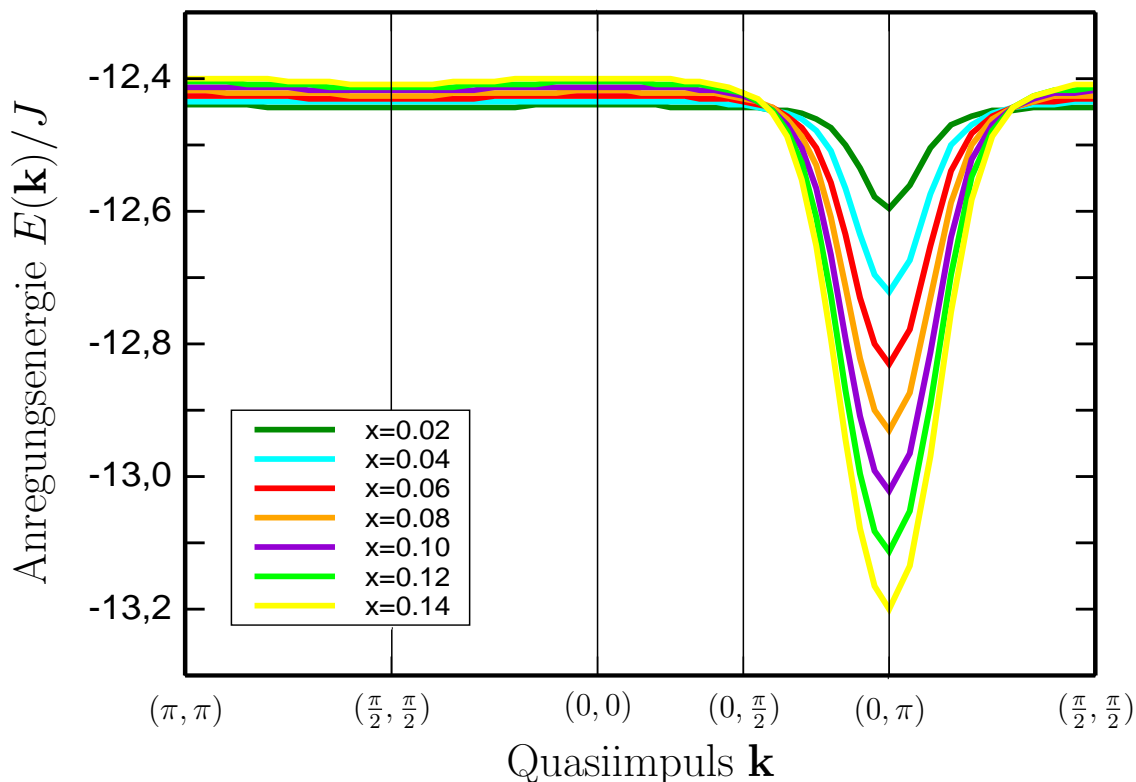


Abbildung 5.3: Anregungsenergie des elektronendotierten Systems für Verunreinigungs-konzentrationen von $x = 0$ bis $x = 0,14$. Diese Konzentrationen entsprechen der anti-ferromagnetischen Phase von $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Die verwendeten Modellparameterwerte betragen $t' = -0,16t$, $t'' = 0,10t$, $J = 0,23t$ und $\Delta = -0,8t$. Dabei gilt $t > 0$.

Δ , zu gering ist, um die Ladungsträger zu lokalisieren². Die Differenz der on-site-Energien stellt im Vergleich zu den Hopping-Anteilen nur eine kleine Störung dar. Dadurch wird die Bandbreite bloß unmerklich gemindert, auch wenn jede Störstelle eine geringe Energieabsenkung hervorruft. Der Gesamtbetrag, um welchen die Anregungsenergie reduziert wird, hängt von der Anzahl der Störstellen ab und steigt demnach mit zunehmender Konzentration. Wie Abb. 5.5 zeigt, spielt dieser Einfluß für den physikalisch relevanten Konzentrationsbereich von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (bis ca. $x = 0,03$) überhaupt keine Rolle, die Verschiebung liegt innerhalb der Strichstärke der Grafik.

²Testrechnungen, hier nicht dargestellt, mit hohem Potential für den lochdotierten Fall bzw. niedrigem Potential für den elektronendotierten Fall zeigen, daß für das Auftreten oder Ausbleiben lokalisierter Moden wirklich nur die Stärke des Potentials Δ von Bedeutung ist und nicht etwa andere Parameterunterschiede zwischen $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$.

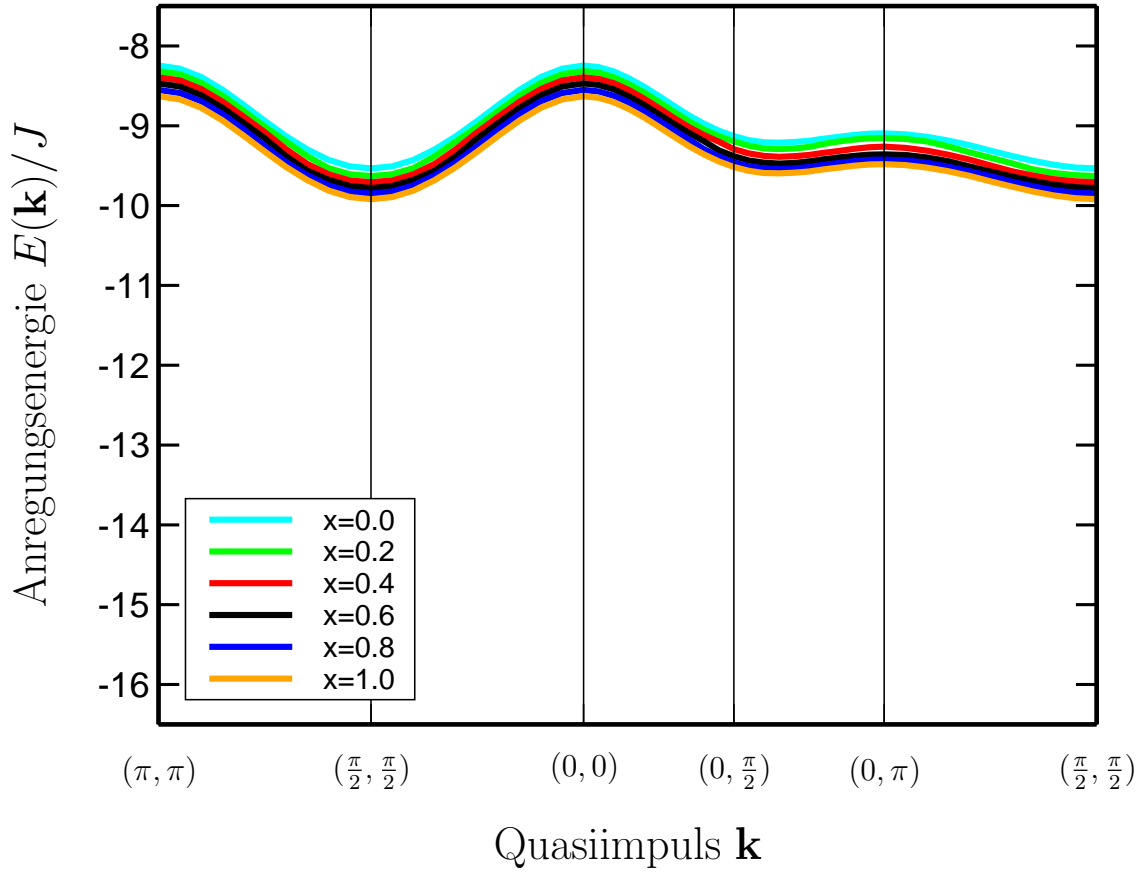


Abbildung 5.4: Anregungsenergie des lochdotierten Systems für Verunreinigungskonzentrationen von $x = 0$ bis $x = 1$. Die verwendeten Modellparameterwerte betragen $t' = -0,03t$, $t'' = 0,03t$, $J = -0,26t$ und $\Delta = 0,1t$. Dabei ist $t < 0$.

