0 Einleitung

Magnetismus: Eines der ältesten physikalischen Phänomene, noch heute unverstanden? Magnetische Eigenschaften sind schon seit etwa 3000 Jahren bekannt. Schon die alten Griechen wussten von den ferromagnetischen Eigenschaften des Eisenerzes Magnetit. Mit der Erfindung des Kompasses im Mittelalter verstanden die Europäer erstmals den Magnetismus technisch einzusetzen, aber von einem grundlegendem Verständnis auf mikroskopischer Ebene war man noch weit entfernt. Die Formulierung der Magnetostatik und Elektrodynamik erlaubte schließlich die quantitative Beschreibung magnetischer Eigenschaften durch die Definition des Magnetfeldes und der Magnetisierung [1]. Doch noch Anfang des 20. Jahrhunderts wurde nachgewiesen, dass es auf der Grundlage klassischer Elektronen keine spontane Magnetisierung geben kann (Bohr-van-Leuven-Theorem). Weiterhin gab es semiklassische Modelle wie das Ising Modell [2], die mehr phänomenologisch magnetische Eigenschaften beschrieben. Erst mit der Entwicklung der Quantenmechanik war es möglich, den Ursprung des Magnetismus als Quanteneffekt zu ergründen. Es folgten Arbeiten zur exakten Lösung spezieller Probleme, wie der Quantenantiferromagnet (QAF) in einer Dimension mittels Bethe-Ansatz [3], ebenso wie die Entwicklung der Spinwellentheorie. Allerdings sind viele der Modelle zur Beschreibung des Magnetismus nicht exakt lösbar und mit verschiedenen Näherungen noch heute Gegenstand der Forschung.

Magnetismus in ausgewählten Anwendungsbeispielen Ein Meilenstein der modernen Festkörperphysik war sicherlich die Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung [4]. Heutzutage ist der technische Einsatz von Supraleitern nicht mehr wegzudenken und die Erhöhung der Sprungtemperatur über die Siedetemperatur flüssigen Stickstoffs machte die Verwendung der Supraleiter erschwinglich. Dennoch sind die Mechanismen, die zur Supraleitung in den La_2CuO_4-Verbindungen[1] (immer mit Metallionen dotiert) führen, heute noch nicht vollständig verstanden. Eine schwache, attraktive Wechselwirkung zwischen den Elektronen in einem Metall führt zum Phänomen der Supraleitung, wie schon seit der BCS-Theorie der konventionellen Supraleiter bekannt ist [8, 9]. Doch die Frage nach dem Ursprung der Wechselwirkung wird noch kontrovers diskutiert. Neben neueren Theorien, die sich mit dem Ursprung der d-Wellen Kopplung beschäftigen [10], gab es besonders in den Jahren nach 1986 viele Arbeiten zum Antiferromagnetismus in Supraleitern [11, 12, 13, 14]. Die Hochtemperatursupraleiter sind eine sehr gute Realisierung eines zweidimensionalen $S = 1/2$ Antiferromagneten mit lokalisierten Spins. Daher könnten auch Quanteneigenschaften des Magnetismus zur erforderlichen attraktiven Wechselwirkung führen [15, 16].
Magnetische Sensoren auf der Basis des GMR-Effekts [17, 18] werden vor allem in Festplatten zum Auslesen der in Form magnetischer Domänen gespeicherten Informationen benutzt. Obwohl es in den letzten Jahren Fortschritte in der Erhöhung der Speicherdichte durch Änderung der Geometrie der magnetischen Domänen gegeben hat (perpendicular recording [19]), rücken immer mehr andere Technologien in den Vordergrund (z.B. MRAM [20]). In Zukunft wird auch die Spintronik, also die auf der Manipulation von Spins beruhende Elektronik eine größere Rolle spielen. Die Untersuchung der Grundlagen des Magnetismus lohnt sich im Hinblick auf das Erschließen neuer Anwendungsbereiche magnetischer Effekte oder Materialien.

Überblick In der vorliegenden Arbeit beschränken wir uns auf die Beschreibung magnetischer Eigenschaften von Isolatoren mit lokalisierten Spins mit antiferromagnetischer Ordnung. Dazu wird im ersten Kapitel das grundlegende Modell (Heisenberg-Modell) hergeleitet und motiviert, indem der quantenmechanische Ursprung der Austauschwechselwirkung erklärt wird sowie klassische Effekte als Ursprung des Magnetismus ausgeschlossen werden. Im 2. Kapitel werden einige Konzepte zum klassischen Grundzustand von Heisenberg-Magneten eingeführt, sowie die quantenmechanische Beschreibung der Spingrundzustände wie auch elementarer Anregungen hergeleitet. Um den Kontakt zu Experimenten zu finden, definieren wir elementare Messgrößen an Heisenberg-Magneten und geben einige Literaturergebnisse derselben an. Besonderes Augenmerk legen wir dabei auf die Untergittermagnetisierung des Antiferromagneten sowie der Möglichkeit, mittels Neutronenstreuexperimenten die magnetischen Eigenschaften des Festkörpers zu bestimmen. Im dritten Kapitel wird schließlich die Spinwellentheorie und die rigorose Ab-

[1] Diese sind eine der besten Realisierung des zweidimensionalen Quantenantiferromagneten [5, 6], der in den späteren Ausführungen noch eine zentrale Rolle spielen wird. Weitere Realisierungen dieses Modellsystems sind $CuCl_2{\cdot}2N(C_5D_5$ sowie Ba_2-Cu_3O_6 [7].

bildung der Spinfreiheitsgrade auf ein System wechselwirkender Bosonen diskutiert und auf alternative feldtheoretische Formulierungen hingewiesen.

In den folgenden Kapiteln ist die Arbeit im Wesentlichen zweigeteilt:

- Kapitel 5 beschäftigt sich mit der Behandlung von Anisotropien in magnetischen Systemen, die in realen Systemen wegen geringerer Gittersymmetrie (kein kubisches Gitter) fast immer auftreten und zu speziellen Eigenschaften dieser realen Systeme führen. Einerseits kann eine starke Anisotropie die effektive Dimensionalität verringern: Liegt eine starke Wechselwirkung zwischen Nachbarspins in 2 Richtungen innerhalb einer Ebene und eine schwache Wechselwirkung zwischen den Spins verschiedener Ebenen vor, so kann man in gewissen Temperaturbereichen von einem effektiv zweidimensionalen System sprechen. In Kapitel 5 beschränken wir uns insbesondere auf eine Ising-Anisotropie und die damit verbundene Anregungslücke der Quasiteilchen, die sich auch in thermodynamische Messgrößen niederschlägt. Mittels einer bereits von Anderson vorgeschlagenen Parametrisierung, die gegenüber der konventionellen Spinwellentheorie einige Vorteile hat, gehen wir das Problem der Veränderung der Anregungslücke unter Berücksichtigung von Wechselwirkungen zwischen Spinwellen in Hinblick auf gefundene Singularitäten [21] an. Für explizite Rechnungen am Ende wird insbesondere der zweidimensionale Quantenantiferromagnet herausgestellt, da Rechnungen in 2 Dimensionen insbesondere wegen der Anwendung in den Hochtemperatursupraleitern interessant sind. Daneben spielen Quantenfluktuationen in 2 Dimensionen wegen der wenigen nächsten Nachbarn eine sehr große Rolle, ohne jedoch eine langreichweitige Ordnung (für $T = 0$) wie in einer Dimension völlig zu zerstören. In einer Analyse mit erster Ordnung Störungstheorie werden die bisherigen Ergebnisse aus [21] bestätigt, wobei sich der physikalische Ursprung auftretender Effekte übersichtlicher gestaltet.

- In den folgenden Kapiteln wird die Theorie des Magnetismus mit einem anderen Forschungsgebiet verknüpft: Die Anregungen in Heisenberg-Magneten werden Spinwellen oder Magnonen genannt und folgen der Bose-Statistik. Gerade diese Teilchen zeigen das Phänomen der Bose-Einstein-Kondensation und sind seit der experimentellen Realisierung desselben [22] ein wichtiges Forschungsgebiet. Wir werden zeigen wie man mittels antiferromagnetischer Festkörper auch ein solches Bose-Einstein-Kondensat realisieren und so spezielle Eigenschaften des wechselwirkenden Bose-Gases nachmessen kann. Auf dem Weg dahin formulieren wir in Kapitel 4 die wichtigen Modellsysteme, führen in einige Methoden der Festkörpertheorie ein und zeigen einige Eigenheiten im Aufbau der Spinwellentheorie des Heisenberg-Antiferromagneten im homogenen Magnetfeld auf. Im Kapitel 6 stellen wir zunächst die Relevanz der anschließenden Berechnung durch Vergleich mit bereits gemachten Experimenten heraus und formulieren anschließend ein vereinfachtes Modell wechselwirkender Bosonen. Unter Verwendung nicht trivialer Eigenschaften der Korrelationsfunktionen des wechselwirkenden Bose-Gase [23], die auf der Nichtanwendbarkeit der Gaußschen Näherung für das Bose-Gas in $1 < D \leq 3$ beruhen, leiten wir die Form der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen her. Experimentell überprüfbare Eigenschaften manifestieren sich schließlich im dynamischen Strukturfaktor $S_{\|}(\boldsymbol{k}, \omega)$, der mittels Neutronenstreuung gemessen werden kann. Am Ende des 6. Kapitels werden noch die Grenzen der Anwendbarkeit der Theorie diskutiert. Das schon sehr vereinfachte Modell in Kapitel 6 [24] enthält noch einige freie Parameter (Renormierungsfaktoren) und bietet daher nur den Ausgangspunkt für quantitative Vorhersagen. Im Kapitel 7 werden diese Vereinfachungen aufgegeben und wir berechnen entsprechende Größen approximativ durch eine Entwicklung in der Bosonendichte sowie einen Mean-Field-Ansatz bei $T = 0$. Dabei stellt sich durch Vergleich mit Literaturergebnissen für Standardgrößen aus Kapitel 2 die Beschränkung der Theorie auf kleine Bosonendichte heraus, wie schon in [24] diskutiert. Trotzdem ergeben sich Ergebnisse für den Fall starker Magnetfelder, die mit konventioneller Spinwellentheorie in der Formulierung mit Magonenerzeugern und -Vernichtern nicht berechnet werden können.

Im Appendix geben wir schließlich einige wichtige Konzepte der Festkörperphysik, der Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik und der Theorie der Renormierungsgruppe wieder und führen einige etwas technischere Rechnungen explizit aus.

1 Austauschwechselwirkung und Heisenberg-Modell

1.1 Spinalgebra

Die Spinoperatoren sind durch die Spinalgebra

$$\left[\hat{S}^k, \hat{S}^l\right] = \epsilon_{klm}\hat{S}_i^m \qquad k,l,m \in \{x,y,z\} \tag{1.1}$$

definiert. Elementare Rechnungen mit den Leiteroperatoren an den Gitterplätzen i

$$\begin{array}{l} \hat{S}_i^y = \frac{1}{2i}\left(\hat{S}_i^+ - \hat{S}_i^-\right) \\ \hat{S}_i^x = \frac{1}{2}\left(\hat{S}_i^+ + \hat{S}_i^-\right) \end{array} \quad \Leftrightarrow \hat{S}_i^{\pm} = \hat{S}_i^x \pm \hat{S}_j^y \tag{1.2}$$

ergeben folgende zu (1.1) äquivalente Vertauschungsrelationen

$$\left[\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^-\right] = 2\delta_{ij}\hat{S}_i^z \tag{1.3a}$$

$$\left[\hat{S}_i^z, \hat{S}_j^{\pm}\right] = \pm\delta_{ij}\hat{S}_i^{\pm}. \tag{1.3b}$$

Ein gemeinsames System von Eigenzuständen zu Spinoperatoren kann nur zum Quadrat des Spinoperators $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ und zu einer Komponente $\hat{S}^z$ gefunden werden [25]. Die $2S+1$ Eigenzustände $|S, S^z\rangle$ für festen Gesamtspin S (an festem Gitterplatz i) bilden den Hilbertraum und genügen den Eigenwertgleichungen

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2\,|S,S^z\rangle = S(S+1)\,|S,S^z\rangle \tag{1.4a}$$

$$\hat{S}^z\,|S,S^z\rangle = S^z\,|S,S^z\rangle \tag{1.4b}$$

wobei die z-Komponente in ganzzahligem Abstand von $-S$ bis S läuft.

1.2 Magnetische Dipol-Dipol Wechselwirkungen

Die Anwesenheit des magnetischen Dipolmoments μ eines Spins kann in der klassischen Elektrodynamik als ein um eine Fläche A kreisender Strom I gesehen werden mit $\mu = IA/c$. Im Grenzwert $A \to 0\ ,\ I \to \infty$ verschwinden alle höheren Multiplomomente und wir erhalten einen reinen Dipol. Mit der relativistischen Quantenmechanik taucht jedoch der Spin eines Elektrons als intrinsische Eigenschaft des Elektrons auf, genauer: aus den Symmetrien der Gleichung ergeben sich 2 Casimir-Operatoren (Masse und Spin), die invariante Messgrößen sind. Das magnetische Moment von freien Elektronen mit Gesamtspin S ist

$$\mu = g\mu_B S\ , \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \quad \text{Bohrsches Magneton} \tag{1.5}$$

mit dem Landé g-Faktor $g \approx 2.00231934$. Der Spin $\boldsymbol{S}$ wie auch das resultierende magnetische Moment sind vektorielle Größen, deren Komponenten nicht gleichzeitig messbar sind, da die entsprechenden Operatoren nicht kommutieren (1.1). Während der Hilbertraum zum Spinoperator diskrete Zustände enthält (1.4), spielt die Quantisierung für $S \to \infty$ keine Rolle mehr und man kann den Spin in z-Richtung als $S^z = S\cos\vartheta$ mit dem Maß $d\vartheta\sin\vartheta$ darstellen.
Unter dem Deckmantel der vereinfachten Darstellung des kollektiven Magnetismus als Ausrichtung der Spins scheinen die magnetostatischen Dipol-Wechselwirkungen der Spins der Ursprung des Magnetismus zu sein. Dazu tragen auch die Erfahrungen mit die magnetischen Wechselwirkungen von makroskopischen Ferromagneten im Alltag bei. Jedoch ist der physikalische Ursprung des Magnetismus quantenmechaninscher Natur, da die klassischen Effekte wie die Dipol-Dipol-Wechselwirkung viel zu schwach sind. Im Einzelfall können klassische magnetostatische Effekte nur zu Anisotropien bei endlichen Festkörpern (Formanisotropie) führen und so die makroskopischen Eigenschaften beeinflussen, jedoch nicht die wesentlichen Eigenschaften verändern.
Für unsere elementare klassische Betrachtung benutzen wir das Wechselwirkungspotential zweier Dipole mit den Dipolmomenten μ_1 und μ_2 im Abstand $\boldsymbol{R}$

$$V = \frac{\mu_1\cdot\mu_2 - 3(\boldsymbol{e}_r\cdot\mu_1)(\boldsymbol{e}_r\cdot\mu_2)}{R^3}\ , \quad \boldsymbol{e}_r = \frac{\boldsymbol{R}}{R}. \tag{1.6}$$

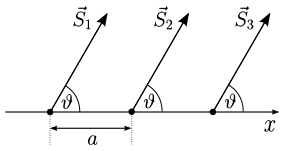

Abbildung 1: Geometrie zur Abschätzung der klassischen Grundzustandsenergie des Ferromagneten unter Annahme von Dipol-Dipol-Wechselwirkungen. Zur Minimierung der Energie bleibt nur noch der Winkel ϑ, den die Spins auf der Kette mit den Verbindungsvektoren einschließen.

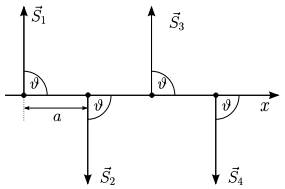

Abbildung 2: Geometrie zur Abschätzung der klassischen Grundzustandsenergie des Antiferromagneten mit Dipol-Dipol-Wechselwirkung

Dieses Potential fällt mit $\frac{1}{R^3}$ ab, ist also schwach, aber langreichweitig und hat das Maximum $V_{\max} = \frac{2|\mu_1||\mu_2|}{R^3}$ und das Minimum $V_{\min} = -V_{\max}$. Zur Abschätzung der Energiebeiträge betrachten wir hier den klassischen ferromagnetischen Grundzustand, d.h. alle Spins sind parallel. Für Systeme in einer Dimension gibt es nun bei Fixierung der Ebene, in der alle Spins liegen, noch einen Freiheitsgrad, den Einstellwinkel ϑ bezüglich der Verbindungsvektoren (siehe Abbildung 1). Damit vereinfacht sich das Wechselwirkungspotential zwischen den auf der Kette aufgereihten Spins i und j zu

$$V_{ij} = \frac{1}{R_{ij}^3}(1 - 3\cos^2\vartheta)\mu_i\mu_j. \tag{1.7}$$

$R_{ij} = a|i-j|$ bezeichnet den Abstand der Gitterplätze i und j und μ_i bzw. μ_j den Betrag der Dipolmomente. Für den kollektiven Winkel $\vartheta = 0$ bzw. $\vartheta = \pi$ wird für jedes Paar von Gitterplätzen das Potential (1.7) minimal, so dass dann die Grundzustandsenergie als Summe über alle Potentiale zu berechnen ist

$$E_0 = \frac{1}{2}\sum_{ij} V_{ij}. \tag{1.8}$$

Setzt man den Abstand in (1.7) ein und spaltet die Summe in eine Summe über alle Gitterplätze und eine Differenzsumme mit Index $k = |i-j|$ auf, so ergibt sich für gleiche Spins an allen Gitterplätzen

$$E_0^{\mathrm{FM}} = \frac{1}{2}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\sum_{i}\left(-2\frac{\mu^2}{a^3}\right)\frac{1}{k^3} = -\frac{N}{2}\frac{2(g\mu_B S)^2}{a^3}2\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^3}. \tag{1.9}$$

Benutzen wir den Wert der Riemannschen Zeta-Funktion

$$\zeta(x) = \sum_k \frac{1}{k^x} \qquad \zeta(3) \approx 1.2 \tag{1.10}$$

und setzen typische Werte für den Gitterabstand von $a \approx 2 - 3$Å sowie einen Spin von $\mathcal{O}(1)$ ein, so ergibt sich eine Energie pro Gitterplatz, deren numerischer Wert etwa der Temperatur $T_D \approx 0.3K$ entspricht. (Fast keine Beiträge von übernächsten Nachbar-Wechselwirkungen gehen in die Summe ein.). Das Ergebnis ändert sich bei Betrachtung höherer Dimensionen nicht wesentlich [26]. Damit trägt die Dipol-Dipol-Wechselwirkung nicht zu kollektiven magnetischen Phänomenen wie Ferromagnetismus bei, da die auftretenden Energien viel kleiner als die typischen Temperaturen sind, bei denen ein Ferromagnet thermodynamisch stabil ist. Mit anderen Worten: Thermische Fluktuationen würden bei reiner Dipol-Dipol-Wechselwirkung den ferromagnetischen Zustand schon weit unterhalb der Curie-Temperatur $T_C \approx 1000K$ zerstören. Für den Antiferromagneten, der im klassischen Bild im Néel-Grundzustand vorliegt (siehe Abbildung 2), ändert sich die Berechnung nur wenig. Da wir von einem Zustand mit antiparallelen Spins in äquidistanten Abständen ausgehen, ist die Energie (1.7) minimal, wenn sich die

Spins abwechselnd in den Winkeln $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ und $\vartheta = -\frac{\pi}{2}$ ausrichten. Dann ist die Grundzustandsenergie diese Zustandes

$$E_0^{\mathrm{AFM}} = \frac{1}{2}\sum_{ij} V_{ij} = \sum_i \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(g\mu_B S)^2}{a^3}(-1)^k \frac{1}{k^3} = -N\frac{(g\mu_B S)^2}{a^3}\frac{3}{4}\zeta(3) \tag{1.11}$$

in der gleichen Größenordnung wie für den ferromagnetischen Fall. Somit dürfte man bei Zimmertemperatur auch keinen antiferromagnetischen Zustand beobachten können. Weiterhin liegt die Energie des Ferromagneten (1.9) niedriger, so dass auch beim Abkühlen eines Festkörpers auch unterhalb von $T \approx 0.3K$ niemals ein antiferromagnetischer Zustand auftreten dürfte. Für $D > 1$ sind die klassischen Ergebnisse schwieriger zu berechnen, da die Summen komplizierter auszuwerten sind [26, 27], aber sind ähnlich schlecht mit experimentellen Ergebnissen vereinbar. Offensichtlich ist für die magnetische Ordnung ein viel größerer Energiebeitrag verantwortlich, der aus den quantenmechanischen Eigenschaften der Elektronen als Fermionen herrührt.

1.3 Austauschwechselwirkung

1.3.1 Direkter Austausch

Wie wir gesehen hatten, kann die klassische Dipol-Dipol-Wechselwirkung nicht für kollektive magnetische Phänomene verantwortlich sein, da diese im Ortsraum zu schnell abfällt und somit zu kleine Energiebeiträge liefert. Vielmehr ist die so genannte Austauschwechselwirkung zwischen benachbarten Spins der Ursprung des kollektiven Magnetismus in Isolatoren. Wir zeigen gleich wie die Austauschwechselwirkung aus dem Zusammenspiel von Elektron-Elektron-Wechselwirkung (Coulomb-Wechselwirkung) und dem Pauli-Prinzip entsteht. In der folgenden Ableitung lösen wir dazu das wechselwirkende 2-Elektronen-Problem approximativ.
Unser Modellsystem besteht aus 2 Elektronen im Feld von 2 raumfesten Kernen (Born-Oppenheimer-Näherung) mit positiver Punktladung Ze. Wir vernachlässigen weiterhin die Spin-Bahn-Kopplung, was bedeutet, dass die resultierenden Wellenfunktionen separabel in Ortswellenfunktion und Spinfunktion ist. Weiterhin sei die Elektron-Elektron-Wechselwirkung klein gegen die Elektron-Kern-Wechselwirkung und als Störung aufzufassen. Die Einelektronenzustände lassen sich in einem unendlichdimensionalen Hilbertraum klassifizieren. Wir nehmen aber an, dass nur die 2 Zustände mit den niedrigsten Energien merklich beitragen (großer Energieabstand zu den höher angeregten Zuständen). Der Hamiltonoperator im Ortsraum ist durch

$$H = H_0 + H_1 \tag{1.12a}$$
$$H_0 = H_{01} + H_{02} \tag{1.12b}$$
$$H_1 = \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \tag{1.12c}$$

gegeben. Bekannt seien weiterhin die Lösungen der 1-Teilchen Schrödinger-Gleichungen an den Kernen 1 und 2

$$H_{01}\phi_a(\boldsymbol{r}_1) = E_a\phi_a(\boldsymbol{r}_1) \tag{1.13a}$$
$$H_{02}\phi_b(\boldsymbol{r}_2) = E_b\phi_b(\boldsymbol{r}_2). \tag{1.13b}$$

Für eine übersichtlichere Störungstheorie seien die Zustände zu den Energien E_a am Kern 1 und E_b am Kern 2 nicht entartet und orthogonal. Um nun das Pauli-Prinzip ins Spiel zu bringen, müssen wir die Mehrelektronenzustände mittels Slaterdeterminante als total antisymmetrische Zustände aus den Einelektronenzuständen zusammensetzen. Mit dem Spinanteil $\chi(\sigma_i)$ für das i-te Elektron gilt nun für die vier möglichen Zweiteilchenwellenfunktionen

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \phi_a(\boldsymbol{r}_1)\chi(\sigma_1) & \phi_a(\boldsymbol{r}_2)\chi(\sigma_2) \\ \phi_b(\boldsymbol{r}_1)\chi(\sigma_1) & \phi_b(\boldsymbol{r}_2)\chi(\sigma_2) \end{pmatrix} = \langle \boldsymbol{r}_1\boldsymbol{r}_2\, , \sigma_1\sigma_2 \,|\Psi\rangle\,. \tag{1.14}$$