Um zu prüfen, wie relevant die für $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ auftretende lokale Anregungs-mode ist, wird das Gewicht dieses (lokalisierten) Zustandes untersucht. Dazu ist in Abb. 5.6 die Spektralfunktion im elektronendotierten Fall für verschiedene Konzentrationen x dargestellt. Der Peak mit der jeweils niedrigsten Energie gehört zur lokalisierten Mode, während der Peak bei $E \approx -12,3J$ der delokalisierten Anregung des translationsinvarianten Systems entspricht. Bereits bei kleinen Konzentrationen erhält die lokalisierte Mode ein beträchtliches Gewicht. Die Erhöhung des lokalisierten Peaks ist mit einem Gewichtsverlust des Peaks der delokalisierten Mode verbunden. Das Gesamtgewicht der Spektralfunktion bleibt dabei konstant, da die Summenregel

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE S_{\mathbf{k}}(E) = 1 \quad (5.1)$$

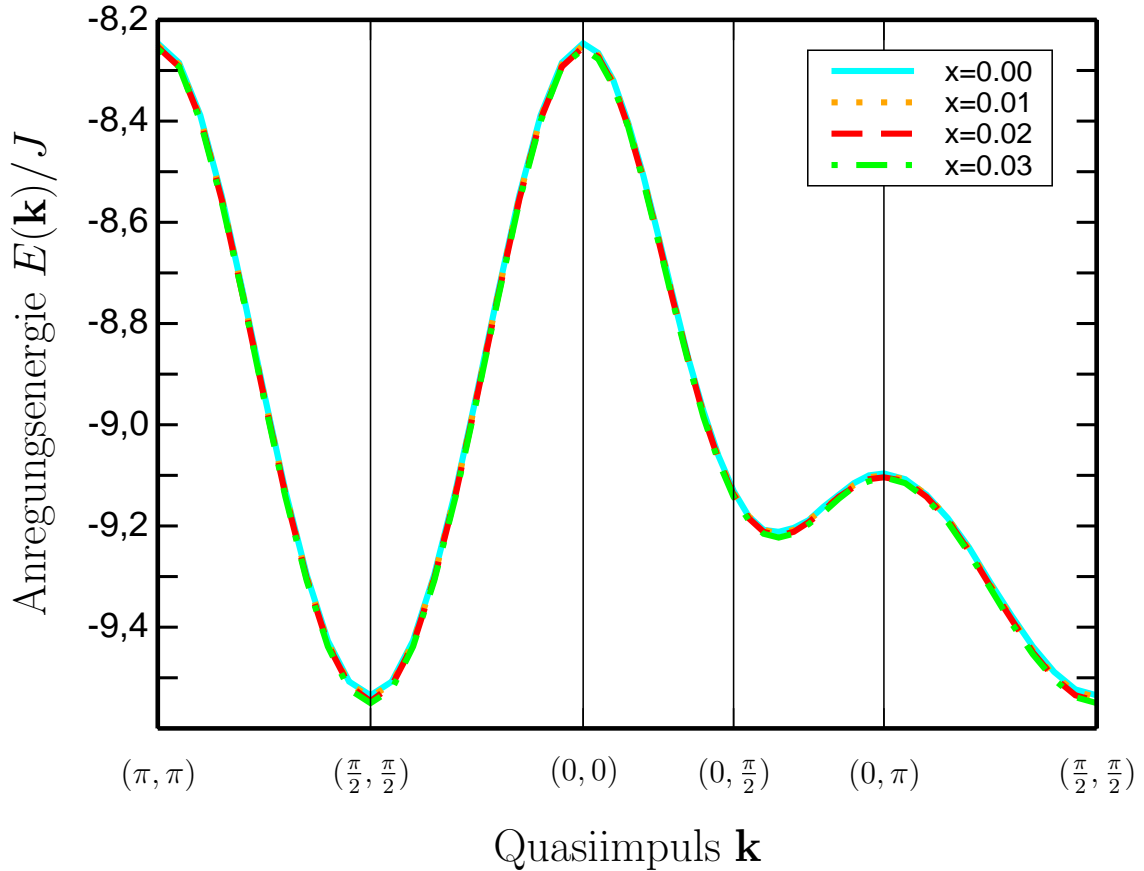


Abbildung 5.5: Anregungsenergie des lochdotierten Systems für Verunreinigungskonzentrationen von $x = 0$ bis $x = 0,03$. Diese Konzentrationen entsprechen der antiferromagnetischen Phase von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Die verwendeten Modellparameterwerte betragen $t' = -0,03t$, $t'' = 0,03t$, $J = -0,26t$ und $\Delta = 0,1t$. Dabei gilt $t < 0$.

gilt. Im Rahmen der in Kapitel 2 vorgeschlagenen Erklärung für die Unterschiede im Phasendiagramm bedeutet dies, daß die Quasiteilchen weniger beweglich sind und somit in der elektronendotierten Substanz weniger Spindefekte erzeugt werden. Demgegenüber sind die Ladungsträger im lochdotierten Fall nicht an den Verunreinigungsstellen gepinnt. Die Bildung von Spindefekten wird hier nicht durch das Dotierpotential behindert, was zu einer geringeren Stabilität der antiferromagnetischen Phase führt.

Der Quasiimpuls des Grundzustandes bleibt in beiden Fällen unbeeinflusst von der Dotierung. Für die Modellparameter, welche $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ entsprechen, liegt er stets bei $(\pi/2, \pi/2)$, für die Parameter von $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ bei $(0, \pi)$.

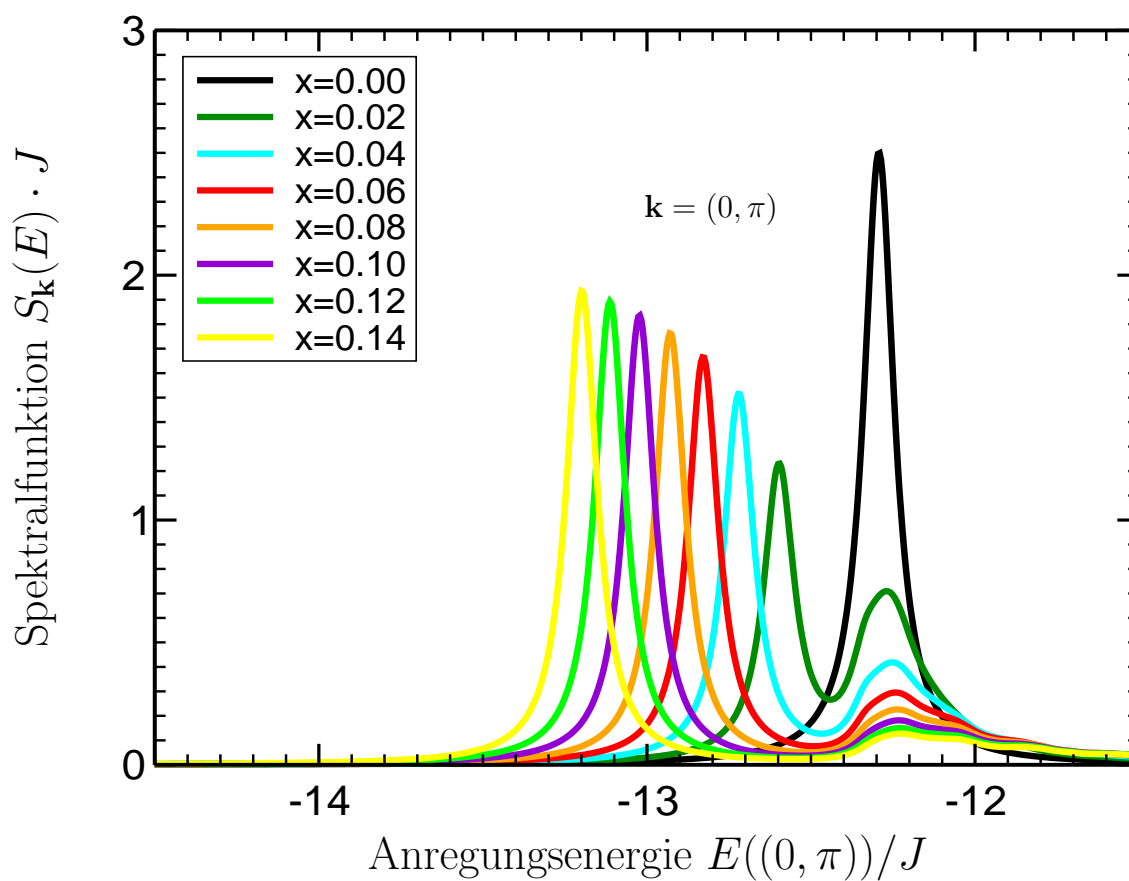


Abbildung 5.6: Niederenergetischer Peak der Spektralfunktion von $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ für den Quasiimpuls $(0, \pi)$ und verschiedene Konzentrationen. Die verwendeten Modellparameter sind $t' = -0,16t$, $t'' = 0,10t$, $J = 0,23t$ und $\Delta = -0,8t$ mit $t > 0$.