Die Zustände $|\sigma_1\sigma_2\rangle$ in denen das erste Elektron den Spin $\sigma_1 \in \{\uparrow, \downarrow\}$ und das zweite Elektron den Spin σ_2 trägt werden nun durchnummeriert

$$|\Psi_1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \tag{1.15a}$$
$$|\Psi_2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle \tag{1.15b}$$
$$|\Psi_3\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle \tag{1.15c}$$
$$|\Psi_4\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \tag{1.15d}$$

und der Hamilton-Operator als 4×4 Matrix

$$H = \begin{pmatrix} E_0 - K_{ab} - J_{ab} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_0 + K_{ab} & -J_{ab} & 0 \\ 0 & -J_{ab} & E_0 + K_{ab} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_0 + K_{ab} - J_{ab} \end{pmatrix} \tag{1.16}$$

mit den Abkürzungen

$$E_0 = E_a + E_b \tag{1.17}$$

für die Energie des ungestörten Problems sowie dem Coulomb-Integral

$$K_{ab} = \int d^3\boldsymbol{r}_1 \int d^3 r_2 \, |\phi_a(\boldsymbol{r}_1)|^2 \, \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \, |\phi_b(\boldsymbol{r}_2)|^2 \,, \tag{1.18}$$

das auch für nicht antisymmetrische (einfache Produktzustände) auftreten würde und letztendlich nur zu einer Engergieverschiebung führt. Das wichtige Austauschintegral

$$J_{ab} = \int d^3\boldsymbol{r}_1 \int d^3\boldsymbol{r}_2 \phi_a^*(\boldsymbol{r}_1)\phi_b^*(\boldsymbol{r}_2) \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \phi_a(\boldsymbol{r}_2)\phi_b(\boldsymbol{r}_2) \tag{1.19}$$

beschreibt schließlich gerade die Energiekorrektur, die entsteht wenn die beiden ununterscheidbaren Elektronen ihre Rolle tauschen. Diagonalisiert man die Matrix (1.16) so erhält man einen Singulett-Zustand

$$|\Psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Psi_2\rangle - |\Psi_3\rangle \right) \tag{1.20}$$

mit dem Eigenwert

$$E_s = E_0 + K_{ab} + J_{ab} \tag{1.21}$$

sowie drei energieentartete Triplett-Zustände

$$\left|\Psi_t^{(1)}\right\rangle = |\Psi_1\rangle = |1, 1\rangle \tag{1.22a}$$
$$\left|\Psi_t^{(2)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\Psi_2\rangle + |\Psi_3\rangle \right) = |1, 0\rangle \tag{1.22b}$$
$$\left|\Psi_t^{(3)}\right\rangle = |\Psi_4\rangle = |1, -1\rangle \tag{1.22c}$$

mit den Eigenwerten

$$E_t = E_0 + K_{ab} - J_{ab} \tag{1.23}$$

so dass unser vereinfachtes Modell durch

$$H \, |\Psi_s\rangle = E_s \, |\Psi_s\rangle \tag{1.24}$$
$$H \left|\Psi_t^{(i)}\right\rangle = E_t \left|\Psi_t^{(i)}\right\rangle \quad , \quad i \in \{1, 2, 3\} \tag{1.25}$$

gelöst wird. Die gefundenen Zustände sind aber auch gerade die Zustände, die man bei der Kopplung zweier Drehimpulse bzw. Spins erhält. Der Zustand $|S, S^z\rangle$ bezeichnet einen Zustand mit Gesamtspin S und z-Komponente $-S \leq S^z \leq S$. Betrachtet man nun den Hamilton-Operator

$$H = \frac{1}{4} \left(E_s + E_t \right) - \left(E_s - E_t \right) \hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2 \tag{1.26}$$

mit den Spinoperatoren S_i gemäß (1.1), so stellt man fest, dass dieser die gleichen Eigenwerte hat und somit äquivalent zu unserem vereinfachten Hamilton-Operator (1.16) ist. Um dies zu sehen müssen wir 2 $S = \frac{1}{2}$ Spins zu den oben genannten Singulett und Triplett Zuständen koppeln, die dann Eigenzustände zur Menge der Operatoren $\left\{\boldsymbol{S}^2, S^z, \boldsymbol{S}_1^2, \boldsymbol{S}_2^2\right\}$ sind

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2 \left|S, S^z\right\rangle = S(S+1) \left|S, S^z\right\rangle \quad S = 0, 1 \tag{1.27a}$$

$$\hat{S}^z \left|S, S^z\right\rangle = S^z \left|S, S^z\right\rangle \tag{1.27b}$$

$$\hat{\boldsymbol{S}}_1^2 \left|S, S^z\right\rangle = \hat{\boldsymbol{S}}_2^2 \left|S, S^z\right\rangle = \frac{3}{4} \left|S, S^z\right\rangle . \tag{1.27c}$$

Mit der Operatorgleichung

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{\boldsymbol{S}}_1 + \hat{\boldsymbol{S}}_2 \tag{1.28}$$

können wir sofort die Eigenwerte des Skalarproduktoperators

$$\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2 = \frac{1}{2} \left(\hat{\boldsymbol{S}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}_1^2 - \hat{\boldsymbol{S}}_2^2 \right) \tag{1.29}$$

bestimmen

$$\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2 \left|1, S^z\right\rangle = \frac{1}{4} \left|1, S^z\right\rangle \tag{1.30a}$$

$$\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2 \left|0, 0\right\rangle = -\frac{3}{4} \left|0, 0\right\rangle . \tag{1.30b}$$

Mit der Definition $E = \frac{1}{4}(E_s + 3E_t)$ ergibt sich dann der Heisenberg-Hamiltonian

$$H = E - J_{ab} \hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2. \tag{1.31}$$

Explizite Berechnungen der Kopplungskonstante J_{ab} können nur durch Auswertung des Integrals (1.19) bei bekannten Atomeigenfunktionen erfolgen, sind aber weniger genau, da die Annahme orthogonaler Zustände das Ergebnis quantitativ verändert (H_1 aus (1.12a) koppelt die Orbitalzustände). Elektronen in realen Festkörpern sind im allgemeinen an verschiedenen Gitterplätzen lokalisiert, so dass man besser zur Entwicklung der Wellenfunktion in Wannier-Wellenfunktionen (Eigenfunktionen in Ortsdarstellung bei periodischem Potential) übergeht. Der Hamiltonian (1.31) lässt sich für mehr als 2 Elektronen zum Austausch-Hamiltonian nach Heisenberg

$$H_{\text{ex}} = -\frac{1}{2} \sum_{ijnn'} J_{nn'ij} \left(\frac{1}{4} + \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j \right) \tag{1.32}$$

verallgemeinern wobei $\hat{\boldsymbol{S}}_i$ und $\hat{\boldsymbol{S}}_j$ die Spinoperatoren an den Gitterplätzen i und j bezeichnen und $J_{nn'ij}$ die Austauschkonstante durch Wechselwirkung des Orbitalzustandes n am Gitterplatz i mit dem Zustand n' am Gitterplatz j darstellt. Wegen der Unabhängigkeit der Summationen lässt sich auch

$$J_{ij} = -\sum_{nn'} J_{nn'ij} \tag{1.33}$$

definieren und der Hamiltonian ohne Grundzustandsenergie schreiben als

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j.} \tag{1.34}$$

Gemäß unseres Modells hängen die Kopplungen J_{ij} nur von den Austauschintegralen ab, die aber für weit voneinander entfernte Elektronen sehr klein sind. Daher koppeln nur die Spins in unmittelbarer Nähe merklich. In den weiteren Ausführungen beschränken wir uns sogar auf die Kopplung nächster Nachbarn (2.6).
Die Werte der Kopplungskonstanten hängen stark von der Natur der Mehrelektronenzustände ab, so

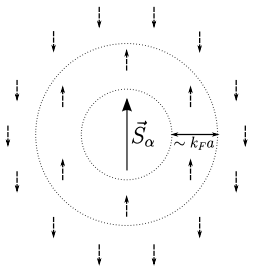

Abbildung 3: Veranschaulichung der RKKY-Wechselwirkung: Ein lokalisierter Spin (großer Pfeil) erzeugt eine Oszillation der Spindichte der Leitungselektronen (gestrichelte Pfeile) mit der Periode $k_F a$; diese wechselwirkt mit benachbarten Spins.

dass sie sowohl positiv als auch negativ sein können (für gleiche Orbitalzustände an benachbarten Atomen kann sich sogar das Vorzeichen des Austauschintegrals in Abhängigkeit vom Abstand ändern). Für $J_{ij} < 0$ für nächste Nachbarn stellt sich wohl jeweils der Zustand mit maximalem Gesamtspin ein (Ferromagnet). Der interessantere Fall ist jedoch $J_{ij} > 0$ für nächste Nachbarn, da sich hier die Spins im klassischen Grundzustand antiparallel ausrichten,[2] aber die konkreten physikalischen Eigenschaften des Gesamtsystems nicht vom klassischen Grundzustand herrühren, sondern vielmehr quantenmechanischer Natur sind.

1.3.2 Indirekter Austausch

Superaustausch-Wechselwirkung Beim Superaustausch, dessen Name von der im Vergleich zum direkten Austauschmechanismus großen Stärke der Wechselwirkung bei großen Abständen motiviert ist, wird die Wechselwirkung zwischen 2 magnetischen Ionen durch ein dazwischenliegendes nicht-magnetisches Ion, meist O^{2-}, vermittelt. Die Elektronenzustände beider magnetischer Ionen überlappen mit denen des nicht magnetischen Ions, daher ist es auch notwendig 2. Ordnung Strörungstheore zur Bestimmung der Wechselwirkung anzuwenden. Der Superaustausch kann entweder unter expliziter Berücksichtigung von Orbitalgeometrien hergeleitet werden [28, 29] oder ist implizit im Hubbardmodell

$$H = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} \tag{1.35}$$

enthalten.[3] Analysen des Modells bei halber Füllung unter der Annahme des Hüpfterms als Störung [30] ergibt den effektiven $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg-Hamiltonian

$$H_{\text{eff}} = E_0 + \sum_{ij} J_{ij} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j \tag{1.36}$$

mit der Kopplung $J_{ij} = \frac{4t_{ij}t_{ji}}{U}$. Für nächste-Nachbarn Hüpfen ergibt sich dann der Heisenberg-Hamiltonian mit Nächste-Nachbar Wechselwirkung (2.6). Wichtige Materialien mit antiferromagnetischer Kopplung durch Superaustausch sind das schon lange bekannte MnO [28] sowie La_2CuO_4 [5], was erst mit der Entdeckung der Hochtemperatursupraleiter in den Fokus rückte.

RKKY-Austauschwechselwirkung Die Rudermann - Kittel - Kasuya - Yosida - Wechselwirkung (RKKY-WW) soll hier nur kurz Erwähnung finden, da im Falle dieser Wechselwirkung auch lokalisierte Spins vorliegen, die eine gewisse Ähnlichkeit mit den lokalisierten Spins in magnetischen Isolatoren haben. Die RKKY-WW tritt vor allem in Metallen mit lokalisierten 4f-Elektronen auf, die jedoch keine Austauschwechselwirkung mit den Nachbarspins spüren. Vielmehr wird über die Leitungselektronen eine indirekte Austauschwechselwirkung vermittelt. Im einfachen Bild haben wir einen lokalisierten Spin,

[2] Hier werden nur Gittertypen behandelt, die sich eindeutig in gekoppelte Untergitter aufteilen lassen. In Festkörpern, für die das nicht möglich ist, lässt sich kein eindeutiger klassischer Grundzustand bestimmen, man spricht dann von Frustration.

[3] In der üblichen Notation besteht das Hubbardmodell aus einem Energiebeitrag zur potentiellen Energie U und einem kinetischen (Hüpf-)Term mit der Stärke t_{ij}, die das Hüpfen vom Gitterplatz i zum Gitterplatz j beschreibt. Die Operatoren $n_{i\sigma} = c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma}$ erfüllen fermionische Antivertauschungsrelationen $\{c_{i\sigma}, c^\dagger_{j\sigma'}\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma,\sigma'}$

der eine oszillierende Spinpolarisation der Leitungselektronen induziert (siehe Abbildung 3), die dann wieder mit dem nächsten Spin wechselwirkt und je nach Abstand eine ferromagnetische oder antiferromagnetische Kopplung bewirkt. Mit der Modellannahme einer Kontakt-Austausch-Wechselwirkung der Leitungselektronen mit dem lokalen Moment können wir ein effektives Feld der Leitungselektronen einführen und erhalten mittels der Lineare-Antwort-Theorie des Elektronengases einen effektiven Hamiltonian für die Wechselwirkung der lokalisierten Spins an den Gitterplätzen α und β mit dem Abstand $\boldsymbol{r}$

$$H_{RKKY} = -J^2 \frac{1}{V} \sum_{ij} \sum_{\boldsymbol{q}} \chi(\boldsymbol{q}) e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)} \hat{\boldsymbol{S}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_j. \tag{1.37}$$

Hierbei bezeichnet $\chi(\boldsymbol{q})$ die magnetische Suszeptibilität der Leitungselektronen, die für freie Elektronen auch als Lindhard-Funktion (in D=3) bekannt ist und J die Stärke der Kontakt-Austauschwechselwirkung zwischen den lokalisierten Spins und den Leitungselektronen. Anhand der Formel (1.37) erkennt man, dass das Vorzeichen der effektiven Kopplung Oszillationen mit dem Abstand ausführt, die den Friedel-Oszillationen ähnlich und gleichem physikalischen Ursprungs sind.

Doppelaustausch Der mit dem Auftreten des CMR-Effekts [31, 32, 33, 34, 35] (Collosal Magnetoresistance)[4] in Verbindung gebrachte Doppelaustausch beruht im wesentlichen auf dem Hüpfmechanismus zweier Elektronen zwischen magnetischen Ionen unterschiedlicher Valenz und einem vermittelnden nichtmagnetischen Ion. Da die Wechselwirkung ferromagnetischer Art ist, wird hier nicht weiter darauf eingegangen. Die technische Anwendung des CMR zum Auslesen magnetischer Domänen in Speichermedien sei allerdings noch angemerkt.[5]

1.4 Magnetismus lokalisierter Elektronen und Hundsche Regeln

In den nachfolgenden Kapiteln werden die Effekte diskutiert, die aufgrund von kollektiven Eigenschaften lokalisierter (Elektronen-)Spins in einem Festkörper auftreten. Während freie Elektronen den Spin $S = 1/2$ tragen, treten im Festkörper lokalisierte Gesamtspins der Elektronen eines Atoms oder Moleküls auf.
Die einfache Hartree-Fock-Näherung [38, 26] zur selbstkonsistenten Berechnung der Mehrelektronenzustände an Atomen scheitert an dem Vorhandensein nichtlokaler Wechselwirkungen. Den korrekten Elektronenzustand, charakterisiert durch den Gesamtspin und den Gesamtdrehimpuls, kann man mittels der Hundschen Regeln durch Betrachtung der Elektronen am Atom ermitteln. Gemäß der Näherung der wasserstoffähnlichen Atome mit nur einem Elektron haben alle Elektronenzustände zu gleicher Hauptquantenzahl die gleiche Energie. Bei Mehrelektronenzuständen bleibt dies insofern weiterhin gültig, als dass die Energieabstände von Zuständen mit unterschiedlichen Hauptquantenzahlen groß bleiben und somit unter Berücksichtigung der Antisymmetrie der Elektronenwellenfunktion (Pauli-Prinzip) die inneren Schalen (mit kleiner Hauptquantenzahl n) zunächst aufgefüllt werden. Vollständig gefüllte Schalen tragen gemäß der Drehimpulsaddition weder einen Gesamtspin noch einen Bahndrehimpuls. Diejenigen Elektronen in einer nicht vollständig gefüllten Schale bilden nun ein Mehrelektronensystem, das verschiedene Zustände einnehmen kann, die man bei Vorhandensein von Russel-Saunders-Kopplung durch den Gesamtspin S, den Gesamtbahndrehimpuls L und den Gesamtdrehimpuls J charakterisieren kann. Der konkrete Grundzustand $|S, L, J\rangle$ wird durch die folgenden Hundschen Regeln festgelegt [35].

1. Die Elektronen besetzen die $2(2l + 1)$ Einelektronenzustände der Unterschale zu festem Bahndrehimpuls l derart, dass der Gesamtspin $S = \sum_i S_i^z,\ S_i^z = \pm 1/2$ maximiert ist. Die Bevorzugung verschiedener Ortszustände ist eine direkte Folge des Pauli-Prinzips und der Coulomb-Abstoßung.

2. Ist der Zustand nicht eindeutig bestimmt, so stellt sich der Grundzustand derart ein, dass der Gesamtbahndrehimpuls $L = \sum_i l_i$ maximiert ist.

3. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung favorisiert schließlich den Gesamtdrehimpuls $J = S + L$ bei mehr als halb gefüllten Schalen und $J = |S - L|$ bei weniger als halb gefüllten Schalen.

[4] Der Widerstand eines Materials ändert sich beim Anlegen eines Magnetfeldes um Größenordnungen.
[5] Ein ähnlicher Effekt, der GMR (Gigant Magnetoresistance) [17, 18, 35], wird bereits seit langem in handelsüblichen Festplatten verwendet [36]. Der EMR-Effekt (Extraordinary Magnetoresistance) ist erst seit kurzem bekannt [37]

Im Prinzip lassen sich diese Regeln durch Störungstheorie bestätigen, indem man zu fester Elektronenzahl Produktwellenfunktionen aus den Einelektronenwellenfunktionen bildet, die Eigenzustände zum Potential des Kerns und der inneren Elektronen sind. Berücksichtigt man nun die Matrixelemente der Elektron-Elektron-Wechselwirkung und diagonalisiert den entstehenden Hamiltonian, so sind die Grundzustände gerade durch die obigen Regeln festgelegt. (Für eine explizite Ableitung der Regeln anhand aller vorkommenden Konfigurationen siehe [26].)
Die obigen Überlegungen an freien Atomen bzw. Ionen gelten im Wesentlichen auch für Atome in Festkörpern. Diese tragen dann im Falle von Isolatoren (Elektronen sind nicht beweglich) einen Gesamtspin, der mit dem Gesamtspin benachbarter Atome oder Ionen wechselwirken kann.

1.5 Symmetrien des Heisenberg Modells

ohne Magnetfeld: Der reine Heisenberg-Hamiltonian (1.34) hat eine $SU(2)$ Symmetrie, die als isomorph zur $SO(3)$-Rotationsinvarianz betrachtet werden kann, das heißt er ändert sich bei einer globalen Rotation mit dem Winkel ϵ um eine Achse $\boldsymbol{n}$, die in der Quantenmechanik durch den Operator

$$\hat{U}(\boldsymbol{n}, \epsilon) = e^{i\epsilon \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \tag{1.38}$$

beschrieben wird, nicht [9]. Hierbei bezeichnet $\boldsymbol{J} = \sum_i \boldsymbol{S}_i$ den Gesamtdrehimpuls des Systems. Die Rotationsinvarianz

$$\hat{H} = \hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U} \tag{1.39}$$

sieht man am einfachsten durch Ausnutzung der Eigenschaft der Spinoperatoren

$$\left[S_i^\alpha, J^\beta\right] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma}S_i^\gamma \tag{1.40}$$

als Vektoroperatoren. Entwicklung des Drehoperators für infinitesimale Drehungen um den Winkel ϵ ergibt dann die Transformation der α-Komponente des Spinoperators

$$\begin{aligned} U^{-1}(\boldsymbol{n}, \epsilon)S_i^\alpha U(\boldsymbol{n}, \epsilon) &\approx S_i^\alpha + i\epsilon(-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}S_i^\alpha + S_i^\alpha \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}) \\ &= S_i^\alpha - \epsilon\sum_{\beta\gamma} n^\beta \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_i^\gamma = \sum_\beta R_{\alpha\beta}(\boldsymbol{n}, \epsilon)\boldsymbol{S}_i^\beta \end{aligned} \tag{1.41}$$

mit der Transformationsmatrix

$$R_{\alpha\beta}(\boldsymbol{n}, \epsilon) = \delta_{\alpha\beta} + \epsilon\sum_\gamma n^\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \tag{1.42}$$

die infinitesimale Drehungen um die Achse $\boldsymbol{n}$ beschreibt. Für endliche Winkel ist $R_{\alpha\beta}(\boldsymbol{n}, \alpha)$ dann die entsprechende $SO(3)$-Rotationsmatrix, die ja gerade das Skalarprodukt invariant lässt. Daraus folgt nun die Rotationsinvarianz des gesamten Hamiltonian, der nur eine Summe von Spin-Skalarprodukten ist.

im Magnetfeld: Der Hamiltonian

$$\boxed{H = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j - h\sum_i S_i^z} \tag{1.43}$$

weicht von (1.34) gerade um einen Magnetfeldterm ab und ist so nicht mehr vollständig rotationsinvariant, da das Magnetfeld (hier in z-Richtung gewählt) von außen vorgegeben ist. Lediglich Rotationen um die Magnetfeldachse $\boldsymbol{n} \parallel \boldsymbol{h}$ lassen den Hamiltonian invariant, was letztendlich einer $U(1)$-Symmetrie entspricht. Wie sich noch zeigen wird, hängt die Symmetrie des quantenmechanischen Grundzustandes von der Wahl der Austauschwechselwirkung (ferromagnetisch oder antiferromagnetisch) und im antiferromagnetischen Fall noch von der Stärke des Magnetfeldes ab (spontane Symmetriebrechung) (siehe Abbildungen 16 und 17).

Brechung der Symmetrie durch Gitterstruktur: In realen Festkörpersystemen sind die Matrixelemente der Austauschwechselwirkung im Ortsraum oft nicht isotrop, so dass man das allgemeine Spinmodell

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{ij}\sum_{\alpha\beta} J_{ij,\alpha\beta} S_i^\alpha S_i^\beta \tag{1.44}$$

benutzen muss in dem der Austauschtensor

$$J_{ij,\alpha\beta} \quad \text{mit} \quad \alpha,\beta \in \{x,y,z\} \tag{1.45}$$

vorkommt. Damit ist die Rotationssymmetrie explizit gebrochen; übrig bleibt meist eine Rotationssymmetrie um eine Achse (uniaxiale Anisotropie), falls kein Magnetfeld anliegt. Je nach Art und Stärke der Anisotropie unterscheidet man folgende Spezialfälle

1. Ising-Modell: $J_{zz} = J$ alle anderen Matrixelemente verschwinden
   Im diesem einfachsten Modell magnetischer Systeme wird nur die z-Komponente des Spinoperators berücksichtigt.
   $$H_{\text{Ising}} = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i h S_i^z \tag{1.46}$$
   Da sich die Zustände eines Spinmodells nach dem Gesamtspin sowie dessen Projektion auf die z-Achse klassifizieren lassen sind die Eigenzustände des Modells explizit bekannt und ergeben so ein semiklassisches Spinmodell, das nur durch diskrete Quantenzahlen beschrieben werden kann. Seit der Beschreibung des Ising-Modells [2] wurden damit einige magnetische Phänomene beschrieben. Wegen der starken Vereinfachung auf die z-Komponente des Spins, sind physikalische existieren Realisierungen dieses Spinmodells nur in stark anisotropen Materialien wie z.B. $DyPO_4$ oder $CoCs_3Cl$. Das Modell hat dennoch seine Daseinsberechtigung als Ausgangspunkt zur Beschreibung kollektiver Eigenschaften und Untersuchung von Phasenübergängen.

2. XY-Modell: $J_{xx} = J_{yy} = J$ alle anderen Matrixelemente verschwinden
   $$H_{\text{XY}} = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + \sum_i h S_i^x = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j - S_i^z S_j^z - \sum_i h S_i^x \tag{1.47}$$
   Hier werden nur die Spinkomponenten in einer Ebene berücksichtigt was eine gute Näherung für magnetische Systeme ist, falls eine starke Anisotropie die Spins in eine Ebene zwingt. Anhand der 2. Formulierung sieht man allerdings eine gewisse Ähnlichkeit mit dem Heisenberg-Modell mit Ising-Anisotropie für $\lambda = -1$ (siehe auch (4.1), (4.25)). Für eine exakte Lösung in $D \neq 1$ ist das Modell schon zu kompliziert, eignet sich jedoch wie das Ising-Modell als Modell zur Beschreibung von Phasenübergängen und insbesondere zur Berechnung kritischer Exponenten [39].