6 Diskussion und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde ein erweitertes stark korreliertes t - t' - t'' - J -Modell untersucht. Dieses enthält neben Hopping-Anteilen zu nächsten, zweitnächsten und drittnächsten Nachbarn und dem Heisenberg-Austauschterm eine zufällig auf die einzelnen Gitterplätze verteilte on-site-Energie. Es wurde ein Verfahren zur Berechnung der Einteilchen-Greensfunktion abgeleitet, welches die Einbeziehung eben dieser Unordnung ermöglicht und trotzdem die starke Korrelation des Systems berücksichtigt. Dazu wurde, aufbauend auf der Projektionstechnik, eine Matrixformulierung der Greensfunktion verwendet, die es erlaubt, das stark korrelierte Modell mittels Stringzuständen zu beschreiben. Wie aus der Literatur bekannt ist, läßt sich der Grundzustand des geordneten t - t' - t'' - J -Modells in guter Näherung als Linearkombination solcher Stringzustände beschreiben, da die Hüpfprozesse verbunden mit den Spinflipanteilen des Heisenbergterms den wichtigsten Anteil zur Grundzustandsenergie beisteuern. Auch bei Einbeziehung der Unordnung wurde von solchen Stringzuständen ausgegangen, diese sind nun gitterplatzabhängig. Sowohl in Experimenten als auch in praktischen Anwendungen spielen System, die aus vielen Teilchen bestehen, die Hauptrolle. Demzufolge sind vor allem solche Größen von Interesse, die nicht von der konkreten Anordnung der Dotieratome abhängen sondern nur von deren Konzentration. Für die theoretische Beschreibung bedeutet dies, daß eine Mittelung über die Konfiguration durchgeführt werden muß. Die Konfigurationsmittelung über die Gitterplatzenergien wurde in der Weise faktorisiert, daß die Mittelung über ein Produkt von Einzelstreuern näherungsweise durch das Produkt der gemittelten Einzelstreuer ersetzt wurde. Mit Hilfe dieses Verfahrens läßt sich die Einteilchen-Greensfunktion berechnen, die als Ausgangspunkt für die Bestimmung verschiedener physikalischer Größen, wie z.B. Anregungsenergien oder Spektralfunktion, geeignet ist.

Das t - t' - t'' - J -Modell ist von besonderem Interesse, da es geeignet ist, die niederenergetischen Eigenschaften der HTSL-Substanzen zu beschreiben. Die in dieser Arbeit entwickelte Methode wurde deshalb zur Illustration auf die beiden Kuprat-Substanzen $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ angewendet. Bei ihnen besteht ein auffälliger Unterschied in der Stabilität der antiferromagnetischen Phase. Diese bricht bei der lochdotierten Verbindung bereits bei ca. 3% Dotierungskonzentration zusammen, während bei der elektronendotierten die Grenze bei etwa 12% liegt. Als eine Erklärung dafür wird hier in der Arbeit der Einfluß der elektrostatischen

Potentiale der Dotieratome vorgeschlagen. Die Dotieratome geben Ladungsträger (Elektronen oder Löcher) in die Kupferoxidebene ab. Dadurch besitzen ihre Ionenrümpfe eine andere elektrische Ladung als die der übrigen Substratome. Um den Unterschied dieser Potentiale für beide HTSL-Substanzen abzuschätzen, wurden in Zusammenarbeit mit H. Rosner Bandstrukturrechnungen durchgeführt. Diese lieferten nicht nur die drei Hüpfparameter, sondern auch Werte für die on-site-Energien. Die Energieverschiebungen bei Einfluß der Verunreinigungen wurden dabei für das $3d_{x^2-y^2}$ -Orbital der Kupferatome in den Substanzen bestimmt. Um die Energieverschiebung im Dreiband-Modell auf eine entsprechende Verschiebung im $t-t'-t''-J$ -Modell umzurechnen, wurde die aus der Literatur bekannte Transformation zur Abbildung des Emery-Modells auf das Einbandmodell so erweitert, daß zusätzlich ortsabhängige on-site-Energien erfaßt werden. Der Übergang auf das einfachere $t-J$ -Modell erfolgt dabei gemäß dem Standardvorgehen durch das Zusammenfassen der Ladungsträger auf den Plaketten zu sogenannten Zhang-Rice-Singletts (im lochdotierten Fall) und die anschließende Projektion auf die niederenergetischen Zustände. Auf diese Weise läßt sich die Absenkung des Energieniveaus des Kupfers durch die Dotieratome auf die on-site-Energien des $t-J$ -Modells übertragen. Bei der Abbildung des Emery-Modells auf das $t-t'-t''-J$ -Modell wurde festgestellt, daß die Energieverschiebungen infolge der Dotierung bei beiden Modellen etwa gleich groß sind. Das ist darauf zurückzuführen, daß die Gitterplatzenergie einer Plakette in niedrigster Ordnung gleich der Summe der on-site-Energien ihrer einzelnen Atome ist. Demzufolge entspricht in erster Näherung die Differenz zwischen einer Plakette neben einer Dotierstelle und einer Plakette neben der undotierten Seltenerd-schicht auch gleich der Gesamtdifferenz für alle Einzelbausteine. Aufgrund der schwierigen Unterscheidbarkeit der Bänder des Sauerstoff- $2p$ -Orbitals konnte die Verschiebung an den Sauerstoffplätzen nicht erfaßt werden. Daher stimmt die Änderung der on-site-Energie einer Plakette des Emery-Modells mit der Energieverschiebung der Kupferatome überein.

Bedeutungsvoller ist jedoch, daß der Unterschied der on-site-Energien von dotierten und lochdotierten Plaketten bei $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ nur höchstens $\frac{1}{12}$ so groß ist wie bei $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Dies geht zu etwa gleichen Teilen auf die unterschiedlichen Gitterstrukturen und die Art der Ladungsträger zurück. Beim Aufbau der Elementarzellen unterscheiden sich die Substanzen hinsichtlich der Apex-Sauerstoffatome. Da bei $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ im Gegensatz zu $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ Apex-Sauerstoffatome vorhanden sind und sich in z -Richtung zwischen Seltenerd- und Kupferatomen befinden, schirmen sie letztere vom Einfluß der Dotierung teilweise ab.

Die Art der Ladungsträger spielt insofern eine Rolle, als daß Löcher bei zweifachbesetzten Plaketten ein Zhang-Rice-Singulett bilden, wohingegen sich zwei Elektronen bevorzugt am Kupferplatz in der Mitte der Plakette aufhalten. Beide Effekte gemeinsam führen zu einem deutlichen Unterschied im Einfluß der Dotierung, so daß die Energieverschiebung beim lochdotierten $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ et-

wa eine Größenordnung schwächer ist als beim elektronendotierten $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$.

Das t - t' - t'' - J -Modell mit den aus Bandstrukturechnungen und Modelltransformationen gewonnenen Parametern wurde dann mit der genannten Methode untersucht. Diese läßt sich, wie eine einfache Abschätzung zeigt, bis zu einer Konzentration von ca. 7% Dotieratomen anwenden. D.h. sie kann für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ vollständig und für $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ teilweise zur Beschreibung der antiferromagnetischen Phase genutzt werden. Betrachtet werden der Einteilchen-Grundzustand, bei welchem der Halbfüllung ein zusätzlicher Ladungsträger hinzugefügt wurde. Für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ergaben die Bandstrukturechnungen nur sehr kleine on-site-Energiewerte von weniger als 0,1eV. Aufgrund dieser geringen Größe wurde für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ die zufallsverteilte on-site-Energie vernachlässigt und nur der translationsinvariante Fall betrachtet. Mit den Hopping-Integralen der Bandstrukturechnungen ergab sich eine leichte Vergrößerung der Bandbreite. Der Quasiimpuls der Grundzustandes liegt bei $(\pi/2, \pi/2)$, wie auch aus der Literatur bekannt ist.