3. Heisenberg-Modell mit Ising Anisotropie: $J_{xx} = J_{yy} = J, J_{zz} = J + I$[6]
   Dieses Heisenbergmodell enthält sozusagen beide erstgenannten Modelle und beschreibt die vollen Eigenschaften der Spinoperatoren inklusive deren Algebra (1.1)

4. Dzyaloschinski-Moriya-Anisotropie
   Als ein etwas ausgefalleneres Modell sei noch die Spin-Wechselwirkung über ein Kreuzprodukt
   $$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{ij}\left(J_{ij}\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j + \boldsymbol{d}_{ij} \cdot (\boldsymbol{S}_i \times \boldsymbol{S}_j)\right) \tag{1.48}$$
   genannt, das ebenfalls ein Spezialfall von (1.44) ist und nur bei bestimmter Symmetrie der Kristallstruktur angewendet werden kann.[7]

[6] Die Spezialfälle $I = -J$ und $I \gg J$ ergeben schließlich wieder das X-Y-Modell bzw. das Ising-Modell

[7] In der Verbindung La_2CuO_4, die uns noch häufiger begegnen wird, spielt die Dzyaloshinski-Moriya-Anisotropie eine stärkere Rolle als die Dipol-Dipol-Wechselwirkungen, wenngleich beide Anisotropien vernachlässigt werden können [5]

2 Grundzustände und elementare Anregungen von Heisenberg-Magneten

2.1 Klassische Betrachtungen

2.1.1 Klassischer Grundzustand

Die Spinwellentheorie beruht im wesentlichen auf einer Entwicklung um den klassischen Grundzustand in Potenzen der Quantenfluktuationen. Mittels dieser Methode können wir sowohl approximative Ausdrücke für Grundzustände und angeregte Zustände als auch Erwartungswerte von Operatoren also physikalische Messgrößen bestimmen. Die allgemeine Entwicklung eines Operators

$$\hat{O} = O_{\mathrm{cl}} + \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \left(\delta\hat{O}\right)^n \tag{2.1}$$

erfordert also die Kenntnis des klassischen Wertes O_{cl}. In der Praxis wird die Entwicklung nach wenigen Potenzen $\delta\hat{O}$ abgebrochen, unter der Annahme kleiner Quantenfluktuationen (bzw. kleiner thermischer Erwartungswerte von $\delta\hat{O}$). Für unser Spinmodell ist nun der Spinoperator zu entwickeln. Da Drehimpulse $\hat{\boldsymbol{J}}$ für $J \to \infty$ klassisches Verhalten zeigen, müssen wir in (1.34)

$$\boldsymbol{S}_i = S\boldsymbol{m}_i \tag{2.2}$$

setzen, wobei $\boldsymbol{m}_i$ der Richtungsvektor des klassischen Spins ist, und den Grenzwert $S \to \infty$ ausführen wobei sich die Gesamtenergie nicht ändern darf, was

$$J_{ij}S^2 = J_{ij}^{\mathrm{cl}} = const \qquad S\boldsymbol{h} = \boldsymbol{h}^{\mathrm{cl}} = const \tag{2.3}$$

erfordert. Der klassische Grundzustand eines Heisenberg-Magneten im homogenen Magnetfeld ergibt sich dann als Ergebnis der Minimierung von

$$\boxed{H^{\mathrm{cl}} = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}^{\mathrm{cl}} \boldsymbol{m}_i \cdot \boldsymbol{m}_j - \boldsymbol{h} \cdot \sum_i \boldsymbol{m}_i} \tag{2.4}$$

nach den Komponenten der klassischen Vektoren $\{\boldsymbol{m}_i\}$ [5, 40].

Beispiele

1. Ferromagnet, Nächste-Nachbar-Kopplung (keine Frustration, hyperkubisches Gitter)

   $$J_{ij} = J < 0 \qquad \text{für nächste-Nachbarn} \tag{2.5}$$

   Dies ist der einfachste Fall sowohl für die Spinwellentheorie als auch den klassischen Grundzustand, da hier alle Spins in die gleiche Richtung zeigen, die für verschwindendes Magnetfeld beliebig und für $\boldsymbol{h} \neq 0$ durch das Magnetfeld festgelegt ist.

2. Antiferromagnet (mit Ising-Anisotropie, hyperkubisches Gitter, keine Kopplung innerhalb der Untergitter (4.1))

   (a) ohne Magnetfeld $\boldsymbol{h} = 0$
   Wir nehmen nur Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen an, die alle gleich stark sind, wie man es auf einem einfach kubischen Gitter mit gleichen Gitterplätzen erwarten würde:

   $$\begin{aligned} J_{ij} &= J > 0 \qquad \text{für nächste Nachbarn (NN)} \\ I_{ij} &= I > 0 \qquad \text{für NN.} \end{aligned} \tag{2.6}$$

   Man beachte, dass die Richtung der lokalen Magnetisierung durch die Anisotropie festgelegt ist. Ohne Anisotropie sind alle Richtungen gleichwertig (SU(2)-Symmetrie). Die Anisotropieenergie

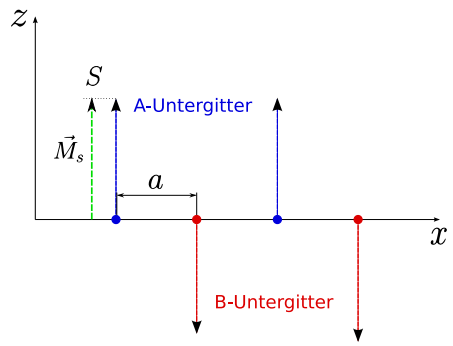

Abbildung 4: Klassischer Grundzustand (Néel-Zustand) des Antiferromagneten ohne angelegtes Magnetfeld. Auf den Untergittern sind die Spins jeweils in positive oder negative z-Richtung ausgerichtet. Die Untergittermagnetisierung $\boldsymbol{M}_s = S\boldsymbol{e}_z$ ist maximal.

zwingt die Spins dann aber im klassischen Grundzustand auf dem A-Untergitter jeweils einen Zustand in Richtung der z-Achse und auf dem B-Untergitter entgegengesetzt einzunehmen (siehe Abbildung 4). Mit der Minimierungsbedingung $\boldsymbol{m}_i \cdot \boldsymbol{m}_j = -1$ ergibt sich die klassische Grundzustandsenergie zu

$$E_{\mathrm{cl}} = -\frac{S^2}{2} \sum_{ij} (J_{ij} + I_{ij})\,. \tag{2.7}$$

Natürlich ist auch der Zustand möglich, bei dem die Untergitter ihre Rollen vertauschen, wir gehen aber o.B.d.A. davon aus, das die Spins auf dem A-Untergitter in positive z-Richtung zeigen.

(b) im homogenen Magnetfeld
Prinzipiell kann man hier je nach Richtung des Magnetfeldes noch 2 Fälle unterscheiden: Ist das Magnetfeld parallel zur Anisotropie, so sind die Spins des einen Untergitters in einem stabilen Gleichgewicht und die anderen Spins in einem labilen Gleichgewicht sobald das Magnetfeld stärker wird als die Anisotropie. In diesem Fall ist ein so genannten Spin-Flop-Übergang möglich, der hier allerdings nicht untersucht werden soll. Für Magnetfelder senkrecht zur Anisotropie $\boldsymbol{h} = h\boldsymbol{e}_x$ ist die Beschreibung des klassischen Grundzustandes einfacher. Die klassische Grundzustandsenergie schreibt sich als

$$E_{\mathrm{cl}} = -\frac{S^2}{2} \sum_{ij} K_{ij} - ShmN \tag{2.8}$$

mit der Abkürzung

$$K_{ij} = J_{ij}(n^2 - m^2) + I_{ij}n^2 \tag{2.9}$$

wobei die Skalarprodukte durch entsprechende Winkelfunktionen

$$n = \cos\vartheta \qquad m = \sin\vartheta \qquad \Rightarrow n^2 + m^2 = 1 \tag{2.10}$$

ausgedrückt werden, die sich gemäß Abbildung 5 ergeben. Elementare Lösung des Minimierungsproblems ergibt schließlich

$$m = \frac{h}{h_c(1 + \frac{1}{2}\lambda)} = \sin\vartheta \tag{2.11}$$

mit den Abkürzungen $\lambda = I/J$ und dem kritischen Feld (2.13), $\tilde{J}_0 = 2DJ$

3. Antiferromagnet (ohne Anisotropie, hyperkubisches Gitter, Nächste-Nachbar-Wechselwirkung)
Ohne Anisotropie erhalten wir aus (2.11) das bekannte Resultat für den Kippwinkel [41]

$$\boxed{m = \frac{h}{h_c}.} \tag{2.12}$$

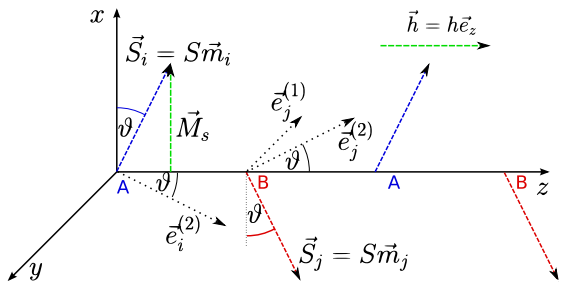

Abbildung 5: Die Entwicklung um den klassischen Grundzustand des QAF im Magnetfeld geht von lokalen Koordinatensystemen mit Koordinatenachse entlang der Magnetisierung aus, die hier um den Winkel ϑ gegenüber der x-Achse gekippt ist.

4. Antiferromagnet (ohne Anisotropie, im starken Magnetfeld $h > h_c$) Überschreitet das angelegte Magnetfeld einen kritischen Wert h_c, der gerade dem Austauschfeld

$$\boxed{h_c = 2S\tilde{J}_0} \tag{2.13}$$

entspricht, so tritt eine ferromagnetische Ordnung ein, d.h. im klassischen Bild richten sich alle Spins am äußeren Magnetfeld aus. Diesen Fall erhalten wir auch als Grenzwert von (2.12) für $h \to h_c$ (siehe Abbildung 16).

2.2 Quantenmechanische Grundzustände

Bevor man elementare quantenmechanische Anregungen eines Modellsystems betrachtet, sollte man sich ein Bild vom Grundzustand machen und dessen Symmetrien und Eigenschaften diskutieren.

2.2.1 Ferromagnet

Für den Quantenferromagneten mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung (2.5) im homogenen Magnetfeld $\boldsymbol{h} = h\boldsymbol{e}_z$ ist der quantenmechanische Grundzustand [42]

$$|0\rangle_{\mathrm{FM}} = \prod_{i=1}^{N} |S_i\rangle \tag{2.14}$$

$$S_i^z \, |S_i\rangle = S \, |S_i\rangle \tag{2.15}$$

gerade der Zustand, dessen Quantenzahlen dem klassischen Grundzustand entsprechen. Der rigorose Beweis dieser Aussage benutzt die Eigenwertgleichung der z-Komponente (2.15) des Spinoperators und die Darstellung der übrigen Komponenten (transversaler Anteil) als Produkte von Auf- und Absteigeoperatoren (1.2). Letztere tragen nicht bei, da sie den Grundzustand wegen $S_i^+ \, |S_i\rangle = 0$ vernichten. Die Grundzustandsenergie des Ferromagneten

$$E_{0,\mathrm{FM}} = -N(DJS^2 + hS) \tag{2.16}$$

ist bekannt und lässt sich aus der Maximalität der Matrixelemente $\langle \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j \rangle$ und $\langle S_i^z \rangle$ herleiten [8].

2.2.2 Antiferromagnet

Man könnte nun analog zu (2.14) den Zustand

$$\boxed{|\text{Néel}\rangle = \prod_{i \in A} |S_i\rangle \prod_{i \in B} |S_i\rangle} \tag{2.17}$$

als einen möglichen Grundzustand des Quantenantiferromagneten mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung ohne Magnetfeld aufschreiben, da dieser genau dem klassischen Grundzustand entspricht. Hierbei bezeichnen A und B die Untergitter des hyperkubischen Gitters und die Eigenzustände zum Spinoperator sind

nach (2.15) definiert. Berechnungen des Energieerwartungswertes ergeben die klassische Grundzustandsenergie (2.7), während $|\text{Néel}\rangle$ allerdings kein Eigenzustand des Hamiltonian ist. Eine Anwendung von (1.34) liefert auch Anteile eines Zustandes mit nicht mehr vollständig antiparallelen Nachbarn. Dennoch liegt beim Quantenantiferromagneten in 3 Dimensionen und in 2 Dimensionen für $T = 0$ ein geordneter Zustand vor [6], so dass der Néel-Zustand eine gewisse Relevanz hat und man den korrekten Zustand durch eine so genannte Spinwellenentwicklung um den klassischen Grundzustand erhalten kann und auch Aussagen für $T > 0$ machen kann [43]. Die Energie des korrekten Grundzustands liegt dann nach dem Variationsprinzip der Quantenmechanik [25] niedriger oder gleich hoch wie (2.7). Eine genauere Abschätzung der Grundzustandsenergie [8] liefert die Näherung

$$-S(S+1)DJN \leq E_0 \leq -S^2 DJN. \tag{2.18}$$

Die entsprechenden Schranken konvergieren für den klassischen Grenzfall $S \to \infty$, aber sind für kleine Spins $S = \frac{1}{2}$ nur eine grobe Näherung

$$-\frac{3}{4}DJN \leq E_0 \leq -\frac{1}{4}DJN \tag{2.19}$$

Lediglich in einer Dimension ist der Grundzustand des QAF durch den Bethe-Ansatz [3] exakt bestimmbar und liefert die Energie [8]

$$E_{0,D=1} = -JN\left(\ln 2 - \frac{1}{4}\right) = -0.443JN. \tag{2.20}$$

Neben einigen allgemeinen Aussagen zu Eigenschaften des Grundzustandes in endlichen Systemen wie Marshall's Theoreme,[8] bleibt das Problem der Bestimmung des Grundzustandes in $D \neq 1$ ungelöst. Ergebnisse zur Grundzustandsenergie in Spinwellentheorie entnehme man für Spezialfälle aus [44, 6]. Anders als beim Ferromagneten liefern also hier schon die quantenmechanischen Spinfluktuationen einen Beitrag zur Grundzustandsenergie und machen das Modell des QAF bereits bei $T = 0$ interessant.

2.3 Angeregte Zustände: Spinwellen

Thermodynamische Eigenschaften bei niedrigen Temperaturen kann man näherungsweise durch niedrig liegende angeregte Zustände bestimmen. Um die Art der Zustände zu veranschaulichen sei hier der einfach angeregte Zustand des Heisenberg-Ferromagneten bestimmt [42]. Zu dessen Konstruktion betrachten wir einen Zustand

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2S}} S_i^- \,|0\rangle_{\text{FM}} = |S_1\rangle \cdots |S_i - 1\rangle \cdots |S_N\rangle \tag{2.21}$$

mit verringerter z-Komponente des Spins am Gitterplatz i, der wegen der Orthogonalität aller Spinzustände auch orthogonal ist $\langle i|\ j\rangle = \delta_{i,j}$. Wenden wir den Hamiltonoperator des Heisenberg-Ferromagneten (1.43) auf den Zustand an, so wird der Zustand durch den parallelen Anteil reproduziert, während der senkrechte Anteil durch die Aufsteigeoperatoren gerade verschobene Zustände erzeugt:

$$\hat{H}\,|i\rangle = (E_{0,\text{FM}} + h)\,|i\rangle + S\sum_i J_{ij}\,(|i\rangle - |j\rangle)\,. \tag{2.22}$$

Die eigentlichen Spinwellenzustände lassen sich für translationsinvariante Systeme (J_{ij} hängt nur vom Abstand der Gitterpunkte i und j ab) durch eine Linearkombination der Zustände (2.21) konstruieren [9, 8]. Dazu definieren wir den Zustand

$$|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\boldsymbol{k}\cdot r_i}\,|i\rangle \tag{2.23}$$

als Fourierreihe der lokalisierten Zustände mit der neuen Quantenzahl $\boldsymbol{k}$. Mit dem üblichen Formalismus der Fouriertransformation des Hamiltonian (Multiplikation mit $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i}$, Summation über alle Gitterplätze,

[8] Marshall's Theoreme: Der exakte Grundzustand des Quantenantiferromagneten ist sowohl ein Eigenzustand zum Operator des Gesamtspins $\mathbf{S^2}$ als auch der z-Komponente des Gesamtspins S^z zum Eigenwert 0 und lässt sich als Linearkombination der einzelnen Spinzustände an allen Gitterplätzen schreiben, wobei die Entwicklungskoeffizienten einer Vorzeichenregel genügen müssen [45].

Benutzen der Summendarstellung des Kronecker-Symbols) können wir den so definierten Zustand als Eigenzustand zum Eigenwert

$$E_{\boldsymbol{k}} = E_{0,\mathrm{FM}} + h + S\left(\tilde{J}_0 - \tilde{J}_{\boldsymbol{k}}\right), \tag{2.24}$$

wobei $\tilde{J}_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{\delta}} J_{\boldsymbol{\delta}} e^{-i\boldsymbol{\delta}\cdot\boldsymbol{k}}$ die fouriertransformierte Wechselwirkung (B.11) ist, ermitteln.

$$\hat{H}\,|\boldsymbol{k}\rangle = E_{\boldsymbol{k}}\,|\boldsymbol{k}\rangle \tag{2.25}$$

Eigenschaften des Spinwellenzustandes

Spin-1-Anregungen Da es sich beim angeregten Zustand um eine Linearkombination von Zuständen mit jeweils um eine Einheit verringerten Gesamtspin handelt, ist der Zustand $|\boldsymbol{k}\rangle$ auch ein Eigenzustand zum Gesamtspinoperator $S^z = \sum_i S_i^z$, der gegenüber dem Grundzustand einen um eine Einheit kleineren Eigenwert hat

$$S^z\,|\boldsymbol{k}\rangle = (NS - 1)\,|\boldsymbol{k}\rangle\,. \tag{2.26}$$

Daher lassen sich die Quasiteilchenanregungen (Spinwellen) als Spin-1-Teilchen d.h. Bosonen verstehen.

Delokalisierung Da der Zustand $|\boldsymbol{k}\rangle$ eine Linearkombination von allen Spinzuständen mit jeweils an einem Gitterplatz erniedrigten Gesamtspin ist, ist die Erniedrigung des Gesamtspins auf das gesamte Gitter verteilt. Berechnet man die Wahrscheinlichkeit für das Antreffen eines reduzierten Spins an der Stelle i

$$|\langle i|\boldsymbol{k}\rangle|^2 = \frac{1}{N}, \tag{2.27}$$

so ist die Wahrscheinlichkeit wie bei ebenen Wellen der Einteilchen-Quantenmechanik überall konstant.

Transversalität Die hier betrachteten Spinwellenzustände sind transversale Wellen und beschreiben damit eine Auslenkung der Spins senkrecht zur Magnetisierung, was man am leichtesten mittels der Berechnung der Erwartungswerte der Spinkomponenten in x und y-Richtung sieht:

$$\begin{aligned} \chi^{\perp}_{\boldsymbol{k}} &= \left\langle \boldsymbol{k} \left| \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right| \boldsymbol{k} \right\rangle \\ &= \frac{2S}{N}\cos(\vartheta_{ij}). \end{aligned} \tag{2.28}$$

Die hier berechnete transversale Spin-Korrelationsfunktion zeigt eine kleine Komponente des Spins senkrecht zur Magnetisierung an jedem Gitterplatz, die sich wellenförmig von Gitterplatz zu Gitterplatz mit einer Amplitude von $\frac{2S}{N}$ fortsetzt. Die transversalen Anteile der Spinkomponenten sind für 2 Spins im Abstand $\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j$ um einen Winkel $\vartheta_{ij} = \boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)$ gedreht (siehe Abbildung 6).

Energiedispersion für lange Wellenlängen Eine Entwicklung von (2.24) nach kleinen Wellenvektoren, sowie Subtraktion der Grundzustandsenergie ergibt die Dispersion der ferromagnetischen Spinwellen zu:

$$\boxed{\epsilon_{\boldsymbol{k}} = h + JS(|\boldsymbol{k}|a)^2 + \mathcal{O}(k^4).} \tag{2.29}$$

Ohne Magnetfeld erhalten wir so eine Anregung, die für lange Wellenlängen verschwindet. Damit handelt es sich um eine Anregung ohne Energielücke („gapless“), von der die Eigenschaften des Heisenberg-Magneten bei tiefen Temperaturen bestimmt werden. Das Vorhandensein von Anregungen ohne Energielücke ist eine Konsequenz der spontanen Brechung der Spin-Rotationssymmetrie durch den ferromagnetischen Grundzustand nach dem Goldstone Theorem. Wir werden auf diesen Sachverhalt bei der Diskussion des Quantenantiferromagneten nochmals zurückkommen.

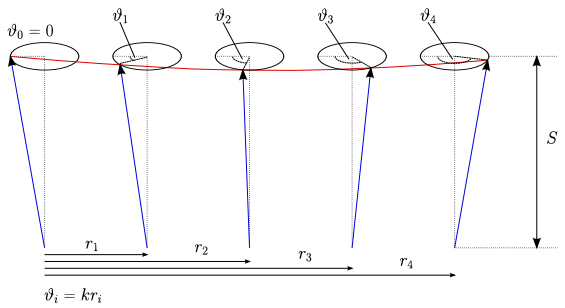

Abbildung 6: Veranschaulichung von ferromagnetischen Spinwellen in einer Dimension: Für einen Zustand $|\boldsymbol{k}\rangle$ mit endlichem $\boldsymbol{k} \neq 0$ sind die klassischen Spins derart aus ihrer „Ruhelage“ ausgelenkt, dass sie auf einem Kegel präzessieren, wobei der Präzessionswinkel vom Gitterplatz abhängt. Die Welle bewegt sich in Richtung der Ortsvektoren r_i, während die Auslenkung jeweils senkrecht dazu ist (Transversalität). Für große $S \to \infty$ ist dieses Bild auch für die quantenmechanischen Spinoperatoren korrekt.

2.4 Thermodynamik, Messgrößen

Hier sollen kurz wichtige Messgrößen thermodynamischer Variablen vorgestellt werden, die sich mittels statistischer Physik aus den Korrelationsfunktionen bzw. Energiespektren des Heisenberg-Magneten berechnen lassen. Neben reinen $T = 0$ Ergebnissen werden auch einige Standardergebnisse für endliche Temperaturen angegeben. Schließlich wird der Messprozess des dynamischen Strukturfaktors mittels Neutronenstreuung beschrieben, mit dem es möglich ist ein Hauptergebnis dieser Arbeit nachzuprüfen.

2.4.1 Magnetisierung

Betrachtet man einen makroskopischen Festkörper, so sind dessen wichtigste magnetischen Eigenschaften durch das von ihm erzeugte Magnetfeld im Außenraum gegeben, das schon die alten Griechen qualitativ entdeckt haben. Die mikroskopische Ursache der Magnetisierung von Isolatoren mit lokalisierten Spins ist der Erwartungswert des Spinoperators an allen Gitterplätzen.[9]

$$\boxed{M = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle} \tag{2.30}$$

Temperaturabhängigkeiten dieser Größe lassen sich nach Berechnung der freien Energie des Systems im Magnetfeld im kanonischen Ensemble [39] herleiten. Da die Magnetisierung die kanonisch konjugierte Variable des Magnetfeldes ist, folgt somit

$$M = -\frac{1}{N} \frac{1}{g\mu_B} \frac{\partial}{\partial H} F(H). \tag{2.31}$$

Standardergebnisse für die Magnetisierung lassen sich in Spinwellentheorie z. B. für den Ferromagneten leicht unter Verwendung der Zustandssumme des freien Bose-Gases herleiten und ergeben für $D = 3$ das Blochsche $T^{3/2}$-Gesetz [46, 47][10]

$$M(T) = S \left[1 - C \left(\frac{T}{|J|S} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \tag{2.32}$$

wobei $C = 8^{-1}\pi^{-3/2}\zeta(3/2)$ (siehe auch (1.10)), J die Austauschkopplung (2.5) und S der Gesamtspin ist [51].
Für $T = 0$ ergibt sich das triviale Ergebnis $M = S$, das wir auch mittels des ferromagnetischen Grundzustands (2.14) erhalten hätten. Die Spins an allen Gitterplätzen sind parallel ausgerichtet. Erst *thermische*

[9] Abgesehen davon sind für große Proben noch Domäneneffekte und Formfaktoren wichtig, die hier nicht betrachtet werden sollen [27]

[10] In niedrigeren Dimensionen bricht die Spinwellentheorie des Ferromagneten zusammen und die Magnetisierung divergiert. Genauere Analysen zeigen, dass zweidimensionalen Ferromagneten bei endlichen Temperaturen keine Magnetisierung aufweisen (Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorem [48, 49, 50])

Fluktuationen verringern die Mangetisierung, da in diesem Fall Spinwellen thermisch angeregt werden. Die Größe (2.32) lässt sich im Prinzip auch als Funktion des Magnetfeldes verstehen, was im Falle des Ferromagneten lange bekannt ist und keine überaschenden Effekte zeigt.[11] Anders beim Antiferromagneten: Ohne Magnetfeld verschwindet die Magnetisierung und nimmt im Magnetfeld Werte an, die für tiefe Temperaturen im wesentlichen durch Quanteneffekte dominiert werden.

2.4.2 Untergittermagnetisierung

Die analoge Größe zur Magnetisierung für den Antiferromagneten ist die gestaffelte oder Untergittermagnetisierung, wie der klassische Grundzustand oder der Néel-Zustand (2.17) nahelegen:

$$\boxed{M_s = \frac{1}{N}\sum_i \zeta_i \langle S_i^\perp \rangle = \frac{1}{N}\left(\sum_{i\in \mathrm{A}} \langle S_i^\perp \rangle - \sum_{i\in \mathrm{B}} \langle S_i^\perp \rangle\right).} \tag{2.33}$$

Im klassischen Néel-Zustand ist dieser Erwartungswert wieder gerade der Spin $M_s = S$. Wie wir aber schon gesehen hatten, ist dieser Zustand kein Grundzustand des Quantenantiferromagneten. Daher verändern nicht nur thermische Fluktuationen den Wert von M_s, sondern bereits Quantenfluktuationen ergeben einen expliziten Beitrag. Ebenso wie die Magnetisierung lässt die M_s als Ableitung der freien Energie nach einem gestaffelten Magnetfeld (das bezüglich der Koordinatensysteme der Untergitter definiert ist, siehe Seite 33) berechnen. Für $T = 0$ trägt nur der Grundzustand bei, somit vereinfacht sich die Berechnung auf die Ableitung der Grundzustandsenergie

$$M_s = -\frac{1}{N}\frac{1}{g\mu_B}\frac{\partial}{\partial H} E_0(H)\bigg|_{H=0}. \tag{2.34}$$

Die exakte Grundzustandsenergie ist außer in $D = 1$ nicht bekannt. Daher lässt sich die gestaffelte Magnetisierung nur näherungsweise berechnen. Eine Spinwellennäherung [44] ebenso wie die Schwinger-Bosonen Mean-Field-Theorie [51] liefert[12]

$$M_s = S\left[1 - \frac{K_1}{2S} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{S^2}\right)\right] \tag{2.35}$$

$$K_1 = \frac{2}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\in \text{red. BZ}}\left(\frac{1}{\sqrt{1-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}^2}} - 1\right) \qquad \begin{array}{ll} K_1 = 0.393 & D = 2 \\ K_1 = 0.156 & D = 3 \end{array} \tag{2.36}$$

Für den zweidimensionalen Fall wurde sogar bis zur 3. Ordnung gerechnet [53, 54, 55, 56]:

$$M_s = S\left[1 - \frac{0.197}{S} - \frac{0.0068}{S^3} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{S^4}\right)\right] \tag{2.37}$$

Auch für die gestaffelte Magnetisierung lassen sich Temperaturkorrekturen in linearer Spinwellentheorie berechnen [44, 52, 47, 51]. Dazu werden die Spinoperatoren in (2.33) durch entsprechende Magnonenfreiheitsgrade ausgedrückt und schließlich die Zustandssumme freier Bosonen mit linearer Dispersion ausgewertet.

$$M_s = S\left[1 - \frac{K_1}{2S} + \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\sqrt{2}T}{JS^2}\ln k_0 & D = 2 \\ \frac{2}{6^{7/2}S}\left(\frac{T}{JS}\right)^2 & D = 3 \end{array} \right.\right] \tag{2.38}$$

Hierbei ist k_0 ein Impuls-Cutoff der linearen Dispersion, sowie J die Austauschkonstante (2.6). Die Formel (2.38) ist natürlich nur für tiefe Temperaturen (und große Spins) gut, wenn die Korrekturen klein gegenüber der führenden 1 sind. Weiterhin sei die Korrespondenz der langreichweitigen Ordnung des D-dimensionalen Quanten-Heisenberg Modells bei $T = 0$ und des $(D+1)$-dimensionalen klassischen Heisenberg Modells bei endlichen Temperaturen angemerkt.

[11] Die Magnetisierung lässt sich gut mittels Molekularfeldtheorie beschreiben und geht durch thermische Anregungen bis zur Curie-Temperatur auf Null zurück.

[12] Weitere Werte findet man auch im Übersichtartikel [6] oder in den Orginalarbeiten [44, 52, 47].

2.5 Wärmekapazität

Für endliche Temperaturen tragen die Spinwellen wie alle Quasiteilchenanregungen des Festkörpers zu spezifischen Wärme

$$C_G = \frac{1}{N}\frac{\partial U_G}{\partial T} \tag{2.39}$$

bei. Die innere Energie U_G setzt sich hierbei aus den Beiträgen der einzelnen (als entkoppelt betrachteten) Sytemen der Phononen, Elektronen, Magnonen etc. zusammen. Im einfachsten Fall von lokalisierten Spins des Heisenberg-Magneten haben wir nur den phononischen Beitrag

$$C_{\mathrm{ph}} = \alpha T^D \tag{2.40}$$

und die Beiträge der Spinwellen, die im Falle des Ferromagneten dem Gesetz [27]

$$C_{\mathrm{SW,\ FM}} = \beta_{\mathrm{FM}} T^{\frac{D}{2}} \tag{2.41}$$

aus der quadratischen Dispersion (2.29) resultieren, während beim Antiferromagneten in linearer Spinwellentheorie die lineare Dispersion einen zu den Phononen analogen Beitrag zur Wärmekapazität auftritt [47, 27]

$$C_{\mathrm{SW,\ AFM}} = \beta_{\mathrm{AFM}} T^D. \tag{2.42}$$

Experimentell sind diese Gesetze für tiefe Temperaturen gut bestätigt, während für höhere Temperaturen die Spinwellentheorie keine gute Methode ist (weiteres in [57]).

2.6 Neutronenstreuung

Mittels Streuexperimenten kann man Eigenschaften von Festkörpern gut untersuchen, da die „Projektile“ die gesamte makroskopische Probe erfassen und somit insbesondere kollektive Phänomene auflösen. Während Atom- oder Ionenstrahlen keine gute Wahl für Festkörper sind, weil sie einen zu großen Wirkungsquerschnitt haben und somit die Näherung der Einfachstreuung nicht mehr gilt bzw. starke Absorption vorliegt, eignen sich Photonen und andere Elementarteilchen (Protonen, Elektronen, Neutronen) bei relativ niedrigen Energien besser und werden intensiv angewendet. Aber allein die Neutronen wechselwirken nur mit ihrem magnetischen Moment[13] und sind damit ein ideales Projektil zur Untersuchung magnetischer Eigenschaften im Festkörper [58]. Sie haben ein magnetisches Moment

$$\mu = \gamma \mu_N, \tag{2.43}$$

wobei der gyromagnetische Faktor des Neutrons durch $\gamma = 1.91$ und das Kernmagneton durch $\mu_N = \frac{e\hbar}{m_n c}$ (m_n: Masse des Neutrons, c: Lichtgeschwindigkeit) gegeben ist. Sie wechselwirken über ihr magnetisches Dipolfeld mit den im Festkörper vorhandenen magnetischen Momenten der Elektronen. Weiterhin liegt bei thermischen Neutronen $E \approx 20meV$ sowohl deren kinetische Energie

$$E = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m_n} \tag{2.44}$$

im Bereich elementarer Anregungen des Festkörpers als auch die entsprechende de Broglie-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_n E}} \tag{2.45}$$

im Bereich typischer Gitterkonstanten des Festkörpers und lässt somit starke Interferenzeffekte auftreten. In der Praxis wird eine monochromatischer Neutronenstrahl mit dem Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ und der Energie E auf eine Probe gerichtet und mittels eines Detektors die unter dem Winkel ϑ gestreuten Neutronen mit dem Wellenvektor $\boldsymbol{k}'$ und der Energie E' registriert (siehe Abbildung 7)[14]. Aufgrund der Geometrie

[13] Die starke Wechselwirkung kann hier vernachlässigt werden, da die Wirkungsquerschnitte für nicht radioaktive Kerne bei thermischen Neutronen verschwindend klein sind.

[14] Einen guten Überblick über aktuelle Neutronenquellen und experimentelle Details bietet [59], während die theoretischen Grundlagen auch im Hinblick auf die Streuung an Spinwellen in Standardwerken von Lovesey [60, 61] nachgelesen werden können.

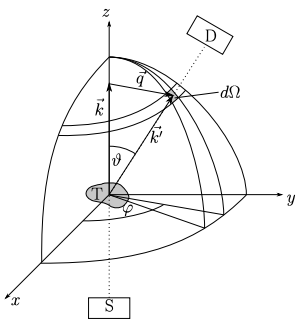

Abbildung 7: Geometrie eines typischen Streuexperiments: Von der Quelle S wird ein Strahl monochromatische Neutronen (gestrichelte Linie) mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ auf die Probe T gerichtet. Findet nun eine Wechselwirkung mit Impulsübertrag $\boldsymbol{q}$ statt, so registriert der Detektor D Neutronen mit Impuls $\boldsymbol{k}'$, die unter dem Winkelpaar (ϑ, ϕ) gestreut wurden. Aus den Zählraten des Detektors bestimmt man dann die pro Oberflächenelement einer Einheitskugel $d\Omega$ gestreuten Neutronen. Zusammen mit der Information der Energieauflösung des Detektors sowie des Flusses primärer Neutronen wird dann der Wirkungsquerschnitt (2.52) bzw (2.54) bestimmt.

(Rotationsinvarianz um Strahlachse) sind die Messgrößen die so genannten Wirkungsquerschnitte. Für elastische Streuung wird der differentielle Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi)$, der die Anzahl der im Raumwinkelelement $d\Omega$ gestreuten Neutronen pro einfallende Neutronenflussdichte angibt, gemessen. Dagegen misst man bei elastischer Streuung, bei der die Neutronen ihre Energie durch Erzeugung oder Vernichtung von Quasiteilchenanregungen im Festkörper ändern ($E \neq E'$), den partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitt, der die Anzahl der im Raumwinkelelement $d\Omega$ gestreuten Neutronen mit Energie im Intervall zwischen E' und $E' + dE'$ pro einfallende Neutronenflussdichte und Energieintervall angibt. Die entsprechenden Wirkungsqerschnitte lassen sich wegen der schwachen Wechselwirkung zwischen Neutronenstrahl und Probe in Bornscher Näherung, also 1. Ordnung Störungstheorie mittels Fermi's Goldener Regel berechnen. Es wird sich zeigen, dass der Wirkungsquerschnitt proportional zum magnetischen dynamischen Strukturfaktor ist. Das quantenmechanische Problem lässt sich mittels des Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{FK}} + \hat{H}_{\mathrm{N}} + \hat{H}_{\mathrm{WW}} \tag{2.46}$$

formulieren. Der Hamiltonoperator des Festkörpers $\hat{H}_{\mathrm{FK}}$ bestehe nur aus den magnetischen Anteilen und sei gelöst:

$$\hat{H}_{\mathrm{FK}} |\alpha\rangle = E_\alpha |\alpha\rangle . \tag{2.47}$$

Der Neutronenhamiltonian sei mit ebenen Wellen im Volumen V

$$\langle \boldsymbol{r}| \, \boldsymbol{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad E_{\boldsymbol{k}} = \frac{\boldsymbol{k}^2}{2m_n} \tag{2.48}$$

durch die Eigenwertgleichung

$$\hat{H}_{\mathrm{N}} |\boldsymbol{k}\rangle = E_{\boldsymbol{k}} |\boldsymbol{k}\rangle \tag{2.49}$$

gelöst. Die Wechselwirkung werde durch einen Dipol-Wechselwirkungsterm $\hat{H}_{\mathrm{WW}}$ vermittelt.

2.6.1 Elastische Streuung

Bei elastischer Streuung ändert sich die Probe nicht, so dass wir für die Streuamplitude gemäß Fermis Goldener Regel

$$dM = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \boldsymbol{k}| \, \hat{H}_{\mathrm{WW}} \, |\boldsymbol{k}'\rangle \right|^2 d\rho_{\boldsymbol{k}'}(E) \tag{2.50}$$

erhalten, wobei $d\rho_{\boldsymbol{k}'}(E)'$ die Dichte der Endzustände pro Energieeinheit ist. Mit der Energie der gestreuten Neutronen (2.48) können wir das Matrixelement direkt mit dem Raumwinkelelement durch Lösung eines Impulsintegrals in Verbindung bringen und erhalten

$$dM = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \boldsymbol{k}| \, \hat{H}_{\mathrm{WW}} \, |\boldsymbol{k}'\rangle \right|^2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{m_n |\boldsymbol{k}|}{\hbar^2} \, d\Omega. \tag{2.51}$$

Wegen der Dichtenormierung der ebenen Wellen ist das Matrixelement nun gerade die Anzahl der im Raumwinkelelement gestreuten Neutronen pro Zeiteinheit und der Wirkungsquerschnitt lässt sich mittels

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m_n V}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \langle \boldsymbol{k}| \, H_{\mathrm{WW}} \, |\boldsymbol{k}'\rangle \right|^2 \tag{2.52}$$

berechnen.

2.6.2 Inelastische Streuung

Die Ableitung des differentiellen Wirkungsquerschnitts für die inelastische Neutronenstreuung erfolgt nach dem gleichen Schema. Da nun die Anfangs- und Endzustände der Probe nicht mehr gleich sind, ändert sich das durch $\hat{H}_{\mathrm{WW}}$ vermittelte Matrixelement unter Beachtung der Energieerhaltung

$$\hbar\omega = E - E' = E_{\alpha'} - E_{\alpha} \tag{2.53}$$

zu

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{|k'|}{|k|}\left(\frac{m_n V}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \sum_{\alpha,\alpha'} e^{-\beta E_\alpha} \left|\langle \boldsymbol{k},\alpha|\, \hat{H}_{\mathrm{WW}}\, |\boldsymbol{k}',\alpha\rangle\right|^2 \delta\left(\hbar\omega - E'_\alpha + E_\alpha\right) \tag{2.54}$$

wobei wir noch über die thermische Verteilung der Anfangszustände mit Bolzmannfaktor gemittelt und über alle möglichen Endzustände summiert haben. Die Zustände $|\boldsymbol{k},\alpha\rangle$ sind einfache Produktzustände gemäß (2.48) und (2.46).
Für unsere spezielle Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Dipolmoment des Neutrons und den magnetischen Momenten der Elektronen im Festkörper berücksichtigen wir nur den Spinanteil lokalisierter Elektronen. Das magnetische Dipolfeld der Elektronen

$$\boldsymbol{H}_{\mathrm{Dip}}(\boldsymbol{r}) = \frac{3\boldsymbol{e}_r(\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{\mu}_e) - \boldsymbol{\mu}_e}{|\boldsymbol{r}|^3} \tag{2.55}$$

am Ort $\boldsymbol{r}$ ($\boldsymbol{e}_r = \boldsymbol{r}/|\boldsymbol{r}|$, Dipolmoment der Elektronen am Gitterplatz i, $\boldsymbol{\mu}_e = -g\mu_B\boldsymbol{S}_i$ (1.5)) wechselwirkt nun mit dem magnetischen Moment der Neutronen (siehe (1.5))

$$\boldsymbol{\mu}_n = \gamma\mu_N\boldsymbol{S}_n. \tag{2.56}$$

wobei $\boldsymbol{S}_n$ der Operator des Neutronenspins ist. Damit ist der Wechselwirkungsoperator gerade das entsprechende Skalarprodukt

$$\hat{H}_{\mathrm{WW}} = g\gamma\mu_N\mu_B\boldsymbol{S}_n\cdot\frac{3\boldsymbol{e}_r(\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{S}_i) - \boldsymbol{S}_i}{|\boldsymbol{r}|^3}\,. \tag{2.57}$$

Über die Darstellung des Dipolfeldes

$$\boldsymbol{H}_{\mathrm{Dip}}(\boldsymbol{r}) = \nabla\times\left(\frac{\boldsymbol{\mu}_e\times\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}\right) \tag{2.58}$$

als Rotation sowie der Foriertransformation der Funktion $f(\boldsymbol{r}) = 1/|\boldsymbol{r}|$ lässt sich das Matrixelement des Wechselwirkungsoperators zwischen 2 verschiedenen Neutronenzuständen mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ und $\boldsymbol{k}'$ auswerten:

$$\left\langle \boldsymbol{k}\left|\boldsymbol{S}_n\cdot\nabla\times\frac{\boldsymbol{S}_i\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i|}\right|\boldsymbol{k}'\right\rangle = \frac{4\pi}{V}e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i}\boldsymbol{S}_i\cdot(\boldsymbol{e}_q\times(\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{e}_q)). \tag{2.59}$$

Der Ortsvektor wurde in den Ortsvektor $\boldsymbol{r}_i$ des Spins i und den Abstandsvektor $\boldsymbol{r}$ aufgespalten sowie der Vektor des Impulsübertrages und ein entsprechender Einheitsvektor

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}' \qquad \boldsymbol{e}_q = \frac{\boldsymbol{q}}{|\boldsymbol{q}|} \tag{2.60}$$

eingeführt. Betrachten wir weiterhin den zusätzlichen Freiheitsgrad der Spinpolarisation in der Summe in (2.54), so folgt für den partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \left(\frac{2g\gamma\mu_N\mu_B m_n}{\hbar^2}\right)^2\frac{|\boldsymbol{k}'|}{|\boldsymbol{k}|}\sum_{\alpha,\alpha'}\sum_{\sigma,\sigma'}\delta(\hbar\omega - E_{\alpha'} + E_\alpha)e^{-\beta E_\alpha}e^{-\beta E_{\alpha'}}\left|\langle\sigma\alpha|\,\boldsymbol{S}_n\cdot\boldsymbol{S}_\perp(\boldsymbol{q})\,|\sigma'\alpha'\rangle\right|^2. \tag{2.61}$$

Dabei haben wir den Operator

$$S_\perp(\boldsymbol{q}) = \sum_i e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i}\boldsymbol{e}_q\times(\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{e}_q) = \sum_i e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i}\left(S_i - (\boldsymbol{e}_q\cdot\boldsymbol{S}_i)\,\boldsymbol{e}_q\right) \tag{2.62}$$

als den zu $\boldsymbol{q}$ senkrechten Anteil der Fouriertransformierten des Spinoperators definiert, für den

$$(\boldsymbol{S}_\perp(\boldsymbol{q}))^\dagger = \boldsymbol{S}_\perp(-q) \tag{2.63}$$

gilt. Zur Vereinfachung gehen wir von unpolarisierten Neutronen aus, sodass die entsprechenden Impuls-Eigenzustände zu verschiedenen Polarisationen σ gerade

$$\sum_{\sigma,\sigma'} e^{-\beta E_\sigma} \langle\sigma| S_n^i |\sigma'\rangle \langle\sigma'| S_n^j |\sigma\rangle = \delta^{ij} \tag{2.64}$$

erfüllen und sich unsere Formel (2.61) zu

$$\boxed{\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \left(\frac{2g\gamma\mu_N\mu_B m_n}{\hbar^2}\right)^2 \frac{|\boldsymbol{k}|}{|\boldsymbol{k}'|} S(\boldsymbol{q},\omega)} \tag{2.65}$$

vereinfacht, wobei der dynamische Strukturfaktor

$$S(\boldsymbol{q},\omega) = \sum_{\alpha,\alpha'} e^{-\beta E_\alpha} \langle\alpha| \boldsymbol{S}_\perp(-\boldsymbol{q}) |\alpha'\rangle \cdot \langle\alpha'| \boldsymbol{S}_\perp(\boldsymbol{q}) |\alpha\rangle \, \delta(\hbar\omega + E_\alpha - E_{\alpha'}) \tag{2.66}$$

definiert wurde. Der Vorfaktor des partiellen differentiellen Wirkungsquerschnitts hat offensichtlich die Dimension einer Länge

$$\frac{2g\gamma\mu_N\mu_B m_n}{\hbar^2} = \frac{g\gamma e^2}{2m_e c^2} = \frac{g\gamma}{2} 2\pi\lambda_c\alpha, \tag{2.67}$$

wobei $\lambda_c = \frac{h}{m_e c}$ die Comptonwellenlänge und $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ die Feinstrukturkonstante ist, so dass sich zusammen mit der Dimension des dynamischen Strukturfaktors von inverser Energie (aus der δ-Funktion) die korrekte Dimension des Wirkungsquerschnitts (Fläche/Energie) ergibt. Weiterhin ist es üblich das Skalarprodukt der zum Impulsübertrag $\boldsymbol{q}$ transversalen Spinkomponenten als

$$\boldsymbol{S}_\perp(\boldsymbol{q}) \cdot \boldsymbol{S}_\perp(-\boldsymbol{q}) = \sum_{i,j=1}^{3} (\delta_{ij} - e_{qi}e_{qj}) \, S^i(\boldsymbol{q}) S^j(-\boldsymbol{q}) \tag{2.68}$$

zu schreiben und somit den dynamischen Strukturfaktor als

$$S(\boldsymbol{q},\omega) = \sum_{i,j=1}^{3} (\delta_{ij} - e_{qi}e_{qj}) \, S^{ij}(\boldsymbol{q},\omega) \tag{2.69}$$

darzustellen, wobei die dynamischen Strukturfaktoren des Spinsystems als

$$\boxed{S^{ij}(\boldsymbol{q},\omega) = \sum_{\alpha,\alpha'} e^{-\beta E_\alpha} \langle\alpha| S^i(\boldsymbol{q}) |\alpha'\rangle \langle\alpha'| S^j(\boldsymbol{q}) |\alpha\rangle \, \delta(\hbar\omega + E_\alpha - E_{\alpha'})} \tag{2.70}$$

definiert sind. Der partielle differentielle Wirkungsquerschnitt für die Neutronenstreuung an Proben mit lokalisierten Spins ist proportional zum Anteil des dynamischen Strukturfaktors, der senkrecht zum Impulsübertrag ist. Für den speziellen experimentellen Aufbau können wir nun noch die Lage des Impulsübertrags relativ zur Probe, genauer zur Magnetisierung[15] der Probe wählen. Für $\boldsymbol{q} \parallel \boldsymbol{M} = M\boldsymbol{e}_z$ spricht man vom transversalen dynamischen Strukturfaktor

$$S_\perp(\boldsymbol{q},\omega) = \sum_{\alpha,\alpha'} e^{-\beta E_\alpha} \left(|\langle\alpha| S^x(\boldsymbol{q}) |\alpha'\rangle|^2 + |\langle\alpha| S^y(\boldsymbol{q}) |\alpha'\rangle|^2 \right). \tag{2.71}$$

der sich gemäß (1.2) auch durch die Leiteroperatoren ausdrücken lässt. Diese Größe beschreibt gerade die ferromagnetischen Fluktuationen durch Spinwellen und erlaubt in linearer Spinwellentheorie das

[15] Im Falle des Antiferromagneten legt ein äußeres Magnetfeld die Richtung der Magnetisierung fest.

Ausmessen der Dispersionsrelation. Im Falle der Abbildung der Spinoperatoren auf freie Bosonen erzeugen und vernichten die Leiteroperatoren gerade ein Quasiteilchen mit definiertem Impuls, daher hat der transversale dynamische Strukturfaktor für den Ferromagneten gerade die Form [9]

$$S_\perp(\boldsymbol{q},\omega) = NS\left[1+\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right]\left[\delta(\hbar\omega-\epsilon_{\boldsymbol{q}})-\delta(\hbar\omega+\epsilon_{\boldsymbol{q}})\right] \tag{2.72}$$

sowie die Eigenschaft der „detailed balance“

$$S_\perp(\boldsymbol{q},-\omega) = e^{-\beta\hbar\omega}S_\perp(\boldsymbol{q},\omega). \tag{2.73}$$

Für den Antiferromagneten ist die zum Spinoperator im Impulsraum analoge Größe gerade

$$\boxed{S^\alpha_{\boldsymbol{k},\mathrm{st}} = \sum_{\boldsymbol{r}_i}\zeta_i e^{-i\boldsymbol{k}\cdot r_i}S^\alpha_i} \qquad \alpha\in\{x,y,z,+,-\} \tag{2.74}$$

mit der Definition (4.12), da sie die Fluktuationen der gestaffelten Magnetisierung (Untergittermagnetisierung) beschreibt. Führen wir einen antiferromagnetischen Nestingvektor

$$\boldsymbol{Q} = \sum_{i=1}^{D}\frac{\pi}{a}\boldsymbol{e}_i \tag{2.75}$$

ein, so können wir die Gleichung (2.74) auch zu

$$\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{k},\mathrm{St}} = \sum_i e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{Q})\cdot\boldsymbol{r}_i} = \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{Q}} \tag{2.76}$$

umschreiben, wobei wir die Identität

$$e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i} = \zeta_i \tag{2.77}$$

benutzt haben. Damit müssen wir zur Messung antiferromagnetischer Eigenschaften also den Bereich des Wirkungsquerschnitts bei Impulsüberträgen im Bereich des Nestingvektors $\boldsymbol{Q}$ ansehen. Somit lässt sich durch Messung des dynamischen Strukturfaktors wie beim Ferromagneten auch die Dispersionsrelation des Antiferromagneten bestimmen [5]. Da jedoch die Erzeuger/Vernichter der antiferromagnetischen Magnonen noch über eine Bogoliubov-Transformation mit den Spinoperatoren verknüpft sind, erhält man in linearer Spinwellentheorie für den zum Impulsübertrag transversalen dynamischen Strukturfaktor des Quantenantiferromagneten [62]

$$S_{\perp,\mathrm{St}}(\boldsymbol{k},\omega) = NS\left[1+\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right]|u^*_{\boldsymbol{k}}+v_{\boldsymbol{k}}|^2\left[\delta(\hbar\omega-E_{\boldsymbol{k}})-\delta(\hbar\omega+E_{\boldsymbol{k}})\right] \tag{2.78a}$$

$$S_\perp(\boldsymbol{k},\omega) = NS\left[1+\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right]|u^*_{\boldsymbol{k}}-v_{\boldsymbol{k}}|^2\left[\delta(\hbar\omega-E_{\boldsymbol{k}})-\delta(\hbar\omega+E_{\boldsymbol{k}})\right]. \tag{2.78b}$$

Es kommen noch die Koeffizienten der Bogoliubov-Transformation vor, deren Entwicklung für kleine Wellenlängen hier nur angegeben wird

$$|u^*_{\boldsymbol{k}}+v_{\boldsymbol{k}}|^2 \approx \frac{2\sqrt{D}}{ka} \tag{2.79a}$$

$$|u^*_{\boldsymbol{k}}-v_{\boldsymbol{k}}|^2 \approx \frac{ka}{2\sqrt{D}}. \tag{2.79b}$$

Über die Messung der Position der Reflexe (in der Theorie reine δ-Peaks) erhält man die Dispersionsrelation, die für kleine Wellenvektoren wie

$$E_{\boldsymbol{k}} \approx c_0|\boldsymbol{k}| \tag{2.80}$$

gemäß linearer Spinwellentheorie verläuft. Es ist jedoch klar, dass eine Messung bei kleinen Impulsüberträgen schwieriger wird, da der energieintegrierte Strukturfaktor klein wird, während das spektrale Gewicht nahe des Nestingvektors groß wird.