Für $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, wo das elektrostatische Potential der Dotieratome wesentlich stärker und deshalb im Modell durch den on-site-Energieterm berücksichtigt ist, tritt ein lokalisierter Zustand auf, welcher an seiner geringen Bandbreite erkennbar ist. Sein Quasiimpuls beträgt $(\pi, 0)$. Dies ist die Folge der Hüpfprozesse zwischen zweitnächsten Nachbarn. Für den translationsinvarianten Fall ist dies bereits aus der Literatur bekannt, es zeigt sich jedoch, daß auch bei Einbeziehung der Potentiale an den Dotierstellen der Quasiimpuls derselbe bleibt. Die Berechnung der Spektralfunktion ergibt, daß der Zustand auch bei geringer Dotierkonzentration ein relativ hohes Gewicht besitzt. Die Lokalisierung bedeutet dabei, daß sich die Elektronen vorrangig an den Gitterplätzen mit kleiner on-site-Energie aufhalten. Dadurch wird die Bewegung der Elektronen unterdrückt oder zumindest abgeschwächt, was zu einer Stabilisierung der antiferromagnetischen Ordnung führt. Denn diese wird durch statische Fehlstellen weniger effektiv zerstört als durch bewegliche Ladungsträger. Die Lokalisierung der Ladungsträger durch die Dotieratome wird deshalb als eine Erklärung für die unterschiedliche Stabilität der antiferromagnetischen Phasen von loch- und elektronendotierten Kupratsystemen vorgeschlagen. Die Ursache für den unterschiedlich starken Einfluß des Potentials der Dotieratome ist in dem verschiedenen Aufbau der Elementarzellen zu suchen, insbesondere in den Vorhandensein der Apex-Sauerstoffatome im $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Das heißt daß der Unterschied im Phasendiagramm nicht nur auf die unterschiedliche Art der Ladungsträger zurückzuführen ist, sondern auch strukturelle Effekte eine Rolle spielen.

Die hier vorgestellten Untersuchungen zum Unterschied in der Stabilität in loch- bzw. elektronendotierten Systemen könnten in verschiedene Richtungen erweitert werden. Dies liegt nicht mehr im Rahmen der vorliegenden Arbeit, soll aber an dieser Stelle wenigstens kurz erwähnt werden.

Hinsichtlich der Anwendung auf die Kupratsysteme lassen sich ebenfalls weitere

Ziele definieren. Die Unordnungseffekte wurden bisher ausschließlich in einem Diagonalterm mit ortsabhängigen on-site-Energien berücksichtigt, es wurde bisher nicht untersucht, wie sich die Dotierung auf die anderen Parameter auswirkt. Es wäre daher interessant, auch in dieser Hinsicht Bandstrukturrechnungen durchzuführen, d.h. zu untersuchen, ob lokale Hüpfparameter von der Art der benachbarten Seltenerd-Atome abhängen. Sollte dies der Fall sein, müßte die vorgestellte Methode erweitert werden, um auch nicht-diagonale Unordnungseffekte behandeln zu können.

Unter Verwendung für Kupratsysteme geeigneter Modellparameter wurden in der vorliegenden Arbeit Einteilcheneigenschaften berechnet. Die verwendeten Näherungen sind für den Fall berechtigt, daß die Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Quasi-Teilchen, hier sind dies die Ladungsträger mit den Spinddefekten, vernachlässigt werden können. Für Stringzustände bis zu einer Länge von zwei Gitterplätzen können die genannten Wechselwirkungen bis zu einer Quasi-Teilchenkonzentration von etwa 6% vernachlässigt werden. Dadurch erscheint die Anwendung des Verfahrens für die gesamte antiferromagnetische Phase des lochdotierten Falls sinnvoll zu sein. Bei Elektronendotierung mit der wesentlich stabileren geordneten Phase müssen jedoch Wechselwirkungen berücksichtigt werden. Für die Bestimmung der Stabilität selbst müssen weitere Eigenschaften, insbesondere die Spin-Spin-Korrelationen oder die Erwartungswerte der Spins, bestimmt werden. Dies wäre durch eine entsprechende Erweiterung der Greens-funktionsmatrix möglich.

Bei der Ableitung der Methode wurde bereits erwähnt, daß diese der Average T-Matrix Approximation (ATA) entspricht, welche die Unabhängigkeit der Einzelstreuer annimmt und zur Konfigurationsmittelung eine Faktorisierungsnäherung verwendet. Aus der Theorie der ungeordneten Systeme mit diagonaler Unordnung ist bekannt, daß die Coherent Potential Approximation (CPA) darüber hinausgeht und in Folge ihrer Selbstkonsistenz sehr gute Resultate liefert. Eine mögliche Erweiterung wäre deshalb, in weiterführenden Arbeiten entsprechende selbstkonsistente Gleichungen abzuleiten.

Anhang A Berechnung von Ω^ϵ

Am Beispiel von Stringoperatoren der Länge 1 soll die Berechnung der Matrixelemente von Ω^ϵ gezeigt werden. Diese lauten

$$\begin{aligned}
 [\Omega_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\epsilon]_{mm'} &= \sum_{\mathbf{j}} \epsilon_{\mathbf{j}} (B_m(\mathbf{k}) | \bar{n}_{\mathbf{j}} B_{m'}(\mathbf{k}')) & (A.1) \\
 &= \sum_{\mathbf{j}} \epsilon_{\mathbf{j}} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{i}_1, \mathbf{i}_2 \in \downarrow} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{i}_1} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{i}_2} \cdot (\bar{c}_{\mathbf{i}_1 + \mathbf{s}_m, \sigma}^+ S_{\mathbf{i}_1}^+ | \bar{n}_{\mathbf{j}} \bar{c}_{\mathbf{i}_2} + \mathbf{s}_{m'}^+ S_{\mathbf{i}_2}^+)
 \end{aligned}$$

Die Stringoperatoren in (A.1) werden auf den Néel-Zustand angewendet. Deshalb entstehen nur dann nichtverschwindende Beiträge, wenn die Spinflipoperatoren im bra- und ket-Vektor auf demselben Platz wirken, d.h. für $\mathbf{i}_1 = \mathbf{i}_2$. Ebenso muß die Doppelbesetzung am selben Platz erzeugt und wieder vernichtet werden. Damit muß gelten $\mathbf{j} = \mathbf{i}_1 + \mathbf{s}_m$ and $\mathbf{i}_1 + \mathbf{s}_m = \mathbf{i}_2 + \mathbf{s}_{m'}$ or $\mathbf{s}_m = \mathbf{s}_{m'}$. Die Stringoperatoren müssen benachbart sein. Ist \mathbf{i}_1 aus dem \downarrow -Untergitter, so gehört der Nachbarplatz $\mathbf{i}_1 + \mathbf{s}_m = \mathbf{j}$ zum anderen Untergitter. Gleichung (A.1) reduziert sich so zu

$$[\Omega_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\epsilon]_{mm'} = \delta_{mm'} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{j} \in \uparrow} \epsilon_{\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{j} - \mathbf{s}_m)} e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{j} - \mathbf{s}_{m'})} \quad (A.2)$$

Die Berechnung der Matrixelemente zu Strings der Längen 0 und 2 liefert analoge Resultate.