3 Quantenmechanische Beschreibungen der Spinwellen

Der Heisenberg-Hamiltonian enthält nun in jedem Fall nicht kommutierende Operatoren, so dass in $D > 1$ kein gemeinsames System von Eigenzuständen zu den auftretenden Operatoren existiert und der Hamiltonian prinzipiell nicht exakt diagonalisierbar ist. Ein Mean-Field Ansatz auf dem Level der Spinoperatoren zur näherungsweisen Diagonalisierung des Modellhamiltonian liefert ein grundlegendes Verständnis für das Vorhandensein magnetischer Ordnungen und beschreibt auch Temperaturabhängigkeiten der Ordnungsparameter [8].
Für weitere Berechnungen, insbesondere die Untersuchung von Korrelationsfunktionen, ist es nun sinnvoll die Spinoperatoren auf andere Operatoren zumindest näherungsweise abzubilden und das daraus entstehende Modellsystem näher zu analysieren und zu lösen. Mittels der Holstein-Primakoff-Transformation (HP), der Dyson-Maleev-Transformation (DM) und dem Schwinger-Bosonen-Ansatz haben sich 3 Bosonisierungstechniken etabliert, die ich im Folgenden beschreiben werde.

3.1 Spindarstellungen

Die Spinoperatoren lassen sich durch bosonische Operatoren mittels der Parametrisierung [63]

$$\boxed{\begin{aligned} S_i^z &= S_i^{\parallel} = S - n_i \quad , \qquad n_i = b_i^\dagger b_i && \text{(3.1a)} \\ S_i^+ &= \sqrt{2S}\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1+\eta}{2}} b_i && \text{(3.1b)} \\ S_i^- &= \sqrt{2S} b_i^\dagger \left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1-\eta}{2}} . && \text{(3.1c)} \end{aligned}}$$

für beliebiges η ausdrücken. Hierbei ist S der Gesamtspin aller Spinoperatoren, der im Festkörper dann an jedem betrachteten Gitterplatz identisch sein muss. Die neuen Operatoren $b_i^\dagger$ und b_i sollen nun Erzeuger und Vernichter für Bosonen sein, erfüllen damit die Kommutatoren

$$\boxed{\left[b_i, b_j^\dagger\right] = \delta_{ij}, \qquad \left[b_i, b_j\right] = \left[b_i^\dagger, b_j^\dagger\right] = 0} \tag{3.2}$$

und die natürlichen Zahlen sowie die Null sind entsprechende Eigenwerte des Operators n_i. Damit die entsprechende Transformation die Eigenschaften des Spinsystems korrekt auf Bosonen abbildet, muss die Spinalgebra (1.3) erfüllt sein, was man folgendermaßen sieht:

$$\begin{aligned} \left[S_i^+, S_i^-\right] &= 2S\left(\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1+\eta}{2}} b_i b_i^\dagger \left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1-\eta}{2}} - b_i^\dagger \left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1+\eta}{2}+\frac{1-\eta}{2}} b_i\right) \\ &= 2S\left(\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1+\eta}{2}} \left(b_i^\dagger b_i + \left[b_i, b_i^\dagger\right]\right)\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1-\eta}{2}} - b_i^\dagger \left(1 - \frac{n_i}{2S}\right) b_i\right) \\ &= 2S\left(n_i\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right) + 1 - \frac{n_i}{2S} - bi^\dagger b_i + \frac{b_i^\dagger n_i b_i}{2S}\right) \\ &= 2S\left(1 - \frac{n_i}{2S} - \frac{b_i^\dagger \left[b_i, b_i^\dagger\right] b_i}{2S}\right) \\ &= 2\left(S - n_i\right) = 2S_i^{\parallel}. \end{aligned} \tag{3.3}$$

Dabei haben wir (3.2) sowie die Kommutatoridentität zum Vertauschen operatorwertiger Funktionen[16] benutzt, die es uns erlaubt n_i an der Taylorreihe von $(1 - n_i/2S)^{(1\pm\eta)/2}$ vorbeizutauschen. Der Kommutator für verschiedene Plätze $i \neq j$ ist trivial, da alle Operatoren, die in der Taylor-Entwicklung auftauchen, vertauschbar sind. Somit folgt $\left[S_i^+, S_j^-\right] = 2\delta_{ij} S_i^{\parallel}$ falls wir auf bosonische Operatoren abbilden.

[16] Betrachtet man eine beliebige Funktion $f(x)$ einer reellen Variablen x, so gilt für das Analogon der über die entsprechende Taylor-Entwicklung definierten operatorwertigen Funktion $f(\hat{A})$ für den Kommutator $\left[f(\hat{A}), \hat{A}\right] = 0$, wie man sich mit der trivialen Identität $\left[\hat{A}, \hat{A}^n\right] = 0$ klar macht.

Die Vertauschungsrelation von $S_i^{\parallel}$ mit den Leiteroperatoren berechnet man mit ähnlichen Schritten wie folgt

$$\begin{aligned}\left[S_i^{\parallel}, S_i^{-}\right] &= \left[S - n_i, \sqrt{2S}\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1-\eta}{2}} b_i\right] = -\sqrt{2S}\left[n_i, \left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1-\eta}{2}} b_i\right] \\ &= -\sqrt{2S}\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1-\eta}{2}} [n_i, b_i] = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1-\eta}{2}} b_i = S_i^{-}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Wieder wurde der Besetzungszahloperator an der Taylor-Entwicklung der Wurzel vorbeikommutiert sowie der elementare Kommutator

$$[n_i, b_i] = b_i[b_i^{\dagger}, b_i] = -b_i$$

benutzt. Nun ist der entsprechende Kommutator mit dem Absteigeoperator trivial durch hermitesche Konjugation der Gleichung (3.4) zu erhalten, wenn man folgendes berücksichtigt:

$$S_i^{\parallel} = \left(S_i^{\parallel}\right)^{\dagger} \qquad \left[\hat{a}, \hat{b}\right]^{\dagger} = -\left[\hat{a}^{\dagger}, \hat{b}^{\dagger}\right]. \tag{3.5}$$

Für verschiedene Gitterplätze verschwindet der Kommutator wieder, so dass wir insgesamt die Spinalgebra (1.3) erfüllen. Damit bildet die Transformation (3.1) die Spinoperatoren, mit denen der Hamiltonoperator des Heisenberg-Modells dargestellt wird, auf ein Modell von (wechselwirkenden) Bosonen ab, dessen elementare Anregungen im $\boldsymbol{k}$-Raum die Spinwellen sind, wie wir später noch explizit herleiten werden.
Für den Operator $S_i^{\parallel}$ existiert (zusammen mit dem Operator $\boldsymbol{S}_i^2$) ein System von Eigenfunktionen mit den Eigenwerten $m_i = (-S, \ldots, S)$ in ganzzahligem Abstand (siehe (1.1)). Wie man anhand der Gleichung (3.1a) sieht, entspricht der Zustand ohne angeregtes Boson gerade dem Zustand mit dem höchsten Eigenwert S des Operators $S_i^{\parallel}$. Für jedes angeregte Boson, wird der Eigenwert von $S_i^{\parallel}$ gerade um eine Einheit erniedrigt (siehe Abbildung 8), so dass man bei $2S$ angeregten Bosonen gerade den Zustand mit minimalem Eigenwert erhält. Für eine mathematisch exakte Durchführung der Transformation muss der Fockraum der Bosonen auf gerade die $2S + 1$ Zustände pro Gitterplatz beschränkt werden (nicht-holonome Nebenbedingung). Durch diese Beschränkung des Fockraums [64] entstehen in der Formulierung der Theorie weitere Terme in der bosonischen Darstellung, die man gewöhnlich kinematische Wechselwirkung nennt. Für den Fall ferromagnetischer Kopplung wurde bereits gezeigt [42, 46], dass diese Wechselwirkungsterme für das Endergebnis keine Rolle spielen und somit vernachlässigt werden können, obwohl man prinzipiell zwischen idealen und realen Spinwellenzuständen unterscheiden muss. Daher ist es üblich zumindest bei Berechnungen bei tiefen Temperaturen die Nebenbedingung zu ignorieren [14]. Während diese Vereinfachung für den Ferromagneten bei tiefen Temperaturen einfach zu motivieren ist, da zumindest der Grundzustand und Ein-Magnonen-Zustände keinen Überlapp mit nicht-physikalischen Zuständen haben, enthalten die Spinwellenzustände des QAF nach der Diagonalisierung mittels Bogoliubov-Transformation (siehe Appendix C) explizit Anteile nichtphysikalischer Zustände. Es lässt sich jedoch zeigen, dass der Fehler in der Spinwellentheorie von der Ordnung $e^{-\alpha S}$ mit einer positiven Konstante α ist und somit die Entwicklung nach inversem Gesamtspin asymptotisch korrekt ist [5, 63].
Die Art und Weise wie die Leiteroperatoren auf Bosonen abgebildet werden ist aus der Transformation an sich nicht so einfach zu erkennen, man beachte jedoch dass die Gleichungen (3.8b) und (3.8c) nur gemäß der entsprechenden Taylor-Entwiklung der Wurzelfunktion definiert sind. Weiterhin ist anzumerken, dass man im klassischen Grenzwert $S \to \infty$ die Beschränkung des Fockraums der Bosonen wegfällt. Ebenso wird bei tiefen Temperaturen die Berechnung von Erwartungswerten gute Ergebnisse liefern, da dann gemäß Bose-Statistik nur niedrigliegende bosonische Zustände besetzt sind,somit die Beschränkung des Fockraumes keine Rolle mehr spielt und damit $n/2S$ der kleine Entwicklungsparameter ist. Elementare Bestimmung der Taylor-Entwicklung ergibt

$$f_\eta(x) = (1 - ax)^{\frac{1\pm\eta}{2}} = 1 - \frac{a}{2}(1 \pm \eta)\, x - \frac{a^2}{8}\left(1 + \eta^2\right) x^2 + \frac{a^3}{48}\left(-3 \pm \eta + 3\eta^2 \mp \eta^3\right) x^3 + \mathcal{O}(x^4). \tag{3.6}$$

Somit folgt für die Entwicklung der Wurzel nach inversen Potenzen des Gesamtspins (1/S Entwicklung):

$$\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right)^{\frac{1\pm\eta}{2}} = 1 - \frac{(1 \pm \eta)n_i}{4S} - \frac{(1 + \eta^2)n_i^2}{32S^2} - \frac{3 \mp \eta - 3\eta^2 \pm \eta^2}{384S^3} + \mathcal{O}(S^{-4}). \tag{3.7}$$

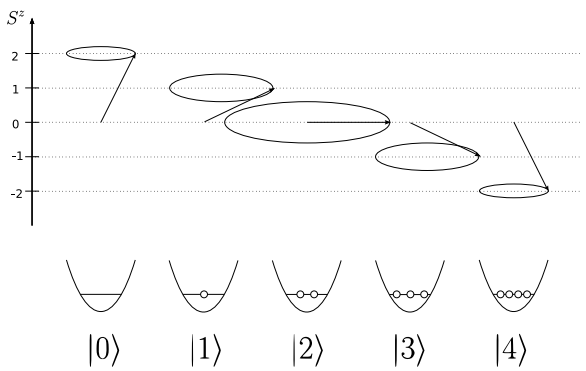

Abbildung 8: Abbildung des Spinoperators (hier $S = 2$) auf Bosonen gemäß (3.8a): Ganz links ist der Zustand mit niedrigster Energie dargestellt (angelegtes Magnetfeld für freie Spins, bzw. Minimierung der Energie aus der Austauschwechselwirkung), der in der bosonischen Sprache gerade der Vakuumzustand ist. Nach rechts nimmt die Anzahl der Bosonen gerade um eins zu und der Spinzustand hat jeweils eine um eine Einheit kleinere Projektion auf die z-Achse. Ganz rechts ist schließlich der Zustand mit minimalem $S^z = -2$, was gerade die Beschränkung der Bosonenzahl auf 4 bedeutet.

Setzt man nun diese Entwicklung in den Heisenberg-Hamiltonian ein und ordnet die entstehenden Terme nach Potenzen von 1/S (respektive Potenzen der Erzeuger bzw. Vernichter), so erhält man die bekannte 1/S-Entwicklung oder Spinwellenentwicklung (nach Transformation in den $\boldsymbol{k}$-Raum).

3.1.1 Holstein-Primakoff-Transformation

Für $\eta = 0$ ergibt sich aus (3.1) insbesondere die Holstein-Primakoff-Transformation [65]:

$$S_i^z = S_i^{\parallel} = S - n_i, \qquad n_i = b_i^\dagger b_i \tag{3.8a}$$

$$S_i^+ = \sqrt{2S}\sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}}\, b_i \tag{3.8b}$$

$$S_i^- = \left(S_i^+\right)^\dagger = \sqrt{2S} b_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}}. \tag{3.8c}$$

Diese bildet insbesondere die Eigenschaft der Hermizität der Aufsteigeoperatoren korrekt ab und erzeugt so einen hermiteschen Hamilton-Operator. Somit vereinfacht sich (3.7) zu

$$\sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}} \approx 1 - \frac{n_i}{4S} - \frac{n_i^2}{32S^2} - \frac{n_i^3}{128S^3} + O(S^{-4}). \tag{3.9}$$

3.1.2 Dyson-Maleev-Transformation

Es ist noch eine alternative Formulierung bekannt, die erstmals von Dyson [42] und Maleev [66] verwendet wurde und zu einem Hamilton-Operator führt, der nur Wechselwirkungen mit 4 Erzeugern/Vernichtern enthält und sich aus (3.1) für $\eta = 1$ ergibt. Die Transformation ist insofern exakt im Vergleich zur HP-Trafo, als man die Darstellung der Spinoperatoren nicht bei endlichen inversen Potenzen des Spins abbrechen muss. Um das Auftreten des 6-er Vertex im Hamiltonian zu vermeiden, benötigt man für die Untergitter des Quanten-Antiferromagneten (QAF) zwei unterschiedliche Transformationen und handelt sich gleichzeitig einen nicht-hermiteschen Hamiltonoperator ein. Zunächst einmal die Definition der Transformation für den Antiferromagneten [17]

[17] Für den Ferromagneten benutzt man gewöhnlich die Transformation auf einem der beiden Untergitter, da nur kombinierte Terme von Aufsteige und Absteigeoperatoren bei der Entwicklung um den ferromagnetischen Grundzustand (Koordinatensystem durch (4.54a) gegeben) auftreten. Die identische Transformation auf beiden Untergittern hat im Falle

A-Untergitter	$S_i^{\parallel} = S - n_i, \qquad n_i = b_i^\dagger b_i$ $S_i^+ = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{n_i}{2S}\right) b_i$ $S_i^- = \sqrt{2S} b_i^\dagger$	(3.10a)
B-Untergitter	$S_j^{\parallel} = S - n_j, \qquad n_j = b_j^\dagger b_j$ $S_j^+ = \sqrt{2S} b_j$ $S_j^- = \sqrt{2S} b_j^\dagger \left(1 - \frac{n_j}{2S}\right).$	(3.10b)

Die Spinoperatoren in der Dyson-Maleev-Transformation erfüllt die Identitäten

$$S_{i,A}^{\parallel} = S_{i,B}^{\parallel} = \left(S_{i,B}^{\parallel}\right)^\dagger, \quad S_{i,A}^{+} = \left(S_{i,B}^{-}\right)^\dagger, \quad S_{i,A}^{-} = \left(S_{i,B}^{+}\right)^\dagger. \tag{3.11}$$

Der zusätzliche Index bezeichnet das entsprechende Untergitter; man beachte jedoch, dass ein Gitterplatz i immer entweder zum A-Untergitter oder zum B-Untergitter gehört und diese obigen Gleichungen nur symbolisch gelten.
Wie wir später sehen werden, ergibt die Parametrisierung mit der DM-Transformation einfachere Terme, mit denen sich die entsprechenden Ausdrücke für die Holstein-Primakoff-Transformation darstellen lassen. Weiterhin werden wir sehen, dass man mit beiden hier vorgestellten Transformationen die gleichen physikalischen Ergebnisse erhält, so dass auch die DM-Transformation eine korrekte Herangehensweise an den nicht diagonalisierbaren Heisenberg-Hamiltonian darstellt, obwohl in der DM-Transformation offensichtlich die Identität $S_i^+ = \left(S_i^-\right)^\dagger$ nicht erfüllt ist und sich daher ein nicht-hermitescher Hamiltonian ergibt. Wahrscheinlichkeitsdichte geht aber dennoch nicht verloren, da die Antihermizität für beide Untergitter in gleicher Weise gilt und hermitesches Konjugieren der Operatoren prinzipiell nur die Rolle der Untergitter vertauscht, die in den hier betrachteten Modellen ohnehin gleichwertig sind.

3.1.3 Schwinger-Bosonen

Ein etwas anderer Ansatz besteht in der Abbildung der Spin-Matrizen auf 2 harmonische Oszillatoren, den so genannten Schwinger-Bosonen [12]. Dazu betrachten wir pro Gitterplatz einen 2-komponentigen Spinor [26]

$$a^\dagger = \left(a_1^\dagger, a_2^\dagger\right) \tag{3.12a}$$

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{3.12b}$$

der bosonische Operatoren mit der üblichen Algebra $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$ enthält und bilden den Spinoperator wie folgt ab:

$$\boldsymbol{S} = a^\dagger \boldsymbol{\sigma} a \tag{3.13}$$

mit den Pauli-Matrizen [25]. Komponentenweise lässt sich das umschreiben zu

$$S^z = a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2 \tag{3.14a}$$

$$S^+ = a_1^\dagger a_2 \tag{3.14b}$$

$$S^- = a_2^\dagger a_1. \tag{3.14c}$$

Damit erhöht die Erzeugung eines Teilchens 1 die z-Komponente des Spins um 1/2, während die Erzeugung eines Teilchens 2 die z-Komponente um 1/2 vermindert. Auch dies ist eine Darstellung der Spinoperatoren zu beliebigen Gesamtspin durch bosonische Operatoren. Abschließend möchte ich noch kurz den Zusammenhang mit der Holstein-Primakoff bzw. Dyson-Maleev-Darstellung erwähnen. Die Darstellung (3.14a) enthält noch keine Fixierung des Gesamtspins. Dazu müssen wir die Bosonen vom Typ 1 und 2 mit

$$a_2^\dagger a_2 = \sqrt{a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_1}^{\,2} = \sqrt{2\hat{S} - a_1^\dagger a_1}^{\,2} \tag{3.15}$$

des QAF den Nachteil von Termen, die insgesamt 6 bosonische Operatoren enthalten. Obwohl es auch Arbeiten in dieser Parametrisierung [21] gibt, wird hier nicht weiter darauf eingegangen.

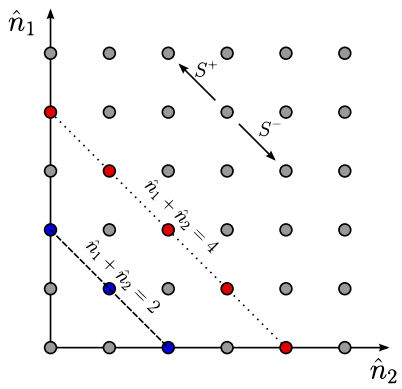

Abbildung 9: Darstellung des Hilbertraumes der Schwinger-Bosonen durch diskrete Punkte: Für festen Gesamtspin sind die erlaubten Zustände im Schwinger-Bosonen-Formalismus auf Geraden mit fester Gesamtzahl der Bosonen vom Typ 1 und Typ 2 (gestrichelte Linie: S=1, gepunktete Linie S=2). Die Stufenoperatoren vermitteln Sprünge entlang der Diagonalen.

koppeln, (siehe Abbildung 9) wobei wir den Operator des Gesamtspins

$$\hat{S} = \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2) \tag{3.16}$$

mit den üblichen Eigenwerten $S = 0, 1/2, 1...$ eingeführt haben. Für festen Gesamtspin ersetzen wir den Operator $\hat{S}$ durch den entsprechenden Eigenwert und erhalten

$$a_2^\dagger a_2 = \sqrt{2S - a_1^\dagger a_1}^2 . \tag{3.17}$$

Für diagonale Typ 2 Operatoren $a_2^\dagger = a_2$ folgt dann die Holstein-Primakoff-Darstellung (3.8) mit

$$a_2 = \sqrt{2S}\sqrt{1 - \frac{a_1^\dagger a_1}{2S}}. \tag{3.18}$$

Setzt man dagegen

$$a_2 = 1 - \frac{a_1^\dagger a_1}{2S} \qquad a_2^\dagger = 1, \tag{3.19}$$

so ergibt sich die Dyson-Maleev-Parametrisierung (3.10). Am Ende sei noch auf eine Vielzahl anderer Bosonisierungstechniken z.B. [67] hingewiesen, die man in Standardliteratur zum Magnetismus [26, 51, 68] findet.

3.2 Quanten Nichtlineares σ-Modell

Das Problem des Quantenantiferromagneten kann man auch mit einer effektiven Feldtheorie beschrieben werden, die im Prinzip auch beliebige Kopplungen (nicht nur Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen) berücksichtigen kann. Die explizite mikroskopische Herleitung aus dem Heisenberg-Modell beruht auf der Annahme quasiklassischen Verhaltens für $S \to \infty$ [69] und der Berücksichtigung niederenergetischer Anregungen (siehe auch [70, 71]). Der Ordnungsparameter, die Untergittermagnetisierung M_s, wird durch einen von Ort und Zeit abhängigen Einheitsvektor

$$\mathbf{\Omega}(\boldsymbol{r}, \tau) \tag{3.20}$$

mit $O(3)$-Symmetrie repräsentiert. Die Berechnung der Zustandssumme erfolgt über ein Funktionalintegral [72]

$$Z[\mathbf{\Omega}] = \int \mathcal{D}[\mathbf{\Omega}]\delta(|\mathbf{\Omega}| - 1)e^{-S_{\text{eff}}[\mathbf{\Omega}]} \tag{3.21}$$

mit der effektiven Wirkung [11, 6, 73]

$$\boxed{S_{\text{eff}}[\mathbf{\Omega}] = \frac{\rho_s^0}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D \boldsymbol{r} \left[\left| \sum_{i=1}^{D} \partial_i \mathbf{\Omega} \right|^2 + \frac{1}{c_0^2} \left| \partial_\tau \mathbf{\Omega} \right|^2 \right].} \tag{3.22}$$

Darin geht als Parameter die Spin-Steifigkeit ρ_s^0, die die Änderung der Energie beim Drehen des Spins aus dem Grundzustand angibt [63], sowie die Spinwellengeschwindigkeit c_0 ein, die im Falle des Quantenantiferromagneten mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung die Werte [51]

$$\rho_s^0 = JS^2 a^{2-D} \tag{3.23a}$$

$$c_0 = \tilde{J}_0 Sa\sqrt{D} \tag{3.23b}$$

haben. Durch Einführung zweier Kopplungskonstanten [11]

$$t = \frac{T}{\rho_0^s} \tag{3.24a}$$

$$g = \frac{c_0}{\rho_0^s} \sim \frac{1}{S}, \tag{3.24b}$$

die klassisches Verhalten und Quantenverhalten beschreiben, lässt sich das Modell untersuchen und in 3 verschiedene Regimes unterteilen. Die entsprechende Einteilung erfolgt über die Berechnung der kritischen Spinsteifigkeit ρ_s^c für das konkrete magnetische Modell und den Vergleich mit der Spinsteifigkeit ρ_s^0.

1. Geordnete Phase $\rho_s^0 > \rho_s^c$
   Der Magnet hat bei $T = 0$ einen endlichen Ordnungsparameter. Bei tiefen Temperaturen hat die Spin-Spin-Korrelationslänge in $D = 2$ die exponentielle Abhängigkeit wie die des klassischen Heisenberg-Modells [74]. Eine Realisierung hierfür ist der QAF mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung für beliebigen Spin, bei dem der Ordnungsparameter zwar Quantenkorrekturen enthält (siehe (2.35)), die Ordnung aber durch Spinwellen nicht zerstört wird.

2. Ungeordnete Phase $\rho_s^0 < \rho_s^c$
   Es liegt keine makroskopische magnetische Ordnung vor, da die Quantenfluktuationen zu groß sind, und die Spinkorrelationslänge folgt einem temperaturabhängigen Potenzgesetz.

3. Quantenkritische Phase $\left|\rho_s^0 - \rho_s^c\right| \approx T$
   Physikalische Eigenschaften des Heisenberg-Antiferromagneten werden durch die relative Temperatur bestimmt und die Spinkorrelationslänge ist umgekehrt proportional zur Temperatur.

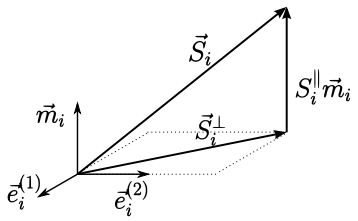

Abbildung 10: Zerlegung des Spinoperators in transversale und longitudinale Anteile gemäß der Wahl des lokalen Koordinatensystems (4.7).

4 Modellsysteme

4.1 Heisenberg Quantenantiferromagnet mit Anisotropie

Ausgangspunkt der ersten Problemstellung ist der Heisenberg-Hamiltonian (1.34), zu dem ein zusätzlicher Anisotropieterm addiert wird, so dass wir nun

$$\boxed{\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j + \frac{1}{2}\sum_{ij} I_{ij} S_i^z S_j^z} \tag{4.1}$$

mit dem Spinoperator $\boldsymbol{S}$ zum Gesamtspin S mit $\boldsymbol{S}^2 = S(S+1)$ haben, wie schon in Abschnitt 1.3.1 eingeführt. Die Summe in unserem Hamilton-Operator im Ortsraum erstreckt sich über alle Gitterplätze i, j unseres Festkörpers. Man beachte, dass der Vorfaktor $1/2$ Konvention ist; in der Literatur findet man häufig auch die alternative Darstellung ohne Vorfaktor, bei der dann die Summen über i und j nicht mehr unabhängig sind $\sum_{i<j} \ldots$. Wir haben keine Selbstwechselwirkung, d.h. die Kopplung verschwindet für gleiche Indizes

$$J_{ii} = 0. \tag{4.2}$$

4.1.1 Vorbereitungen: Definition eines sphärischen Koordinatensystems

Mit dem klassischen Grundzustand (siehe Seite 15) können wir auf den Untergittern ein Koordinatensystem wie folgt definieren: Zunächst ist der Einheitsvektor $\boldsymbol{m}_i$ durch den Erwartungswert des Spins festgelegt:

$$\langle \boldsymbol{S}_i \rangle = |\langle \boldsymbol{S}_i \rangle| \, \boldsymbol{m}_i. \tag{4.3}$$

Für unseren QAF mit Anisotropie sieht man sofort, dass der Erwartungswert im klassischen Grundzustand dann

$$\boldsymbol{m}_i = \begin{cases} \boldsymbol{e}_z & \text{A-Untergitter} \\ -\boldsymbol{e}_z & \text{B-Untergitter} \end{cases} \tag{4.4}$$

ergibt und wir ein lokales rechtshändiges Orthonormalsystem $\{\boldsymbol{e}_i^{(1)}, \boldsymbol{e}_i^{(2)}, \boldsymbol{m}_i\}$ an jedem Gitterplatz mit den Bedingungen

$$\boldsymbol{e}_i^{(1)} \times \boldsymbol{e}_i^{(2)} = \boldsymbol{m}_i \tag{4.5a}$$

$$\boldsymbol{e}_i^{(1)} \cdot \boldsymbol{e}_i^{(2)} = \boldsymbol{e}_i^{(1)} \cdot \boldsymbol{m}_i = \boldsymbol{e}_i^{(2)} \cdot \boldsymbol{m}_i = 0 \tag{4.5b}$$

$$\boldsymbol{e}_i^{(1)^2} = \boldsymbol{e}_i^{(2)^2} = \boldsymbol{m}_i^2 = 1 \tag{4.5c}$$

definieren können. Weiterhin gehen wir in eine so genannte sphärische Basis mit der Definition

$$\boldsymbol{e}_i^{\pm} = \boldsymbol{e}_i^{(1)} \pm i\boldsymbol{e}_i^{(2)} \Leftrightarrow \begin{array}{l} \boldsymbol{e}_i^{(1)} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{e}_i^{+} + \boldsymbol{e}_i^{-}\right) \\ \boldsymbol{e}_i^{(2)} = \frac{1}{2i}\left(\boldsymbol{e}_i^{+} - \boldsymbol{e}_i^{-}\right) \end{array} \tag{4.6}$$

über, die es uns nun erlaubt die Spinoperatoren an jedem Gitterplatz wie folgt zu zerlegen (vgl. Abbildung 10).

$$\boldsymbol{S}_i = S_i^{\parallel}\boldsymbol{m}_i + \boldsymbol{S}_i^{\perp} = S_i\boldsymbol{m}_i + S_i^{(1)}\boldsymbol{e}_i^{(1)} + S_i^{(2)}\boldsymbol{e}_i^{(2)} \tag{4.7}$$

Mit der Definition der Leiteroperatoren

$$S_i^{\pm} = S_i^{(1)} \pm i S_i^{(2)} \tag{4.8}$$

folgt dann zusammen mit (4.6)

$$\boldsymbol{S}_i = S_i^{\parallel} \boldsymbol{m}_i + \frac{1}{2} \sum_{p=\pm} S_i^{-p} \boldsymbol{e}_i^p. \tag{4.9}$$

Setzen wir die Definition der sphärischen Basis zusammen mit der Transformation der parallelen Komponente des Spins $S_i^{\parallel}$ in den Modellhamiltonian (4.1) ein, so folgt:

$$\begin{aligned} H &= E_{\mathrm{cl}} + H_2^{\parallel} + H_4^{\parallel} + H^{\perp} && \text{(4.10a)} \\ H_2^{\parallel} &= -\frac{S}{2} \sum_{ij} (J_{ij} + I_{ij}) (n_i + n_j) \boldsymbol{m}_i \cdot \boldsymbol{m}_j && \text{(4.10b)} \\ H_4^{\parallel} &= \frac{1}{2} \sum_{ij} (J_{ij} + I_{ij}) n_i n_j \boldsymbol{m}_i \cdot \boldsymbol{m}_j && \text{(4.10c)} \\ H^{\perp} &= \frac{1}{8} \sum_{ij} J_{ij} \sum_{p,p'=\pm} S_i^{-p} S_j^{-p'} \boldsymbol{e}_i^p \cdot \boldsymbol{e}_j^{p'}. && \text{(4.10d)} \end{aligned}$$

Dabei entspricht E_{cl} der Energie des schon betrachteten klassischen Grundzustands (2.7) (siehe Abbildung 4). Die parallelen Terme $H_2^{\parallel}$ und $H_4^{\parallel}$ geben die Wechselwirkung der Spins in paralleler Richtung wieder: Sind keine Bosonen angeregt „$n_i = 0$“ (siehe Abbildung 8), so ergibt sich kein Beitrag, da die Spins exakt (Anti-)Parallel sind und somit ihre Energie minimiert haben. Für angeregte Bosonen führt $H_2^{\parallel}$ zu einer Energieerhöhung (beachte (4.14a)). Dagegen stellt $H^{\perp}$ die Wechselwirkung der Komponenten des Spins senkrecht zur Quantisierungsachse (hier: z-Achse) dar und berücksichtigt über (1.2) die Terme aus den Aufsteige- und Absteigeoperatoren. Im Allgemeinen gilt $H_n = \mathcal{O}(S^{2-n/2})$,[18] d.h. anhand der Anzahl der auftretenden bosonischen Erzeuger bzw. Vernichter kann man auch die Potenz des Spins gemäß einer $1/S$-Entwicklung ablesen. Für die Entwicklung der Spinoperatoren nach Fluktuationen um den klassischen Grundzustand müssen wir das Koordinatensystem gemäß des klassischen Grundzustandes wählen, was die lokale z-Achse festlegt. Wegen der Rotationssymmetrie um die leichte Achse können wir die beiden anderen Einheitsvektoren noch wie folgt wählen:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_i^{(1)} &= \boldsymbol{e}_y && \text{(4.11a)} \\ \boldsymbol{e}_i^{(2)} &= -\zeta_i \boldsymbol{e}_x && \text{(4.11b)} \\ \boldsymbol{m}_i &= \zeta_i \boldsymbol{e}_z && \text{(4.11c)} \end{aligned}$$

mit der Definition

$$\zeta_i = \begin{cases} 1 & \text{A-Untergitter} \\ -1 & \text{B-Untergitter} \end{cases} \tag{4.12}$$

Damit sind die sphärischen Einheitsvektoren als (4.6)

$$\boldsymbol{e}_i^{\pm} = \boldsymbol{e}_y \mp \zeta_i i \boldsymbol{e}_x \tag{4.13}$$

geschrieben. Mit der Annahme der ausschließlichen Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn, brauchen wir die dementsprechenden Skalarprodukte für $i = j \pm 1$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{m}_i \cdot \boldsymbol{m}_j &= -1 && \text{(4.14a)} \\ \boldsymbol{e}_i^p \cdot \boldsymbol{e}_j^{p'} &= 2\delta_{p,p'}. && \text{(4.14b)} \end{aligned}$$

Dadurch sind die Beiträge (2.7) (4.10b) und (4.10c) negativ und (4.10d) wird zu

$$H^{\perp} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left(S_i^+ S_j^+ + S_i^- S_j^- \right). \tag{4.15}$$

[18] Wir werden später abweichend von dieser Konvention der Benennung der Terme des Hamilton-Operators Beiträge der Normalordnung berücksichtigen, so dass diese Zuordnung nur für die höchste Ordnung im inversen Gesamtspin gilt (siehe auch Appendix A).

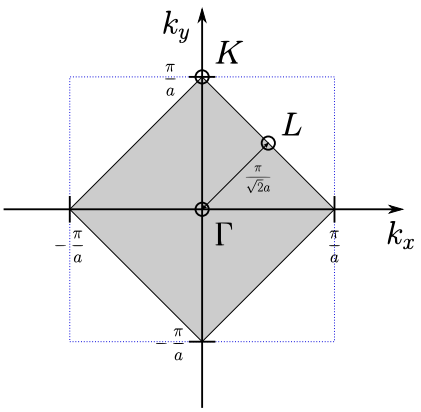

Abbildung 11: Die reduzierte Brillouin-Zone des Antiferromagneten in $D = 2$ (grau unterlegt) hat genau die halbe Fläche der vollen Brillouin-Zone (gestrichelt umrandet). K und L sind ausgezeichneten Punkte mit hoher Symmetrie, Γ der Zonenursprung.

4.1.2 Bosonisierung

Holstein-Primakoff-Transformation Mit der Entwicklung der Spinoperatoren in der HP-Darstellung (3.9) findet man den hermiteschen Operator:

$$H^{\perp} = H_2^{\perp} + H_4^{\perp} + O(1/S) \tag{4.16a}$$

$$H_2^{\perp} = \frac{S}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left(b_i b_j + b_i^{\dagger} b_j^{\dagger} \right) \tag{4.16b}$$

$$H_4^{\perp} = -\frac{1}{8} \sum_{ij} J_{ij} \left(b_i^{\dagger} b_i b_i b_i + b_i b_j^{\dagger} b_j b_j + b_i^{\dagger} b_i^{\dagger} b_i b_j^{\dagger} + b_i^{\dagger} b_j^{\dagger} b_j^{\dagger} b_j \right). \tag{4.16c}$$

Dyson-Maleev Transformation Die Parametrisierung nach Dyson-Maleev ergibt bei Berücksichtigung von NN-Wechselwirkungen einen ähnlichen Hamiltonian, wenn man (3.10) einsetzt:

$$H^{\perp DM} = H_2^{\perp} + H_4^{\perp DM} \tag{4.17a}$$

$$H_4^{\perp DM} = -\frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \left(b_i b_j^{\dagger} b_j b_j + b_i^{\dagger} b_i^{\dagger} b_i b_j^{\dagger} \right). \tag{4.17b}$$

Man beachte, dass $H_4^{\perp DM}$ nicht hermitesch ist.

$$\left(H_4^{\perp DM} \right)^{\dagger} = -\frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} \left(b_j^{\dagger} b_j^{\dagger} b_j b_i^{\dagger} + b_j b_i^{\dagger} b_i b_i \right) \tag{4.18}$$

Allerdings vertauschen beim hermitesch Konjugieren lediglich die Untergitter ihre Rolle. Für den senkrechten Anteil des Holstein-Primakoff-Hamiltonians in 2. Ordnung (4.16a) gilt weiterhin

$$H_4^{\perp} = \frac{1}{2} \left[H_4^{\perp DM} + \left(H_4^{\perp DM} \right)^{\dagger} \right]. \tag{4.19}$$

4.1.3 Fourier-Transformation

Damit zumindest der quadratische Anteil des Hamilton-Operators diagonalisierbar wird, müssen wir die Symmetrie des Gitters ausnutzen und eine diskrete Fourier-Transformation durchführen. Für den Antiferromagneten besteht die Einheitszelle mit voller Symmetrie[19] des kubischen Gitters aus 2 Gitterplätzen (siehe Abbildung 12). Daher müssen wir eine Fourier-Transformation mit reduzierter Brillouin-Zone

[19] Mit der Symmetrie ist hier die Gittersymmetrie als auch Symmetrie des Quantenzustands. Dies ist hier zu beachten, da wir im klassischen Grundzustand nur eine Elementarzelle konstruieren können, wenn diese mindestens 2 Gitterplätze beinhaltet, an denen die Spins entgegengesetzt ausgerichtet sind.

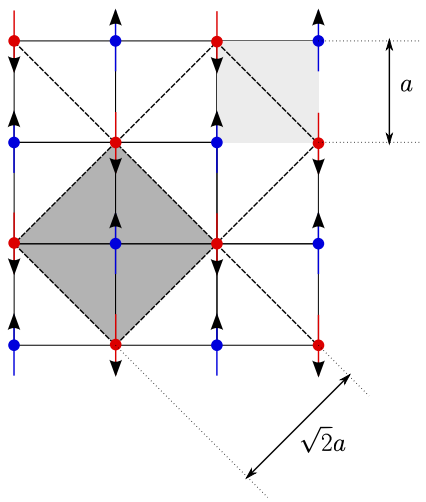

Abbildung 12: Quadratgitter des Quantenantiferromagneten in $D = 2$: Die Elementarzelle mit der Gitterkonstanten a (rechts oben, hellgrau unterlegt) hat zwar die volle Gittersymmetrie, jedoch erfüllt sie nicht mehr die Translationsinvarianz im klassischen Grundzustand und hat auch nicht die volle Symmetrie des quantenmechanischen Grundzustands. Dagegen zeigt die größere antiferromagnetische Elementarzelle mit Gitterkonstante $\sqrt{2}a$ (dunkelgrau unterlegt) die volle Translationssymmetrie.

durchführen, was der größeren Einheitszelle des Antiferromagneten mit Symmetrie des klassischen Grundzustandes im Ortsraum entspricht (siehe Abbildung 11). Wir definieren dazu

$$b_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} A_{\boldsymbol{k}} \qquad \text{A-Untergitter} \tag{4.20a}$$

$$b_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} B_{\boldsymbol{k}} \qquad \text{B-Untergitter.} \tag{4.20b}$$

Die Operatoren im $\boldsymbol{k}$-Raum erfüllen nun die Vertauschungsrelationen

$$\left[A_{\boldsymbol{k}}, A^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\right] = \left[B_{\boldsymbol{k}}, B^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\right] = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}. \tag{4.21}$$

Alle anderen bosonischen Erzeuger/Vernichter vertauschen wie im Ortsraum. Mit der Vereinfachung (2.6) können wir die Fouriertransformierte (B.11) der Spinwechselwirkung als $\tilde{J}_{\boldsymbol{k}} = \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} \tilde{J}_0$ schreiben. Dabei ist $\tilde{J}_0 = 2DJ$ für das einfach kubische Gitter. Analoges folgt für die Fourier-Transformation der Anisotropiewechselwirkung I_{ij}. Mit der Identität

$$\sum_{\boldsymbol{r}_i} e^{\pm i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}_i} = N\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{4.22}$$

lässt sich der Hamilton-Operator (4.10a) mit (4.16a) bzw. (4.17a) umformen zu

$$H = E_{cl} + H_2 + H_4^{\parallel} + H_4^{\perp} \quad \text{(Holstein-Primakoff)} \tag{4.23a}$$

$$H = E_{cl} + H_2 + H_4^{\parallel} + H_4^{\perp\mathrm{DM}} \quad \text{(Dyson-Maleev),} \tag{4.23b}$$

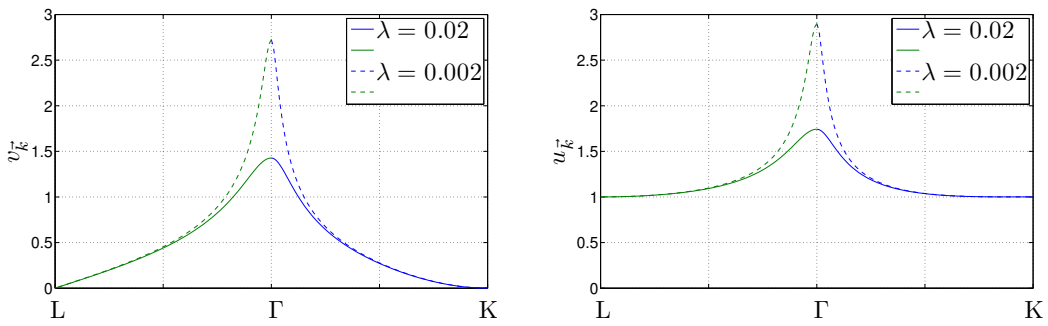

Abbildung 13: Bogoliubov-Koeffizienten gemäß (C.11) für die Diagonalisierung von (4.23a) in $D = 2$: Für nicht-verschwindende Anisotropie $\lambda \neq 0$ sind die Koeffizienten für alle Wellenvektoren $\boldsymbol{k}$ endlich.

mit

$$H_2 = H_2^{\parallel} + H_2^{\perp} \tag{4.24a}$$

$$H_2^{\parallel} = S\tilde{J}_0\,(1+\lambda) \sum_{\boldsymbol{k}} \left(A_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} A_{\boldsymbol{k}} + B_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} B_{\boldsymbol{k}} \right) \tag{4.24b}$$

$$H_2^{\perp} = S\tilde{J}_0 \sum_{\boldsymbol{k}} \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} \left(A_{\boldsymbol{k}} B_{-\boldsymbol{k}} + A_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} B_{-\boldsymbol{k}}^{\dagger} \right) \tag{4.24c}$$

$$H_4^{\parallel} = \frac{2\tilde{J}_0}{N}\,(1+\lambda) \sum_{\substack{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}' \\ \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'}} \delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}',0}\, \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'}\, A_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} A_{-\boldsymbol{k}'} B_{\boldsymbol{q}}^{\dagger} B_{-\boldsymbol{q}'} \tag{4.24d}$$

$$H_4^{\perp \mathrm{DM}} = -\frac{\tilde{J}_0}{N} \sum_{\substack{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}' \\ \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'}} \delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}',0} \left(\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{q}'} B_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} B_{\boldsymbol{k}'}^{\dagger} B_{-\boldsymbol{q}} A_{\boldsymbol{q}'}^{\dagger} + \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} B_{-\boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'}^{\dagger} A_{-\boldsymbol{q}} A_{-\boldsymbol{q}'} \right) \tag{4.24e}$$

$$H_4^{\perp} = -\frac{\tilde{J}_0}{N} \sum_{\substack{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}' \\ \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'}} \delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}',0} \left[\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{q}'} \left(B_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} B_{\boldsymbol{k}'}^{\dagger} B_{-\boldsymbol{q}} A_{\boldsymbol{q}'}^{\dagger} + A_{\boldsymbol{q}'} B_{-\boldsymbol{q}}^{\dagger} B_{\boldsymbol{k}'} B_{\boldsymbol{k}} \right) + \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} \left(B_{\boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}'}^{\dagger} A_{-\boldsymbol{q}} A_{-\boldsymbol{q}'} + A_{-\boldsymbol{q}'}^{\dagger} A_{-\boldsymbol{q}}^{\dagger} A_{\boldsymbol{k}'} B_{-\boldsymbol{k}}^{\dagger} \right) \right]. \tag{4.24f}$$

Die prinzipielle Bedeutung der Terme im $\boldsymbol{k}$-Raum entspricht dabei im Wesentlichen der Terme im Ortsraum (4.10), wobei jetzt der explizit nicht-diagonale Term $H_2^{\perp}$ sichtbar wird, der das klassische Modell vom Quantenmodell unterscheidet. Weiterhin beachte man mit (B.15), dass die Wechselwirkung für kleine Impulsüberträge nicht verschwindet. Die Anisotropie wurde dabei in Form des kleinen Parameters

$$\boxed{\lambda = \frac{\tilde{I}_0}{\tilde{J}_0}} \tag{4.25}$$

ausgedrückt.

4.1.4 Diagonalisierung: Bogoliubov-Transformation

Wie in Appendix C beschrieben, lässt sich zumindest der quadratische Anteil von (4.23a) mittels einer unitären Transformation diagonalisieren. Vergleichen wir (4.24c) mit (C.1) aus dem Appendix und setzen in (C.2) $f_{\boldsymbol{k}} = S\tilde{J}_0(1+\lambda)$ sowie $g_{\boldsymbol{k}} = S\tilde{J}_0\tilde{\gamma}_k$, so ergibt sich unmittelbar der diagonalisierte Hamiltonian

$$H_2 = \sum_{\boldsymbol{k}} \left[E_{\boldsymbol{k}} \left(\alpha_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta_{-\boldsymbol{k}}^{\dagger} \beta_{-\boldsymbol{k}} + 1 \right) - (1+\lambda)\,\tilde{J}_0 S \right] \tag{4.26}$$

mit der Dispersionsrelation

$$\boxed{E_{\boldsymbol{k}} = \tilde{J}_0 S \sqrt{(1+\lambda)^2 - \gamma_{\boldsymbol{k}}^2}.} \tag{4.27}$$

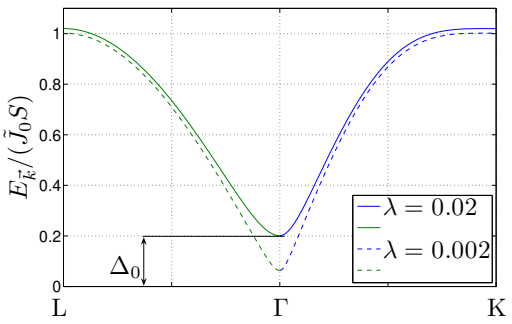

Abbildung 14: Spinwellen-Dispersionsrelation des Antiferromagneten mit Anisotropie: für kleine Wellenlängen liegt eine quadratische Dispersion mit Anregungslücke gemäß (4.30) vor, die dann in einen linearen Bereich übergeht und schließlich wegen der Gittereffekte flacher wird. Darstellung entlang von Geraden mit hoher Symmetrie (siehe Abbildung 11).