Anhang B Gemittelte Greens-Funktions-Matrix

Die Greensmatrix lautet gemäß Gleichung (4.22)

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{j}} \epsilon_{\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^* C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}} \quad (\text{B.1})$$

wobei $C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}$ gegeben ist als $C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0$. Zur Bestimmung von $C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}$ werden beide Seiten mit $\mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}$ multipliziert und anschließend über \mathbf{k} summiert. Die so gefundene Gleichung hat die Lösung

$$C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{l}} = \mathcal{W}_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^0 + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} \sum_{\mathbf{j}} \epsilon_{\mathbf{j}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}}^* e^{-i\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{j}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}} \quad (\text{B.2})$$

$$= e^{i\mathbf{k}'\mathbf{l}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}'\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^0 + \epsilon_1 \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^* C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{l}} \quad (\text{B.3})$$

$$+ \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{j}(\neq \mathbf{l})} \epsilon_{\mathbf{j}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{l}-\mathbf{j})} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^* C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}} , \quad (\text{B.4})$$

Sie wird mit ϵ_1 multipliziert

$$\epsilon_1 C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{l}} = \frac{1}{1 - \epsilon_1 \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^*} \epsilon_1 \mathcal{W}_{\mathbf{k}'\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^0 \quad (\text{B.5})$$

$$+ \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \frac{1}{1 - \epsilon_1 \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^*} \epsilon_1 \cdot \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{j}(\neq \mathbf{l})} \mathcal{W}_{\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\tilde{\mathbf{k}}}^0 \mathcal{W}_{\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{j}}^* e^{i\tilde{\mathbf{k}}(\mathbf{l}-\mathbf{j})} \epsilon_{\mathbf{j}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{j}}$$

Unter der Annahme, daß die on-site-Energie ϵ_1 nur eine die n Werte $\epsilon^1, \dots, \epsilon^n$ annehmen kann, ergibt sich für die Einzelstreumatrizen

$$t_1 = \frac{1}{1 - \epsilon_1 \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}1} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}1}^*} \epsilon_1 = \sum_{\sigma=\downarrow, \uparrow} \frac{1}{1 - \epsilon_1 \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}^*} \epsilon_1 \delta_{1\in\sigma} \quad (\text{B.6})$$

Es soll jetzt die Mittelung von (B.5) durchgeführt werden. An dieser Stelle wird nun die Näherung unabhängiger Streuer verwendet. Sie verwendet die Annahme, daß das Teilchen nie zu einem Platz zurückkehrt, an welchem es einmal gestreut wurde. Dann kann man das gemittelte Produkt aus zwei Streumatrizen an verschiedenen Gitterplätzen durch das Produkt der einzeln gemittelten Größen ersetzen:

$$\overline{t_1 \epsilon_j C_{\mathbf{k}'}^j} \approx \overline{t_1} \overline{\epsilon_j C_{\mathbf{k}'}^j} \quad \text{für } \mathbf{l} \neq \mathbf{j} \quad (\text{B.7})$$

Aus (B.5) folgt der gemittelte Wert

$$\begin{aligned} \overline{\epsilon_1 C_{\mathbf{k}'}^1} &= \overline{t_1} \mathcal{W}_{\mathbf{k}'1} e^{i\mathbf{k}'1} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^0 + \overline{t_1} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{j}} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}1} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^* e^{i\mathbf{k}(1-\mathbf{j})} \overline{\epsilon_j C_{\mathbf{k}'}^j} \\ &\quad - \overline{t_1} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}1} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\mathbf{k}1}^* \overline{\epsilon_1 C_{\mathbf{k}'}^1} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Dabei gilt für die Einzelstreuermatrix unter Verwendung von (4.6)

$$\overline{t_1} = \sum_{\sigma=\downarrow, \uparrow} \sum_{\alpha} c_{\alpha} \frac{1}{1 - \epsilon^{\alpha} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}^*} \epsilon^{\alpha} \delta_{1\in\sigma} =: t_{\uparrow} \delta_{1\in\uparrow} + t_{\downarrow} \delta_{1\in\downarrow} \quad (\text{B.9})$$

Mit Gleichung (B.8) folgt

$$\begin{aligned} \left(1 + \overline{t_1} \frac{2}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{W}_{\tilde{\mathbf{k}}1} \mathcal{G}_{\tilde{\mathbf{k}}}^0 \mathcal{W}_{\tilde{\mathbf{k}}1}^* \right) \overline{\epsilon_1 C_{\mathbf{k}'}^1} &= \overline{t_1} \mathcal{W}_{\mathbf{k}'1} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}_1} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^0 \\ &\quad + \overline{t_1} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}1} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 e^{i\mathbf{k}1} \underbrace{\sum_{\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{j}}^* \overline{\epsilon_j C_{\mathbf{k}'}^j}}_{f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Mit der Abkürzung

$$A_{\mathbf{l}} := \frac{1}{1 + \bar{t}_1 \frac{2}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{W}_{\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\tilde{\mathbf{k}}}^0 \mathcal{W}_{\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{l}}^*} \bar{t}_1} \quad (\text{B.11})$$

läßt sich dies schreiben als

$$\overline{\epsilon_{\mathbf{l}} C_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{l}}} = A_{\mathbf{l}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}'\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}'}^0 + A_{\mathbf{l}} \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (\text{B.12})$$

Die Gleichung kann man nun nach $f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ auflösen. Dazu werden beide Seiten mit $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathcal{W}_{\mathbf{k}\mathbf{l}}^*$ multipliziert und anschließend wird über \mathbf{l} summiert. Mit $\sum_{\mathbf{l} \in \sigma} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{l}} = \frac{N}{2} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ folgt

$$f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{N}{2} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \cdot \frac{1}{\frac{1}{1 - \sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}^* \frac{1}{1 + t_{\sigma} \frac{2}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{G}_{\tilde{\mathbf{k}}}^0 \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}}^*} t_{\sigma} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}^* \mathcal{G}_{\sigma\mathbf{k}}^0} - 1}} \quad (\text{B.13})$$

sowie

$$\bar{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{2}{N} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (\text{B.14})$$

$$= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{\frac{1}{1 + f_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{\mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0}}} \quad (\text{B.15})$$

$$= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{z \mathbf{1} - \Omega_{\mathbf{k}}^0 - \sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}^* \frac{1}{1 + t_{\sigma} \frac{2}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}} \mathcal{G}_{\tilde{\mathbf{k}}}^0 \mathcal{W}_{\sigma\tilde{\mathbf{k}}}^*} t_{\sigma} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}^*} \quad (\text{B.16})$$

Im speziellen Fall, daß die on-site-Energie nur zwei mögliche Werte annehmen kann ($\alpha \in \{1, 2\}$ and $\epsilon^1 = 0$, $\epsilon^2 = \Delta$, $c_1 = 1 - x$ and $c_2 = x$) erhält man

$$t_{\sigma} = x \Delta \frac{1}{1 - \Delta \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^0 \mathcal{W}_{\sigma\mathbf{k}}^*} \quad (\text{B.17})$$

woraus sich schließlich (4.29) ergibt.

Anhang C Matrix des Hamiltonoperators

Die Matrix $\Omega_{\mathbf{k}}^0$ des Hamiltonoperators H_0 aus (4.1) im Raum der Basisvektoren, die durch Anwendung der Operatoren (4.12),(4.13) und (4.14) auf den Néel-Zustand mit einer Doppelbesetzung entstehen, hat die Form

$$\begin{pmatrix} \omega_0 & -t & -t & -t & -t & j_{-2,0} & j_{-1,1} & j_{-1,-1} & j_{0,-2} & j_{-1,-1} & j_{1,-1} & j_{2,0} & j_{1,-1} & j_{1,1} & j_{0,2} & j_{1,1} & j_{-1,1} \\ -t & \omega_1 & -t' & -t'' & -t' & -t & -t & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & -t' & \omega_1 & -t' & -t'' & 0 & 0 & 0 & -t & -t & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & -t'' & -t' & \omega_1 & -t' & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & -t & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & -t' & -t'' & -t' & \omega_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & -t & -t \\ j_{2,0} & -t & 0 & 0 & 0 & \omega_2 & -t' & -t' & 0 & 0 & 0 & t''_{2,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ j_{1,-1} & -t & 0 & 0 & 0 & -t' & \omega_2 & -t'' & 0 & 0 & t'_{1,-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ j_{1,1} & -t & 0 & 0 & 0 & -t' & -t'' & \omega_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t'_{1,1} & 0 \\ j_{0,2} & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_2 & t' & t' & 0 & 0 & 0 & 0 & t''_{0,2} & 0 \\ j_{1,1} & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t' & \omega_2 & t'' & 0 & 0 & 0 & 0 & t'_{1,1} & 0 \\ j_{-1,1} & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & t'_{-1,1} & 0 & t' & t'' & \omega_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ j_{-2,0} & 0 & 0 & -t & 0 & t''_{-2,0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_2 & t' & t' & 0 & 0 & 0 \\ j_{-1,1} & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t' & \omega_2 & t'' & 0 & 0 & t'_{-1,1} \\ j_{-1,-1} & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t'_{-1,-1} & 0 & t' & t'' & \omega_2 & 0 & 0 & 0 \\ j_{0,-2} & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & t''_{0,-2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \omega_2 & t' & t' \\ j_{-1,-1} & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & t'_{-1,-1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t' & \omega_2 & t'' \\ j_{1,-1} & 0 & 0 & 0 & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t'_{1,-1} & 0 & t' & t' & \omega_2 \end{pmatrix}$$