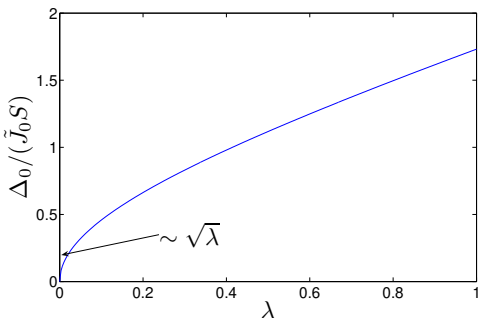

Abbildung 15: Zusammenhang zwischen der Anregungslücke Δ_0 und dem Anisotropieparameter λ gemäß (4.29b)

Mit der Entwicklung (B.15) des Strukturfaktors ergibt sich

$$E_{\boldsymbol{k}} \approx \tilde{J}_0 S\sqrt{2\lambda+\lambda^2+\frac{\boldsymbol{k}^2a^2}{D}} = c_0\sqrt{\frac{\Delta_0^2}{c_0^2}+\boldsymbol{k}^2} = c_0\kappa(\boldsymbol{k},\lambda) \tag{4.28}$$

mit der Spinwellengeschwindigkeit c_0 und der Anregungslücke Δ_0

$$c_0 = \frac{\tilde{J}_0 S a}{\sqrt{D}} \tag{4.29a}$$

$$\Delta_0 = c_0\frac{\sqrt{2D}}{a}\sqrt{2\lambda+\lambda^2} = \tilde{J}_0 S\sqrt{(1+\lambda)^2-1}. \tag{4.29b}$$

Ohne Anisotropie ($\lambda = 0$) handelt es sich um eine lineare Dispersion mit $E_{\boldsymbol{k}} = c_0\,|\boldsymbol{k}|$, während man mit Anisotropie eine Anregungslücke Δ_0 hat und die Dispersion für kleine Wellenvektoren $\boldsymbol{k}$ quadratisch ist, wie man mittels Taylor-Entwicklung von $\kappa(\boldsymbol{k},\lambda)$ leicht sieht:

$$E_{\boldsymbol{k}} = \Delta_0\left(1+\frac{c_0^2}{2\Delta_0^2}\boldsymbol{k}^2\right). \tag{4.30}$$

Alternative Transformation Der oben beschriebene Weg liefert zwar für unser Modellsystem einen diagonialisierten Hamilton-Operator, funktioniert aber nicht bei Anwesenheit eines Magnetfeldes (vgl. Seite 39). Daher gehen wir hier einen etwas anderen Weg, indem wir zunächst Linearkombinationen der ursprünglichen Operatoren im $\boldsymbol{k}$-Raum bilden und anschließend diagonalisieren. Damit wird es möglich sein, die Terme im Hamiltonian durch die Spinoperatoren im $\boldsymbol{k}$-Raum auszudrücken und später mit Messgrößen in Verbindung zu bringen. Zunächst definieren wir die bosonischen Erzeuger bzw. Vernichter

$$c_{\boldsymbol{k}\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(A_{\boldsymbol{k}} \pm B_{\boldsymbol{k}}\right). \tag{4.31}$$

Die Linearkombination ändert die Kommutatoren (4.21) nicht, ebenso behält der Hamiltonian die Form (C.1), so dass wir die Transformation gemäß (C.3) durchführen können, die nun folgendermaßen aussieht ($\sigma = \pm$):

$$\begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\boldsymbol{k}} & -\sigma v_{\boldsymbol{k}} \\ -\sigma v_{\boldsymbol{k}} & u_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ \psi^\dagger_{-\boldsymbol{k}\sigma} \end{pmatrix}. \tag{4.32}$$

Kanonische Kommutatorrelationen der neuen Operatoren

$$\left[\psi_{\boldsymbol{k}\sigma}, \psi^\dagger_{\boldsymbol{k}'\sigma'}\right] = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{4.33}$$

garantieren die Unitarität der Transformation und man erhält ein mit (C.6) vergleichbares Ergebnis. Die Vorgehensweise ist äquivalent zur Bogoliubov-Transformation mit anschließender Linerarkombination der Magnonenfreiheitsgrade, da alle Transformationen eindeutig umkehrbar sind, so dass wir folgende Identität zeigen können:

$$\psi_{\boldsymbol{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_{\boldsymbol{k}} + \sigma\beta_{\boldsymbol{k}}\right) \Leftrightarrow \begin{array}{rcl} \alpha_{\boldsymbol{k}} & = & \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{\boldsymbol{k}+} + \psi_{\boldsymbol{k}-}\right) \\ \beta_{\boldsymbol{k}} & = & \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{\boldsymbol{k}+} - \psi_{\boldsymbol{k}-}\right). \end{array} \tag{4.34}$$

Nach kurzer Rechnung haben wir auch den quadratischen Hamiltonian durch die Operatoren $\psi_{\boldsymbol{k}\pm}$ ausgedrückt:

$$H_2 = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\left[E_{\boldsymbol{k}}\left(\psi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\psi_{\boldsymbol{k}\sigma} + \frac{1}{2}\right) - \frac{\tilde{J}_0 S}{2}\left(1+\lambda\right)\right]. \tag{4.35}$$

Im Wesentlichen bleiben die Ergebnisse für H_2 auch für ein Modell des Quantenantiferromagneten im Magnetfeld gleich und sind under Vernachlässigung der konstanten Energieverschiebung gleich[20]

$$H_2 = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} E_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(\psi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\psi_{\boldsymbol{k}\sigma} + \frac{1}{2}\right). \tag{4.36}$$

4.2 Heisenberg QAF im Magnetfeld

4.2.1 Darstellung in gekippter Basis

Im Magnetfeld $\boldsymbol{h} = h\boldsymbol{e}_z$ erhält man zum Heisenberg-Modell (4.1) einen zusätzlichen Zeemanterm:

$$\boxed{H = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j - h\sum_i S^z_i + \frac{1}{2}\sum_{ij} I_{ij} S^z_i S^z_j}. \tag{4.37}$$

Da der klassische Grundzustand (siehe Seite 16) nun nicht mehr ein Zustand mit maximaler Untergittermagnetisierung ist, sondern die Spins etwas in Richtung des Magnetfeldes kippen, müssen wir unser Koordinatensystem etwas anders wählen, um die korrekte Entwicklung nach Fluktuationen um den klassischen Grundzustand durchzuführen. Wie im vorherigen Abschnitt formulieren wir den Modellhamiltonian (4.53) in einem an jedem Gitterplatz lokalem Koordinatensystem. Allerdings ist das Koordinatensystem an benachbarten Gitterplätzen nicht mehr aus parallelen Einheitsvektoren aufgebaut. Wir nehmen an, dass der richtige quantenmechanische Grundzustand vom klassischen Grundzustand nur derart abweicht, dass der Kippwinkel der lokalen Magnetisierung durch einen renormierten Kippwinkel zu ersetzen ist. Wir definieren daher den Einheitsvektor der Magnetisierung im Grundzustand wie in (4.3) und wie in (4.5) ein lokales, rechtshändiges Orthonormalsystem $\left\{\boldsymbol{m}_i, \boldsymbol{e}^{(1)}_i, \boldsymbol{e}^{(2)}_i\right\}$, das jeweils auf allen Plätzen der Untergitter

[20] Für den QAF im homogenen Magnetfeld $\boldsymbol{h}$ erhält man einen zusätzlichen Term $H_{\boldsymbol{h}} = -\boldsymbol{h}\cdot\sum_i \boldsymbol{S}_i$, der zu einem anderen, gekippten klassischen Grundzustand führt. Bei der Bosonisierung erhält man einerseits aus $H_{\boldsymbol{h}}$ auch Terme, die eine ungerade Anzahl bosonischer Operatoren entalten und andererseits führt die Darstellung in einer gekippten Basis zu Zusatztermen im quadratischen Teil des Hamiltonians. Nach der Bogoliubov-Transformation ergeben sich dann 2 Magnonenzweige mit unterschiedlicher Dispersion $E_{\boldsymbol{k}+} \neq E_{\boldsymbol{k}-}$. Ebenso unterscheiden sich die Koeffizienten in der Bogoliubov-Transformation $u_{\boldsymbol{k}+} \neq u_{\boldsymbol{k}-}$, $v_{\boldsymbol{k}+} \neq v_{\boldsymbol{k}-}$. Ohne Anisotropie ergibt sich dann bei endlichem Magnetfeld ein Spinwellenspektrum mit Anregungslücke sowie unterschiedliche Spinwellengeschwindigkeiten $c_{0\pm}$ für die beiden Moden. [57]

bis auf einen Verschiebungsvektor gleich ist (siehe Abbildung 5). Mit der sphärischen Basis (4.6) und der Holstein-Primakoff-Transformation erhalten wir einen zu (4.10) analogen Ausdruck. Lediglich der Term aus der Anisotropie

$$H^A = \frac{1}{2}\sum_{ij} I_{ij} S_i^z S_j^z \tag{4.38}$$

muss noch in das korrekte lokale Koordinatensystem transformiert werden. Dazu legen wir die lokalen Koordinatensysteme folgendermaßen fest:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{m}_i &= \zeta_i n \boldsymbol{e}_z + m \boldsymbol{e}_x && (4.39a)\\ \boldsymbol{e}_i^{(1)} &= \boldsymbol{e}_y && (4.39b)\\ \boldsymbol{e}_i^{(2)} &= -\zeta_i n \boldsymbol{e}_x + m \boldsymbol{e}_z. && (4.39c) \end{aligned}$$

Hierbei ist $\zeta_i = \pm 1$ wie in (4.12) definiert und das Magnetfeld senkrecht zur Anisotropie gelegt

$$\boldsymbol{h} = h \boldsymbol{e}_x. \tag{4.40}$$

Die Parameter n und m (siehe Abbildung 5) sind gerade die Winkelfunktionen des Winkels ϑ:

$$n = \cos\vartheta \qquad m = \sin\vartheta \qquad \Rightarrow n^2 + m^2 = 1. \tag{4.41}$$

Jetzt berechnen wir die entsprechenden Skalarprodukte für direkt nebeneinander liegende Einheitsvektoren ($i \in A\,,\, j \in B \quad \Rightarrow \zeta_i \zeta_j = -1$)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{m}_i \cdot \boldsymbol{m}_j &= -n^2 + m^2 && (4.42a)\\ \boldsymbol{e}_i^{\pm} \cdot \boldsymbol{e}_j^{\pm} &= 2n^2 && (4.42b)\\ \boldsymbol{e}_i^{\pm} \cdot \boldsymbol{e}_j^{\mp} &= 2m^2 && (4.42c)\\ \boldsymbol{e}_i^{\pm} \cdot \boldsymbol{m}_j &= \pm 2i\zeta_j nm && (4.42d)\\ \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{m}_i &= hm && (4.42e)\\ \boldsymbol{h} \cdot \boldsymbol{e}_i^{\pm} &= \mp ih\zeta_i n && (4.42f)\\ \boldsymbol{m}_i \cdot \boldsymbol{e}_z &= \zeta_i n && (4.42g)\\ \boldsymbol{e}_i^{\pm} \cdot \boldsymbol{e}_z &= \pm im && (4.42h)\\ \boldsymbol{m}_i \cdot \boldsymbol{e}_x &= m && (4.42i)\\ \boldsymbol{e}_i^{\pm} \cdot \boldsymbol{e}_x &= \mp i\zeta_i n. && (4.42j) \end{aligned}$$

Die letzten beiden Skalarprodukte tauchen auf, falls die Anisotropie parallel zum Magnetfeld ist

$$\begin{aligned} H^A &= \frac{1}{2}\sum_{ij} I_{ij} S_i^x S_j^x && (4.43)\\ &= E_{\mathrm{cl}}^A + H_2^{A\parallel} + H_4^{A\parallel} + H^{A'} + H_4^{A\perp} && (4.44) \end{aligned}$$

mit den Beiträgen

$$\begin{aligned} E_{\mathrm{cl}}^A &= -\frac{1}{2} n^2 S^2 \sum_{ij} I_{ij} && (4.45a)\\ H_2^{A\parallel} &= \frac{1}{2} S n^2 \sum_{ij} I_{ij}(n_i + n_j) && (4.45b)\\ H_4^{A\perp} &= -\frac{1}{2} n^2 \sum_{ij} I_{ij} n_i n_j && (4.45c)\\ H^{A'} &= \frac{in^2 m}{2} \sum_{ij} I_{ij} \zeta_i (S - n_i)(S_i^- - S_j^+) && (4.45d)\\ H^{A\perp} &= -\frac{m^2}{8} \sum_{ij} I_{ij} (S_i^- - S_i^+)(S_j^- - S_j^+). && (4.45e) \end{aligned}$$

Somit hat unser Hamiltonian des Heisenberg Antiferromagneten mit Anisotropie im Magnetfeld die Form

$$H = E_{\mathrm{cl}} + H_2^{\parallel} + H_4^{\parallel} + H^{\perp} + H' \tag{4.46}$$

mit den Anteilen[21]

$$\begin{aligned}
H_2^{\parallel} &= \frac{S}{2}\sum_{ij} K_{ij}(n_i + n_j) + \sum_i hmn_i && \text{(4.47a)}\\
H_4^{\parallel} &= -\frac{1}{2}\sum_{ij} K_{ij} n_i n_j && \text{(4.47b)}\\
H^{\perp} &= \frac{1}{8}\sum_{ijpp'} \left(J_{ij} S_i^{-p} S_j^{-p'} \boldsymbol{e}_i^{p} \cdot \boldsymbol{e}_j^{p'} + I_{ij} m^2 p S_i^{p} p' S_j^{p'} \right) && \text{(4.47c)}\\
H' &= \frac{1}{2}\sum_{ij} \Big(J_{ij} \boldsymbol{m}_i \cdot S_i^{\parallel} (S_j^{-} \boldsymbol{e}_j^{+} + S_j^{+} \boldsymbol{e}_j^{-}) + inm I_{ij} S_i^{\parallel} \zeta_i (S_j^{-} - S_j^{+}) \Big) \\
&\quad -\frac{1}{2}\sum_j \boldsymbol{h} \cdot (S_i^{-} \boldsymbol{e}_i^{+} + S_i^{+} \boldsymbol{e}_i^{-}). && \text{(4.47d)}
\end{aligned}$$

In $H_2^{\parallel}$, $H_4^{\parallel}$ und $H^{\perp}$ treten nach der Transformation auf Bosonen nur Terme mit ganzzahligen Potenzen der Erzeuger bzw. Vernichter auf, während H' ungeradzahlige Potenzen der Operatoren enthalten. Im Einzelnen folgt mit der „normalen“ Holstein-Primakoff-Transformation (3.8) und der Entwicklung (3.9)

$$\begin{aligned}
H^{\perp} &= H_2^{\perp} + H_4^{\perp} + \mathcal{O}(b^6) && \text{(4.48a)}\\
H_2^{\perp} &= \frac{S}{2}\sum_{ij} \left(L_{ij}(b_i^{\dagger} b_j^{\dagger} + b_i b_j) + M_{ij}(b_j^{\dagger} b_i + b_i^{\dagger} b_j) \right) && \text{(4.48b)}\\
H_4^{\perp} &= -\frac{1}{8}\sum_{ij} \Big(L_{ij}(b_i^{\dagger} b_j^{\dagger} n_j + b_i^{\dagger} b_j^{\dagger} n_i + n_j b_i b_j + n_i b_i b_j) && \text{(4.48c)}\\
&\quad + M_{ij}(b_j^{\dagger} n_j b_i + b_j^{\dagger} n_i b_i + b_i^{\dagger} n_j b_j + b_i^{\dagger} n_i b_j) \Big)
\end{aligned}$$

mit den Abkürzungen $L_{ij} = (J_{ij} n^2 - I_{ij} m^2)$ und $M_{ij} = (J_{ij} + I_{ij}) m^2$. Die ungeraden Terme sind

$$\begin{aligned}
H' &= H_1' + H_3' + \mathcal{O}(b^5) && \text{(4.49a)}\\
H_1' &= \frac{in\sqrt{2S}}{2}\sum_i \zeta_i (b_i^{\dagger} + b_i) \left(mS \sum_j (2J_{ij} + I_{ij}) + h \right) && \text{(4.49b)}\\
H_3' &= \frac{in\sqrt{2S}}{4} \Bigg(\sum_{ij} \Big(J_{ij} \zeta_i m (n_i b_i + b_i^{\dagger} n_i + 4 n_i b_i^{\dagger} + 4 n_i b_i) \\
&\quad + I_{ij}(b_i^{\dagger} n_i + n_i b_i + 4 n_j b_i^{\dagger} + 4 n_j b_i) \Big) \\
&\quad + \frac{1}{2S} h \sum_i (n_i b_i - b_i^{\dagger} n_i) \Bigg). && \text{(4.49c)}
\end{aligned}$$

Für die weitere Behandlung müssen wir die Wechselwirkung auf nächste Nachbarn beschränken (2.6) und können damit die relevanten Energien als Verhältnis der beiden Kopplungen gemäß (4.25) ausdrücken. Mit der Definition des Austauschfeldes

$$h_m = 2\tilde{J}_0 S m \tag{4.50}$$

[21] siehe auch (2.9) und (2.8); man beachte, dass die Richtung des Magnetfeldes noch nicht festgelegt ist.

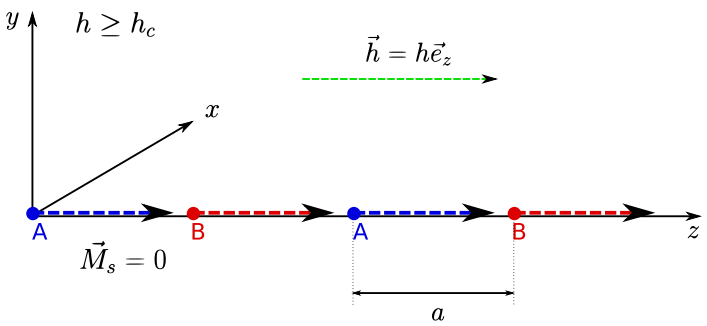

Abbildung 16: Antiferromagnet im Magnetfeld $h > h_c$: Ist das äußere Magnetfeld größer als das durch die Austauschwechselwirkung erzeugte effektive Magnetfeld, so geht der klassische AF in einen ferromagnetischen Grundzustand über; alle Spins (dargestellt durch die gestrichelten Pfeile) zeigen in die gleiche Richtung; der Ordnungsparameter gestaffelte Magnetisierung M_s verschwindet.

wird der quadratische Hamiltonian zu

$$H_2^{\parallel} = \tilde{J}_0 S\alpha \sum_i n_i \tag{4.51a}$$

$$H_2^{\perp} = \frac{S}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left(\tilde{n}^2 (b_i^\dagger b_j^\dagger + b_i b_j) + \tilde{m}^2 (b_j^\dagger b_j + b_i^\dagger b_j) \right) \tag{4.51b}$$

mit den Abkürzungen

$$\alpha = (1-2m^2)(1+\lambda) + m^2\lambda + \frac{hm}{\tilde{J}_0 S} \tag{4.52a}$$

$$\tilde{n}^2 = n^2 - \lambda m^2 \tag{4.52b}$$

$$\tilde{m}^2 = (1+\lambda)m^2. \tag{4.52c}$$

Diese wohlbekannte Formulierung [97, 41] stellt den Ausgangspunkt der konventionellen Spinwellentheorie in $1/S$-Entwicklung dar, liefert aber so komplizierte Wechselwirkungsterme, dass Berechnungen aufwändig werden und zu Divergenzen führen. Daher beenden wir diese Betrachtungen mit der Darstellung im Ortsraum und dem Hinweis auf die Literatur [21, 75].

4.2.2 Entwicklung um den ferromagnetischen Grundzustand für starkes Magnetfeld

Im Magnetfeld $\boldsymbol{h} = h\boldsymbol{e}_z$ erhält man zum Heisenberg-Modell (1.34) einen Zusatzterm, so dass unser Modell-Hamiltonian wie folgt aussieht:

$$\boxed{H = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j - h \sum_i S_i^z.} \tag{4.53}$$

Ist das Magnetfeld stark ($h > h_c$), so stellt sich der klassische Grundzustand des Ferromagneten (siehe Abbildung 16) ein, um den wir entwickeln und so eine etwas andere Formulierung der Spinwellentheorie des Antiferromagneten erhalten. Zur Bosonisierung gehen wir von (1.34) aus und setzen die Darstellung des Spinoperators mit (1.4a) in sphärischer Basis (4.6) ein. Mit der Wahl

$$\boldsymbol{e}_i^{(1)} = \boldsymbol{e}_y \tag{4.54a}$$

$$\boldsymbol{e}_i^{(2)} = -\boldsymbol{e}_x \tag{4.54b}$$

$$\boldsymbol{m}_i = \boldsymbol{e}_z \tag{4.54c}$$

erhalten wir wieder die Skalarprodukte (4.14b) für nächste Nachbarn sowie $\boldsymbol{m}_i \cdot \boldsymbol{m}_j = 1$ für alle Gitterplätze. Mit der Holstein-Primakoff-Transformation (3.8) sowie deren $1/S$-Entwicklung (3.9) ergibt sich

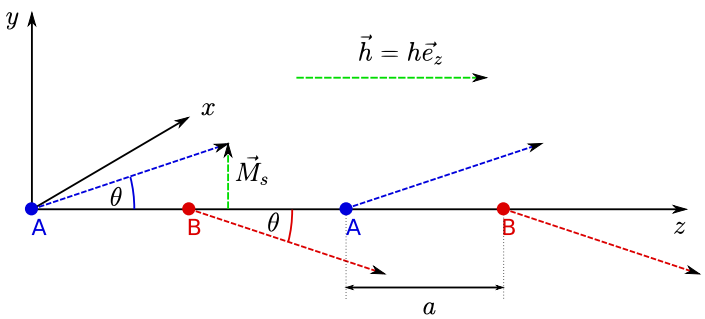

Abbildung 17: Klassischer Grundzustand des Quantenantiferromagneten mit den Untergittern A und B in einem Magnetfeld $h < h_c$; hier nur die Spins entlang einer Achse gezeigt. Die Erwartungswerte der Spins im Néel-Zustand $\langle \boldsymbol{S}_i \rangle$ sind durch blau und rot gestrichelte Pfeile dargestellt. Bei der vorliegenden Wahl des Magnetfeldes entlang der z-Achse schließen die lokalen Momente einen Winkel θ mit der z-Achse ein. Das Koordinatensystem ist so ausgerichtet, dass die Untergittermagnetisierung $\boldsymbol{M}_s$ in y-Richtung zeigt (entspricht der Phasenwahl der spontanen Symmetriebrechung in (6.8)).

der Hamiltonian des wechselwirkenden Bose-Gases

$$H = E_0 + H_2 + H_4 \tag{4.55a}$$

$$E_0 = N\left(\frac{\tilde{J}_0 S^2}{2} - Sh\right) \tag{4.55b}$$

$$H_2 = -\frac{S}{2}\sum_{ij} J_{ij}\left(n_i + n_j - b_i^\dagger b_j - b_i b_j^\dagger\right) + h\sum_i n_i \tag{4.55c}$$

$$H_4 = \frac{1}{4}\sum_{ij} J_{ij}\left(2n_i n_j - b_i^\dagger n_i b_j - b_j^\dagger n_i . b_i\right) \tag{4.55d}$$

Darstellung im $\boldsymbol{k}$-Raum Für die Fourier-Transformation definieren wir 2 bosonische Operatoren im $\boldsymbol{k}$-Raum gemäß des zu erwartenden antiferromagnetischen Zustandes mit größerer Elementarzelle:

$$b_{\boldsymbol{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\left(\sum_{\boldsymbol{r}_i \in A} e^{-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} b_i + \sigma \sum_{\boldsymbol{r}_i \in B} e^{-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} b_i\right) \tag{4.56}$$

$$\left[b_{\boldsymbol{k},\sigma}, b^\dagger_{\boldsymbol{k}',\sigma'}\right] = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{4.57}$$

$\boldsymbol{r}_i \in A$ und $\boldsymbol{r}_i \in B$ bezeichnen die Summen über die Untergitter A und B. Wie man leicht sieht, sind die Fourier-Transformierten einer symmetrischen bzw. antisymmetrischen Linearkombination dieser Operatoren

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i}\left(b_{\boldsymbol{k}+} + b_{\boldsymbol{k}-}\right) \qquad i \in \mathrm{A} \tag{4.58a}$$

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i}\left(b_{\boldsymbol{k}+} - b_{\boldsymbol{k}-}\right) \qquad i \in \mathrm{B} \tag{4.58b}$$

gerade die bosonischen Operatoren im Ortsraum. Wie im vorherigen Abschnitt erstrecken sich die $\boldsymbol{k}$-Summen wieder über die reduzierte Brillouin-Zonen, da wegen der unterschiedlichen Operatoren auf den Untergittern die Einheitszelle größer ist. Setzt man (4.56) in (4.55a) ein, so erhält man unter ausschließlicher Berücksichtigung von NN-Wechselwirkungen (2.6) einen diagonalen quadratischen Hamiltonian im $\boldsymbol{k}$-Raum:

$$\boxed{H_2 = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}\sigma} - \mu\right) b^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} b_{\boldsymbol{k}\sigma}} \tag{4.59}$$