mit

$$\omega_0 = -t' \cdot 4 \cos k_x \cos k_y - t'' \cdot 2 [\cos(2k_x) + \cos(2k_y)] \quad (\text{C.1})$$

$$\omega_1 = \frac{3}{2} J \quad (\text{C.2})$$

$$\omega_2 = \frac{5}{2} J \quad (\text{C.3})$$

$$j_{z_x, z_y} = \frac{J}{2} e^{i(z_x k_x + z_y k_y)} \quad (\text{C.4})$$

$$t'_{z_x, z_y} = t' \cdot e^{i(z_x k_x + z_y k_y)} \quad (\text{C.5})$$

$$t''_{z_x, z_y} = t'' \cdot e^{i(z_x k_x + z_y k_y)} \quad (\text{C.6})$$

Setzt man die Werte von Seite 59 ein, also $t' = t'' = 0$, $J = 0,225$ und $t = 1$ sowie den Quasiimpuls $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$, so findet man als niedrigsten Eigenwert

$$\lambda = -2,451 \quad (\text{C.7})$$

Der zugehörige Eigenvektor lautet

$$v = (0,59; 0,34; 0,34; 0,34; 0,34; 0,14; 0,14; 0,09; 0,14; 0,14; 0,09; 0,09; 0,14; 0,14; 0,09; 0,14; 0,14) \quad (\text{C.8})$$

Für die kompakten Operatoren aus (4.31)-(4.33) lautet die zu H_0 gehörende Matrix

$$\begin{pmatrix} \omega_0 & -2t & \frac{J}{\sqrt{3}} [(\cos k_x + \cos k_y)^2 - 1] \\ -2t & \frac{3}{2}J - 2t' - t'' & -\sqrt{3}t \\ \frac{J}{\sqrt{3}} [(\cos k_x + \cos k_y)^2 - 1] & -\sqrt{3}t & \frac{5}{2}J - \frac{4}{3}t' (1 + \cos k_x \cos k_y) + \frac{1}{3}t'' (1 + \cos^2 k_x + \cos^2 k_y) \end{pmatrix}$$

Der niedrigste Eigenwert (mit den obigen Parameterwerten) lautet in diesem Fall

$$\lambda^{\text{kompakt}} = -2,435 \quad (\text{C.9})$$

mit dem zugehörigen Eigenvektor

$$v^{\text{kompakt}} = (0,59; 0,69; 0,42) \quad (\text{C.10})$$

Die Unterschiede in den Vorfaktoren, z.B. Vorfaktor 0,34 für die nichtzusammengefaßten Strings der Länge 1 gegenüber Vorfaktor 0,69 für die zusammengefaßten, resultieren daraus, daß bei den zusammengefaßten Operatoren noch ein Faktor $\frac{1}{\sqrt{4}}$ (bzw. $\frac{1}{\sqrt{4(4-1)}}$ bei den Strings der Länge 2) enthalten ist.

Anhang D Vorfaktoren bei der Modelltransformation

Die in Gleichung (3.11) auf Seite 29 beim Übergang von den lokalen zu den symmetrischen und antisymmetrischen Sauerstoffoperatoren auftretenden Koeffizienten lauten wie folgt:

- Kupfer-Sauerstoff-Hüpfen (t^{pd} -Term): Hier gilt

$$\lambda_{\mathbf{l}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(1-\mathbf{l}')} f(\mathbf{k})$$

Der Vorfaktor ist offenbar nur von der Distanz $\mathbf{l} - \mathbf{l}'$ abhängig, nicht von den konkreten Orten. Der Wert $\lambda_0 := \lambda_{\mathbf{11}} = 0,9581$ ist relativ groß, was die starke Hybridisierung zwischen Kupfer- und Sauerstoffplätzen ausdrückt. Die Werte für die ersten Distanzen $\mathbf{l} - \mathbf{l}'$ sind in Tabelle D.1 am Ende dieses Abschnitts angegeben.

- Sauerstoff-Sauerstoff-Hüpfen (t^{pp} -Term): Hier sind die Vorfaktoren wie folgt definiert:

$$\mu_{\mathbf{l}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(1-\mathbf{l}')} \frac{(-8)}{f(\mathbf{k})} \sin^2 \frac{k_x}{2} \sin^2 \frac{k_y}{2}$$

und

$$\nu_{\mathbf{l}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(1-\mathbf{l}')} \frac{4}{f(\mathbf{k})} \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2} \left(\sin^2 \frac{k_x}{2} - \sin^2 \frac{k_y}{2} \right)$$

Sie hängen ebenfalls nur von der Distanz $\mathbf{l} - \mathbf{l}'$ ab. Der erste ist bzgl. Vertauschung von \mathbf{l} und \mathbf{l}' symmetrisch, der zweite antisymmetrisch: $\mu_{\mathbf{l}'} = \mu_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$,

$\nu_{\mathbf{l}\mathbf{l}'} = -\nu_{\mathbf{l}'\mathbf{l}}$. Auch diese Vorfaktoren klingen mit wachsender Distanz $\mathbf{l}-\mathbf{l}'$ rasch ab, wie aus Tabelle D.1 zu erkennen ist.

$\mathbf{l}_x - \mathbf{l}'_x$	$\mathbf{l}_y - \mathbf{l}'_y$	$\lambda_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$	$\mu_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$	$\nu_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}$
0	0	0.9581	-1.4567	0
0	1	-0.1401	0.5497	-0.2678
0	2	-0.0137	0.1245	0.0812
1	1	-0.0235	-0.2483	0
1	2	-0.0069	-0.0322	-0.0609
2	2	-0.0035	-0.0231	0

Tabelle D.1: Werte der Vorfaktoren bei verschiedenen Differenzen $\mathbf{l} - \mathbf{l}'$. Die im teilweise von [Belinicher 1994a] abweichenden Vorzeichen sind auf die leicht unterschiedlich definierten symmetrischen und antisymmetrischen Sauerstoffoperatoren zurückzuführen.

Anhang E Unterraum der zweifachbesetzten Plaketten

Der Unterraum der mit zwei Löchern besetzten Plakette wird von den folgenden Vektoren aufgespannt [*Belinicher 1994a*]:

$$\begin{aligned}
 |\psi_1\rangle &= d_{1\downarrow}^+ d_{1\uparrow}^+ |0\rangle \\
 |\varphi_1\rangle &= w_{1\uparrow}^+ w_{1\downarrow}^+ |0\rangle \\
 |\tilde{\varphi}_1\rangle &= v_{1\uparrow}^+ v_{1\downarrow}^+ |0\rangle \\
 |\chi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{1\uparrow}^+ w_{1\downarrow}^+ - d_{1\downarrow}^+ w_{1\uparrow}^+) |0\rangle \\
 |\eta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (w_{1\uparrow}^+ v_{1\downarrow}^+ - w_{1\downarrow}^+ v_{1\uparrow}^+) |0\rangle \\
 |\tilde{\chi}_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{1\uparrow}^+ v_{1\downarrow}^+ - d_{1\downarrow}^+ v_{1\uparrow}^+) |0\rangle \\
 |\tau_{1,-1}\rangle &= d_{1\uparrow}^+ w_{1\uparrow}^+ |0\rangle \\
 |\tau_{1,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{1\uparrow}^+ w_{1\downarrow}^+ + d_{1\downarrow}^+ w_{1\uparrow}^+) |0\rangle \\
 |\tau_{1,1}\rangle &= d_{1\downarrow}^+ w_{1\downarrow}^+ |0\rangle \\
 |\tilde{\tau}_{1,-1}\rangle &= d_{1\uparrow}^+ v_{1\uparrow}^+ |0\rangle \\
 |\tilde{\tau}_{1,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{1\uparrow}^+ v_{1\downarrow}^+ + d_{1\downarrow}^+ v_{1\uparrow}^+) |0\rangle \\
 |\tilde{\tau}_{1,1}\rangle &= d_{1\downarrow}^+ v_{1\downarrow}^+ |0\rangle \\
 |\zeta_{1,-1}\rangle &= w_{1\uparrow}^+ v_{1\uparrow}^+ |0\rangle \\
 |\zeta_{1,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (w_{1\uparrow}^+ v_{1\downarrow}^+ + w_{1\downarrow}^+ v_{1\uparrow}^+) |0\rangle \\
 |\zeta_{1,1}\rangle &= w_{1\downarrow}^+ v_{1\downarrow}^+ |0\rangle
 \end{aligned}$$

Literaturverzeichnis

- [*Anderson 1987*] P. W. Anderson, *science* **235**, 1196 (1987)
- [*Alexander 1991*] M. Alexander *et. al.*, *Phys. Rev. B* **43**, 333 (1991)
- [*Almasan 1991*] C. C. Almasan and M. B. Maple, in *Chemistry of High-Temperature Superconductors*, edited by C. N. R. Rao (World Scientific, Singapore, 1991), p.205
- [*ATLAS*] <http://math-atlas.sourceforge.net/>
- [*Baskaran 2005*] G. Baskaran, *cond-mat/0505509v2*
- [*Baumgärtel 1993*] G. Baumgärtel, J. Schmalian and K.-H. Bennemann, *Phys. Rev. B* **48**, 3983 (1993)
- [*Becker 1990*] K. W. Becker, W. Brenig and P. Fulde, *Z. Phys. B* **81**, 165 (1990)
- [*Becker 1993*] K. W. Becker and U. Muschelknautz, *Phys. Rev. B* **48**, 13826 (1993)
- [*Belinicher 1994a*] V. I. Belinicher and A. L. Chernyshev, *Phys. Rev. B* **49**, 9746 (1994)
- [*Belinicher 1994b*] V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev and L. V. Popovich, *Phys. Rev. B* **50**, 13768 (1994)
- [*Benard 1993*] P. Bénard, L. Cheng, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **47**, 15217 (1993)
- [*Blackman 1971*] J. A. Blackman, D. M. Esterling and N. F. Berk, *Phys. Rev. B* **4**, 2412 (1971)
- [*Cho 1993*] J. H. Cho, F. C. Chou, and D. C. Johnston, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 222 (1993)
- [*Cox 1992*] P. A. Cox: *Transition Metal Oxides: An Introduction to Their Electronic Structure and Properties (The International Series of Monographs on Chemistry, No 27)* (Clarendon Pr, Oxford, 1992)

- [Dagotto 1994] E. Dagotto, A. Nazarenko and M. Boninsegni, Phys. Rev. B **73**, 728 (1994)
- [Deeg 1994] M. Deeg and H. Fehske, Phys. Rev. B **50**, 17874 (1994)
- [Dopf 1990] G. Dopf, A. Muramatsu and W. Hanke, Phys. Rev. B **41**, 9264 (1990)
- [Dopf 1992] G. Dopf *et. al.*, Phys. Rev. B **68**, 2082 (1992)
- [Eder 1990a] R. Eder and K. W. Becker, Z. Phys. B **78**, 219 (1990)
- [Eder 1990b] R. Eder, K. W. Becker and W. H. Stephan, Z. Phys. B **81**, 33 (1990)
- [Emery 1987] V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987)
- [Eskes 1989] H. Eskes, G.A.Sawatzky and L.A. Feiner, Physica C **160**, 424 (1989)
- [Eskes 1990] H. Eskes, L. H. Tjeng and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **41**, 288 (1990)
- [Eskes 1991] H. Eskes and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **44**, 9656 (1991)
- [Eskes 1991a] H. Eskes, M. B. J. Meinders and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **67**, 1035 (1991)
- [Eskes 1991b] H. Eskes and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **43**, 119 (1991)
- [Eskes 1994] H. Eskes, A. M. Oles, M. B. J. Meinders and W. Stephan, Phys. Rev. B **50**, 17980 (1994)
- [Forster 1990] D. Forster: *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions* (Addison-Wesley, Redwood City, 1990)
- [Fulde 1995] P. Fulde: *Electron Correlations in Molecules and Solids*, 3. erweiterte Auflage (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1995)
- [Gooding 1990] R. J. Gooding and V. Elser, Phys. Rev. B **41**, 2557 (1990)
- [Gooding 1991] R. J. Gooding, Phys. Rev. Lett. **66**, 2266 (1991)
- [Gooding 1994] R. J. Gooding, K.J.E. Vos and P.W.Leung, Phys. Rev. B **50**, 12866 (1994)
- [Harima 2001] N. Harima *et. al.*, Phys. Rev. B **64**, 220507(R) (2001)
- [Harima 2002] N. Harima *et. al.*, cond-mat/0203154v1 (2002)
- [Hayden 1990] S. M. Hayden *et. al.*, Phys. Rev. B **42**, 10220 (1990)
- [Hirsch 2003] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **67**, 035103 (2003)

-
- [*Hubbard 1963*] R. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **276**, 238 (1963)
- [*Hybertsen 1989*] M.S. Hybertsen, M. Schlüter, and D.R. Jennison, Phys. Rev. B **39**, 9028 (1989)
- [*Hybertsen 1990*] M.S. Hybertsen *et. al.*, Phys. Rev. B **41**, 11068 (1990)
- [*Kadono 2005*] R. Kadono *et. al.*, cond-mat/0508124v1
- [*Keimer 1992*] B. Keimer *et. al.*, Phys. Rev. B **45**, 7430 (1992)
- [*Klauda 1993*] M. Klauda *et. al.*, Phys. Rev. B **48**, 1217 (1993)
- [*Ko 1990*] D. Y. K. Ko, Phys. Rev. Lett. **65**, 116 (1990)
- [*Kobayashi 2002*] A.Kobayashi *et. al.*, cond-mat0202116 (2002)
- [*Koepernick 1997*] K. Koepernik, B. Velický, R. Hayn and H. Eschrig, Phys. Rev. B **55**, 5717 (1997)
- [*Koepernick 1998*] K. Koepernik, B. Velický, R. Hayn and H. Eschrig, Phys. Rev. B **58**, 6944 (1998)
- [*Korshunov 2004*] M. M. Korshunov, S. G. Ovchinnikov and A. V. Sherman, cond-mat/0405287v1
- [*McMahan 1988*] A. K. McMahan, R. M. Martin, and S. Satpathy, Phys. Rev. B **38**, 6650 (1988)
- [*Lee 1999*] P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **63**, 680 (1999)
- [*Luke 1990*] G. M. Luke *et. al.* , Phys. Rev. B **42**, 7981 (1990)
- [*Ma 2005*] T. Ma and S. Feng, cond-mat/0501549v2
- [*Martins 1999*] G. Martins, R. Eder and E. Dagotto, Phys. Rev. B **60**, R3716 (1999)
- [*Meinders 1993*] M. B. J. Meinders, H. Eskes and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **48**, 3916 (1993)
- [*Mila 1988*] F. Mila, Phys. Rev. B **38**, 11358 (1988)
- [*Mori 1965*] H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965)
- [*Mueller-Hartmann 2001*] E. Müller-Hartmann and A. Reischl, Eur. Phys. J. B **28**, 173 (2002)
- [*Neudert 1998*] R. Neudert *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 657 (1998)
- [*Nolting 1985*] W. Nolting, Phys. Rev. B **32**, 403 (1985)

- [*Nolting 1997*] W. Nolting: *Grundkurs Theoretische Physik, Band 7* (Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 1997)
- [*Oles 1989*] A. M. Oleś, International Journal of Modern Physics B, Vol. 3, No. 12, 1789 (1989)
- [*Ohta1992*] Y. Ohta *et. al.*, Phys. Rev. B **46**, 14022 (1992)
- [*Press 1999*] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery: *Numerical Recipes in C*, 2nd edition (Cambridge University Press, Cambridge, 1999)
- [*Raimondi 1996*] R. Raimondi, J. H. Jefferson and L. F. Feiner, Phys. Rev. B **53**, 8774 (1996)
- [*Richter 2000*] J. Richter, C. Waidacher and K. W. Becker, Phys. Rev. B **61**, 9871 (2000)
- [*Ruckenstein 1987*] A. E. Ruckenstein, P. J. Hirschfeld and J. Appel, Phys. Rev. B **36**, 857 (1987)
- [*Scalettar 1991*] R. T. Scalettar *et. al.*, Phys. Rev. B **44**, 770 (1991)
- [*Shastry 1989*] B. S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **63**, 1288 (1989)
- [*Shih 2004*] C. T. Shih *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **92**, 227002 (2004)
- [*Stephan 1989*] W. H. Stephan, W. v. d. Linden and P. Horsch, Phys. Rev. B **39**, 2924 (1989)
- [*Su 2005*] G. Su, Phys. Rev. B **72**, 092510 (2005)
- [*Sulewski 1990*] P. E. Sulewski *et. al.*, Phys. Rev. B **41**, 225 (1990)
- [*Takagi 1989*] H. Takagi, S. Uchida and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. **62**, 1197 (1989)
- [*Takagi 1992*] H. Takagi *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **69**, 2975 (1992)
- [*Thurston 1990*] T. R. Thurston *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **65**, 263 (1990)
- [*Tipper 2005*] J. M. Tipper, C. Genert and K. J. E. Vos, Phys. Rev. B **71**, 054515 (2005)
- [*Tjernberg 2003*] O. Tjernberg *et. al.*, Phys. Rev. B **67**, 100501(R) (2003)
- [*Tohyama 1992*] T. Tohyama and S. Maekawa, Physica C **191**, 193 (1992)
- [*Tohyama 1994*] T. Tohyama and S. Maekawa, Phys. Rev. B **49**, 3596 (1994)
- [*Tohyama 2001*] T. Tohyama and S. Maekawa, Phys. Rev. B **64**, 212505 (2001)

-
- [*Tohyama 2003*] T. Tohyama and S. Maekawa, Phys. Rev. B **67**, 092509 (2003)
- [*Tohyama 2004*] T. Tohyama and S. Maekawa, Phys. Rev. B **70**, 174517 (2004)
- [*Tohyama 2005*] T. Tohyama *et. al.* , Phys. Rev. B **72**, 045113 (2005)
- [*Uji 1992*] S. Uji and H. Aoki, Physica C **199**, 231 (1992)
- [*Ulmke 1998*] M. Ulmke *et. al.* , cond-mat/9804188 (1998)
- [*Val'cov 2002*] V. V. Val'cov *et. al.* , JETP Letters **75**, 378 (2002)
- [*Vojta 1995*] M. Vojta, *Einfluß von Spinfluktuationen auf die Grundzustandseigenschaften von dotierten Antiferromagneten*, Diplomarbeit (Technische Universität Dresden, Dresden, 1995)
- [*Vojta 1998*] M. Vojta, *Magnetismus und Transport in dotierten Spinsystemen*, Dissertation (Technische Universität Dresden, Dresden, 1998)
- [*Wysokinski 2000*] K.I. Wysokiński, cond-mat/0002091
- [*Zhang 1988*] F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988)
- [*Zimany 1990*] G.T. Zimanyi, E. Abrahams, Phys. Rev. Lett. **64**, 2719 (1990)
- [*Zwanzig 1961*] R. Zwanzig, *Lectures in Theoretical Physics, Vol. 3* (Interscience, New York, 1961)

Danksagung

Bei der Anfertigung der vorliegenden Arbeit wurde ich auf verschiedenste Art und Weise durch viele Personen unterstützt. Ihnen allen gilt mein herzlicher Dank!!!

In erster Linie möchte ich Prof. Klaus Becker für die Betreuung dieser Arbeit danken, für seine Begeisterung für die Physik und seine Vermittlung eines wissenschaftlichen Arbeitsstils. Insbesondere danke ich ihm für seine große Geduld während der letzten Jahre, die ich leider zu oft auf eine harte Probe gestellt habe.

Sehr zu Dank verpflichtet bin ich auch Dr. Helge Rosner. Er gab nicht nur durch seine Berechnungen wesentliche Impulse für die Arbeit, sondern half auch in vielen interessanten Diskussionen bei der richtigen Bewertung und Einordnung der Resultate.

Für vielfältige Anregungen und Gesprächsrunden sowohl fachlicher als auch darüberhinausgehender Natur danke ich auch allen (ehemaligen) Mitarbeitern des Instituts für Theoretische Physik. Insbesondere seien genannt: Dr. Christoph Waidacher, Dr. Arnd Hübsch, Dr. Frank Bagehorn, Dr. Matthias Vojta, Dr. Dietmar Lehmann, Dr. Peter Zahn und Gudrun Latus. Sie hatten für meine Fragen stets ein offenes Ohr und eine kompetente Antwort.

Schließlich möchte ich auch allen denjenigen Danken, die mir in den letzten Jahren durch ihre große moralische Unterstützung geholfen haben. Neben meinen Eltern und Geschwistern seien stellvertretend Jannika Schünemann, Jeanette Hartwig, Cindy Herold, Dirk Fankhänel, Dr. Susanne Schmidt, Thomas Seidel, Hendrik und Kerstin Ammoser, Martin Schönhof, Prof. Dirk Helbing und Regine Fiedler genannt.

Diejenigen, die ich bei dieser Aufzählung vergessen habe, bitte ich um Entschuldigung für mein schlechtes Gedächtnis. Mein herzlicher Dank gilt Ihnen nichtsdesto-trotz genauso.

Diese Arbeit wurde unter der Betreuung von Herrn Prof. Dr. Klaus W. Becker am Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Dresden angefertigt.

Versicherung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Dresden, den 24. Februar 2008

Christian Kühnert

Thesen zur Dissertation

1. Die Projektionstechnik läßt sich so erweitern, daß auch Eigenschaften stark korrelierter Systeme mit diagonaler Unordnung berechnet werden können.
2. In der Verbindung $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, welche zu den elektronendotierten Hochtemperatursupraleitern gehört, wirkt die Veränderung der Ladung der Ionenrümpfe an den Dotierstellen als attraktives Potential auf die in der Kupferoxidebene befindlichen Ladungsträger.
3. Bei der lochdotierten Substanz $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ist dieser unter 2. genannte Einfluß wesentlich kleiner.
4. Der Zusammenhang zwischen der Verschiebung der on-site-Energien an den Gitterplätzen im Einband-Modell und der Verschiebung der on-site-Energien an den Kupferplätzen im Emery-Modell infolge der Dotierung ist in guter Näherung bei realistischen Energiewerten linear.
5. Im elektronendotierten Fall bleibt der Wert dieses Einflusses beim Übergang zum effektiven 1-Band-Modell in etwa gleich, im lochdotierten Fall ist die Energieverschiebung im Einband-Modell nur etwa ein Drittel so groß wie die zugehörige Verschiebung im Emery-Modell.
6. Dadurch sowie durch die unterschiedliche Struktur der Elementarzellen (Apex-Sauerstoffatome bei $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, nicht aber bei $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$) ist die von der Dotierung bewirkte Energieverschiebung bei $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ eine Größenordnung stärker als bei $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.
7. Durch die geringere Beweglichkeit der Ladungsträger der elektronendotierten Substanz entstehen, bezogen auf gleiche Dotierung, auch weniger Spinwellen als bei Lochdotierung. Dies wirkt sich auf die Stabilität der antiferromagnetischen Phase aus und könnte einen Beitrag zur Asymmetrie des Phasendiagramms liefern.