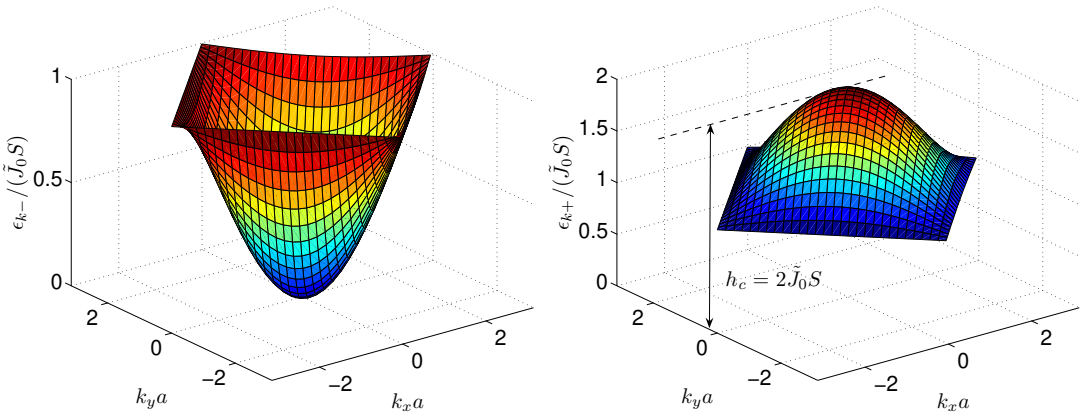

Abbildung 18: Die erhaltene Dispersionsrelation des Ferromagneten beim Entwickeln um den ferromagnetischen Grundzustand (gezeigt für $D = 2$). links: Die Mode ohne Anregungslücke hat für kleine $\boldsymbol{k}$ eine quadratische Dispersion. rechts: Die +-Mode hat in der reduzierten Brillouin-Zone gemäß (4.60) eine Anregungslücke, die für kleine $\boldsymbol{k}$ gerade dem kritischen Feld entspricht.

mit der Dispersionsrelation

$$\boxed{\epsilon_{\boldsymbol{k}\sigma} = S\left(\tilde{J}_0 + \sigma\tilde{J}_{\boldsymbol{k}}\right)} \tag{4.60}$$

für die beiden ferromagnetischen Magnonen-Moden, sowie dem chemischen Potential als Differenz zwischen kritischem Feld und Magnetfeld

$$\boxed{\mu = 2S\tilde{J}_0 - h}. \tag{4.61}$$

Für ein einfach kubisches System liefert Entwicklung der Dispersionsrelation $\epsilon_{\boldsymbol{k}\sigma}$ eine Mode mit $\sigma = +$ mit einer Anregungslücke von der Größe des kritischen Feldes eine Mode mit $\sigma = -$, die die antiferromagnetischen Spin-Fluktuationen beschreibt und (siehe Abschnitt 6.5.1) eine quadratische Dispersion ohne Anregungslücke hat, da aus (B.15) folgt:

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}+} = h_c + \mathcal{O}\left(\boldsymbol{k}^2\right) \tag{4.62a}$$

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}-} = \frac{\boldsymbol{k}^2}{2m} + \mathcal{O}\left(\boldsymbol{k}^4\right) \tag{4.62b}$$

$$\boxed{m = \frac{1}{2JSa^2}}. \tag{4.63}$$

Hierbei haben wir die zu einer Teilchenmasse analoge Größe m eingeführt. Man beachte ebenfalls, dass nach Definition des chemischen Potentials für das Magnetfeld $h = \epsilon_{\boldsymbol{0}+} - \mu$ gilt. Mit der Transformation von (4.55d) wird dann das gesamte Modell im $\boldsymbol{k}$-Raum formuliert

$$\begin{aligned} H_4 &= \frac{\tilde{J}_0}{4N}\sum_{\boldsymbol{1}\cdots\boldsymbol{4}}\delta_{\boldsymbol{1}+\boldsymbol{2},\boldsymbol{3}+\boldsymbol{4}}\left(\sum_{\sigma\sigma'}\tilde{\Gamma}^{\sigma\sigma'}_{\boldsymbol{1234}}b^\dagger_{\boldsymbol{1}\sigma}b^\dagger_{\boldsymbol{2}\sigma}b_{\boldsymbol{3}\sigma'}b_{\boldsymbol{4}\sigma'}\right. \\ &\quad \left. + \sum_{\sigma}\tilde{\Gamma}^{\sigma}_{\boldsymbol{1234}}b^\dagger_{\boldsymbol{1}\sigma}b^\dagger_{\boldsymbol{2}-\sigma}b_{\boldsymbol{3}\sigma}b_{\boldsymbol{4}-\sigma}\right) \end{aligned} \tag{4.64a}$$

$$\tilde{\Gamma}^{\sigma\sigma'}_{\boldsymbol{1234}} = \sigma\sigma'(\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{1}-\boldsymbol{3}} + \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{2}-\boldsymbol{4}}) - \frac{1}{2}(\sigma(\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{1}} + \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{2}}) + \sigma'(\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{3}} + \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{4}})) \tag{4.64b}$$

$$\tilde{\Gamma}^{\sigma}_{\boldsymbol{1234}} = \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{2}-\boldsymbol{4}} - \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{2}-\boldsymbol{3}} - \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{1}-\boldsymbol{4}} + \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{1}-\boldsymbol{3}} + \sigma(\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{1}} - \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{2}} + \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{3}} - \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{4}}). \tag{4.64c}$$

5 Renormierung der Anregungslücke beim QAF mit Anisotropie

5.1 Motivation

Wie wir in Kapitel (4.1.4) gesehen hatten, hat das Spinwellenspektrum des QAF in erster Näherung eine Anregungslücke Δ_0, die über (4.29b) mit der Anisotropie zusammenhängt. In der Arbeit [21] wurde die Renormierung der magnetischen Anisotropie für den zweidimensionalen Quantenantiferromagneten mit Anisotropie gemäß (4.1) und NN-Wechselwirkung (2.6) betrachtet und die Spinwellenanregungslücke in $1/S$-Entwicklung berechnet. Dabei wurde ein endlicher Beitrag in 1. Ordnung gefunden sowie ein formal divergenter Beitrag in 2. Ordnung abgeschätzt. Die exakte Anregungslücke des Spinwellenspektrums kann durch Ausmessen der Dispersion mittels Streuung kalter Neutronen bestimmt werden, wie es z. B. in [76] für den zweidimensionalen QAF Pr_2CuO_4 besonders im Hinblick auf die Temperaturabhängigkeiten der Anregungslücke diskutiert wird.[22]

Isotroper Quantenantiferromagnet Der isotrope Quantenantiferromagnet in zwei Dimensionen, wie er zum Beispiel in den CuO_2-Schichten der Hochtemperatursupraleiter realisiert ist, war schon öfters Untersuchungsgegenstand [14, 6, 53, 55, 77] mit dem Ergebnis von Korrekturen zur Spinwellendispersion, Untergittermagnetisierung und magnetischer Suszeptibilität in 1. Ordnung Spinwellenentwicklung. Dagegen scheinen die Korrekturen 2. Ordnung klein zu sein, wie auch z.B. in [78] experimentell mittels inelastischer Neutronenstreuung verifiziert wurde. Die physikalische Erklärung dieses Verhaltens liegt in der Erhaltung des Gesamtspins, da im isotropen Fall der Operator des Gesamtspins mit dem Hamilton-Operator vertauscht. Daraus resultiert schließlich eine schwache Wechselwirkung zwischen langwelligen Spinwellen [43, 79, 80], die nur kleine Korrekturen in 2. Ordnung ergibt.

Quantenantiferromagnet mit Anisotropien Der völlig isotrope Quantenantiferromagnet ist dagegen fast nie realisiert, da schwache Wechselwirkungen z.B. durch das Kristallfeld [35] oder Dipol-Dipol-Wechselwirkungen die Isotropie brechen und somit keine Erhaltung des Gesamtspins mehr gilt. Da qualitative Aussagen auch bei komplizierteren Anisotropien korrekt bleiben sollten [21], wird zunächst nur der einfachste Fall mit Easy-Axis-Anisotropie betrachtet, dessen Spinwellenspektrum eine Anregungslücke hat. Es scheint, dass die $1/S$-Korrekturen zur Anregungslücke endlich bleiben, da in der Hartree-Fock-Näherung nur über Ein-Magnonen-Zustände integriert wird. Dagegen zeigen die $1/S^2$-Korrekturen sowohl im isotropen als auch im anisotropen Fall infolge der Ausbreitung von drei Spinwellen Divergenzen. Während sich diese Infrarot-Divergenzen infolge der Erhaltung des Gesamtspins im isotropen Fall aufheben [43, 14, 53, 77, 55, 21], ist der Fall mit Anisotropie komplizierter und bisher nur wenig untersucht. Experimentell ist das entsprechende Problem zum Beispiel durch den zweidimensionalen QAF Pr_2CuO_4 realisiert, der eine temperaturabhängige Anregungslücke weit unterhalb der Néel-Temperatur zeigt [81]. Bevor wir das schon in Kapitel 4.1 eingeführte Modell mit einer ungewöhnlichen Art Spinwellentheorie angehen, soll kurz die Vorgehensweise in der Vorarbeit [21] skizziert werden. Ausgehend von (4.1) wird das Spinmodell mittels einer Dyson-Maleev-Transformation, die auf beiden Untergittern gleich definiert ist, auf Bosonen abgebildet. Anschließend werden die Spin-Green-Funktionen $G_{\alpha\alpha}(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j) = -\left\langle \hat{T}(S_i^\alpha S_j^\alpha)\right\rangle$ $\alpha \in \{x, y\}$ in Störungstheorie berechnet. Dabei wird sich der üblichen Spinwellentheorie des QAF sowie Diagonalisierung durch Bogoliubov-Transformation (C.3) bedient. Unter Verwendung der Methode von Belyaev [82] für die Green-Funktionen des dünnen Bose-Gases werden schließlich die Renormierungsfaktoren der Anregungslücke, der Spinwellengeschwindigkeit sowie der magnetischen Suszeptibilität berechnet. Diese sind in 1. Ordnung endlich und in 2. Ordnung auf die Werte des isotropen Falls [6] zurückzuführen. Für den Fall mit Anisotropie werden die Anregungslücke sowie die zusätzlichen Wechselwirkungsterme summarisch berücksichtigt. So ergeben sich formal logarithmische Divergenzen der Renormierungsfaktoren $\tilde{Z}_i$ der Anregungslücke und der Spinwellengeschwindigkeit

$$\tilde{Z}_i \approx Z_i \left(1 + \frac{R}{2}\right) \quad , \quad i = c, \Delta, \tag{5.1}$$

[22] Weitere Neutronenstreuexperimente an zweidimensionalen QAF mit Anisotropie wurden z. B. in [78] gemacht, wobei insbesondere der Fokus auf die Korrespondenz zwischen Gitterabstand und Superaustauschkonstante J gelegt wurde.

wobei Z_i der entsprechende Renormierungsfaktor in 1. Ordnung ist und die Korrektur 2. Ordnung die Form

$$R = -\frac{1}{(\pi S)^2} \ln\left(\frac{S\tilde{J}_0}{3\Delta}\right) \sim \ln\Delta \qquad \text{für} \quad R \ll 1 \tag{5.2}$$

hat. Die volle Analyse der $1/S$-Entwicklung der Renormierungsfaktoren ist wegen der komplizierten Vertexfunktionen schwierig und steht noch aus.
Vorarbeiten unter Beschränkung auf den zweidimensionalen QAF mit $S = 1/2$ wurden mittels Entwicklung von Grundzustandsenergie, Untergittermagnetisierung, Suszeptibilität und Anregungslücke um das Ising-Modell in Potenzen des Verhältnisses von transversaler und longitudinaler Austauschkopplung bereits in [83, 84, 56] gemacht (siehe ebenfalls [85, 6]). Man beachte weiterhin die zur Berechnung von Renormierungsfaktoren benutzte Entwicklung in $1/(2DS)$, die auch auf den Fall des QAF mit Anisotropie erweitert wurde [86]. Im Folgenden soll nun eine Spinwellentheorie benutzt werden, die auf der Parametrisierung der Bogoliubov-Quasiteilchen mittels zweier hermitescher Operatoren fußt, um Korrekturen zur Anregungslücke aufgrund von Quantenfluktuationen zu berechnen und die physikalische Ursache der unerwartet großen Korrekturen zu verstehen. Abschließend sei noch auf eine Arbeit zum QAF mit Anisotropie im schwachen Magnetfeld senkrecht zur Untergittermagnetisierung hingewiesen, die die Renormierung des Spinwellengaps [87] durch das Magnetfeld betrachtet. Hier wird der Kippwinkel [41] durch die 3-Teilchen- und 5-Teilchen-Wechselwirkungen im Modell mit Magnetfeld (4.49a) renormiert, welcher so zu einer Instabilität im Bereich starker Magnetfelder führt.

5.2 Hermitesche Parametrisierung

Ausgehend vom Hamilton-Operator (4.35) führen wir nun eine Transformation auf hermitesche Operatoren durch, die sich leichter interpretieren lassen, da sie zumindest in linearer Ordnung Spinwellentheorie Operatoren für relevante physikalische Messgrößen sind. Später wird sich zeigen, dass diese Formulierung auch bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen Vorteile bringt. Man betrachte zunächst die Parametrisierung

$$\psi_{\boldsymbol{k}+} = \sqrt{\frac{\chi_0}{2VE_{\boldsymbol{k}}}}\left(\chi_0^{-1}\,\hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}+} - iE_{\boldsymbol{k}}\,\hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}+}\right) \tag{5.3a}$$

$$\psi_{\boldsymbol{k}-} = i\sqrt{\frac{\chi_0}{2VE_{\boldsymbol{k}}}}\left(\chi_0^{-1}\,\Phi_{\boldsymbol{k}-} - iE_{\boldsymbol{k}}\Pi_{\boldsymbol{k}-}\right). \tag{5.3b}$$

Hierbei ist

$$\boxed{\chi_0 = \frac{1}{2\tilde{J}_0 a^D}} \tag{5.4}$$

die homogene antiferromagnetische Suszeptibilität. Die Messgrößen der Operatoren im Ortsraum sind reell, so dass wir Hermitizität im Impulsraum erhalten

$$\Phi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} = \Phi_{-\boldsymbol{k}\sigma} \qquad \Pi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} = \Pi_{-\boldsymbol{k}\sigma}. \tag{5.5}$$

Natürlich können wir diese lineare Abbildung zwischen den vier Operatoren $\psi_{\boldsymbol{k}\sigma}$, $\psi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}$ und $\Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}$, $\Phi_{\boldsymbol{k}\sigma}$ auch umkehren

$$\Phi_{\boldsymbol{k}+} = \sqrt{\frac{V\chi_0 E_{\boldsymbol{k}}}{2}}\left(\psi_{\boldsymbol{k}+} - \psi^\dagger_{-\boldsymbol{k}+}\right) \tag{5.6a}$$

$$\Pi_{\boldsymbol{k}+} = i\sqrt{\frac{V}{2\chi_0 E_{\boldsymbol{k}}}}\left(\psi_{\boldsymbol{k}+} - \psi^\dagger_{-\boldsymbol{k}+}\right) \tag{5.6b}$$

$$\Pi_{\boldsymbol{k}-} = \sqrt{\frac{V}{2\chi_0 E_{\boldsymbol{k}}}}\left(\psi_{\boldsymbol{k}-} + \psi^\dagger_{-\boldsymbol{k}-}\right) \tag{5.6c}$$

$$\Phi_{\boldsymbol{k}-} = -i\sqrt{\frac{V\chi_0 E_{\boldsymbol{k}}}{2}}\left(\psi_{\boldsymbol{k}-} - \psi^\dagger_{-\boldsymbol{k}-}\right). \tag{5.6d}$$

Die neuen Operatoren sind so gewählt, dass sie kanonisch konjugiert sind, d.h. sie erfüllen die fundamentalen Vertauschungsrelationen des Ortes und des Impulses [44, 52, 40]; hier in einer diskreten Formulierung aufgeschrieben

$$\boxed{[\Phi_{\boldsymbol{k}\sigma}, \Pi_{\boldsymbol{k}'\sigma'}] = -iV\delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}',0}\delta_{\sigma,\sigma'}.} \tag{5.7}$$

Der quadratische Hamiltonian bleibt auch unter dieser Transformation noch diagonal

$$\boxed{H_2 = \frac{1}{2V}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(\chi_0^{-1}\Phi_{-\boldsymbol{k},\sigma}\Phi_{\boldsymbol{k}\sigma} + \chi_0 E_{\boldsymbol{k}}^2\Pi_{-\boldsymbol{k}\sigma}\Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}\right) + E^0} \tag{5.8}$$

und enthält eine negative Energieverschiebung

$$E^0 = -\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(\frac{1}{2}E_{\boldsymbol{k}} + \tilde{J}_0 S(1+\lambda)\right). \tag{5.9}$$

Zum Umschreiben des Wechselwirkungsanteils schreiben wir zunächst die gesamte Transformation

$$A_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2}\left[\left(\Phi_{\boldsymbol{k}+} + i\Phi_{\boldsymbol{k}-}\right)\tau_{\boldsymbol{k}} + \left(\Pi_{\boldsymbol{k}-} - i\Pi_{\boldsymbol{k}+}\right)\mu_{\boldsymbol{k}}\right] \tag{5.10a}$$

$$B_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2}\left[\left(\Phi_{\boldsymbol{k}+} - i\Phi_{\boldsymbol{k}-}\right)\tau_{\boldsymbol{k}} + \left(-\Pi_{\boldsymbol{k}-} - i\Pi_{\boldsymbol{k}+}\right)\mu_{\boldsymbol{k}}\right] \tag{5.10b}$$

aus Bogoliubov-Transformation und hermitescher Parametrisierung auf. Die eingeführten Parameter sind Linearkombinationen der Bogoliubov-Koeffizienten (C.11)

$$\tau_{\boldsymbol{k}} = \frac{u_{\boldsymbol{k}} - v_{\boldsymbol{k}}}{\sqrt{2V\chi_0 E_{\boldsymbol{k}}}} \tag{5.11a}$$

$$\mu_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\frac{\chi_0 E_{\boldsymbol{k}}}{2V}}\left(u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}}\right). \tag{5.11b}$$

Eine zusätzliche Berücksichtigung eines Magnetfeldes wirkt sich nur insofern aus, als wir dann zwei verschiedene Dispersionszweige $E_{\boldsymbol{k}\sigma}$ erhalten und infolgedessen die Bogoliubov-Transformation mit zwei verschiedenen Parameter $u_{\boldsymbol{k}\sigma}$ und $v_{\boldsymbol{k}\sigma}$ durchführen müssen [80].

Der nächste Schritt ist nun die Operatoren $A_{\boldsymbol{k}}$ und $B_{\boldsymbol{k}}$ aus (4.24d) und (4.24e) bzw. (4.24f) zu eliminieren und die erhaltenen Terme zu vereinfachen. Gemäß der Betrachtungen zum Funktionalintegral im Phasenraum [88] müssen zur korrekten Berechnung der Größen mittels Funktionalintegral die Operatoren in der Wirkung symmetrisiert aufgeschrieben werden. Dies ist prinzipiell damit zu begründen, dass a priori weder der Impuls noch der Ort in irgend einer Weise ausgezeichnet sind. Nun sind die in (5.3) eingeführten Operatoren mathematisch äquivalent zu den Orts- bzw. Impulsoperatoren, so dass wir hier ebenso die Anordnung der nicht vertauschenden Operatoren symmetrisieren müssen. Die explizite Berechnung der Terme für den quartischen Hamiltonian ist ziemlich langwierig, aber einfach und wird daher im Appendix D behandelt, so dass man folgenden Wechselwirkungsanteil in hermitescher Parametrisierung mit symmetrischen Vertexfunktionen erhält:

$$H_4^{\mathrm{HP}} = H_4 + H_4^{(2)} + H_4^{(0)} \qquad \text{Holstein-Primakoff} \tag{5.12a}$$

$$H_4^{\mathrm{DM}} = H_4 + H_4^{\mathrm{AH}} + H_4^{(2)} + H_4^{(2),\mathrm{AH}} + H_4^{(0)} \qquad \text{Dyson-Maleev.} \tag{5.12b}$$

Mit der Abkürzung $\boldsymbol{k}_1 = \mathbf{1}$, etc. sind nun die einzelnen Terme:

$$
\begin{aligned}
H_4 &= -\frac{1}{32N}\sum_{\mathbf{1234}} \delta_{\mathbf{1+2+3+4},\mathbf{0}} && (5.13a)\\
&\times \Bigg(\Gamma^{4\Phi}_{\mathbf{1234}} \sum_{\sigma\sigma'} \Phi_{\mathbf{1}\sigma}\Phi_{\mathbf{2}\sigma}\Phi_{\mathbf{3}\sigma'}\Phi_{\mathbf{4}\sigma'} + \Gamma^{4\Pi}_{\mathbf{1234}} \sum_{\sigma\sigma'} \Pi_{\mathbf{1}\sigma}\Pi_{\mathbf{2}\sigma}\Pi_{\mathbf{3}\sigma'}\Pi_{\mathbf{4}\sigma'} \\
&\quad + \Gamma^{2\Phi 2\Pi}_{\mathbf{1234}} \sum_{\sigma} \Phi_{\mathbf{1}\sigma}\Phi_{\mathbf{2}\sigma}\Pi_{\mathbf{3}-\sigma}\Pi_{\mathbf{4}-\sigma} + \Gamma^{2\Phi 2\Pi}_{\mathbf{1234}\perp} \sum_{\sigma} \{\Phi_{\mathbf{1}\sigma}\Phi_{\mathbf{2}\sigma}, \Pi_{\mathbf{3}\sigma}\Pi_{\mathbf{4}\sigma}\} \\
&\quad + \Gamma^{\Phi\Pi\Phi\Pi}_{\mathbf{1234}} \{\Phi_{\mathbf{1}+}, \Pi_{\mathbf{2}+}\} \{\Pi_{\mathbf{3}-}\Phi_{\mathbf{4}-}\} \Bigg) \\
H_4^{(2)} &= \frac{\tilde{J}_0}{8}\sum_{\mathbf{1}} \Bigg[(\tilde{\gamma}_1 + 1 + \lambda)\, \tau_{\mathbf{1}}^2 \sum_{\sigma} \Phi_{-\mathbf{1}\sigma}\Phi_{\mathbf{1}\sigma} \\
&\quad + (1 + \lambda - \tilde{\gamma}_1)\, \mu_{\mathbf{1}}^2 \sum_{\sigma} \Pi_{-\mathbf{1}\sigma}\Pi_{\mathbf{1}} \Bigg] = \frac{1}{2S} H_2 && (5.13b)\\
H_4^{(0)} &= -\frac{5N}{16}\tilde{J}_0(1+\lambda) + \frac{\tilde{J}_0}{2}\sum_{\mathbf{1}} \tilde{\gamma}_{\mathbf{1}}. && (5.13c)
\end{aligned}
$$

Im Dyson-Maleev-Formalismus treten weitere antihermitesche Terme auf, was man aufgrund der Überlegungen auf Seite 35 auch erwarten würde

$$
\begin{aligned}
H_4^{\mathrm{AH}} &= -\frac{i}{8N}\tilde{J}_0 \sum_{\mathbf{1234}} \delta_{\mathbf{1+2+3+4},0} && (5.14a)\\
&\times \Bigg(\tilde{\Gamma}^{4\Phi}_{\mathbf{1234}} \sum_{\sigma} \sigma \Phi_{\mathbf{1}\sigma}\Phi_{\mathbf{2}\sigma}\Phi_{\mathbf{3}\sigma}\Phi_{\mathbf{4}-\sigma} + \tilde{\Gamma}^{4\Pi}_{\mathbf{1234}} \sum_{\sigma} \sigma \Pi_{\mathbf{1}\sigma}\Pi_{\mathbf{2}\sigma}\Pi_{\mathbf{3}\sigma}\Pi_{\mathbf{4}-\sigma} \\
&\quad + \tilde{\Gamma}^{2\Phi 2\Pi}_{\mathbf{1234}} \sum_{\sigma} \sigma \{\Phi_{\mathbf{1}\sigma}\Phi_{\mathbf{2}\sigma}, \Pi_{\mathbf{3}\sigma}\} \Pi_{\mathbf{4}\sigma} + \tilde{\Gamma}^{2\Pi 2\Phi}_{\mathbf{1234}} \sum_{\sigma} \sigma \{\Phi_{\mathbf{1}\sigma}, \Pi_{\mathbf{2}\sigma}\Pi_{\mathbf{3}\sigma}\} \Pi_{\mathbf{4}-\sigma} \Bigg) \\
H_4^{(2)\mathrm{AH}} &= \frac{i}{8}\tilde{J}_0 \sum_{\mathbf{1}} \tau_{\mathbf{1}}\mu_{\mathbf{1}}\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} \sum_{\sigma} \{\Phi_{-\mathbf{1}\sigma}, \Pi_{\mathbf{1}\sigma}\} && (5.14b)
\end{aligned}
$$

mit den Vertexfunktionen

$$
\begin{aligned}
\Gamma^{4\Phi}_{\mathbf{1234}} &= \tau_{\mathbf{1}}\tau_{\mathbf{2}}\tau_{\mathbf{3}}\tau_{\mathbf{4}} \left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{4}} + 2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1+2}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3+4}}\right)\right) && (5.15a)\\
\Gamma^{4\Pi}_{\mathbf{1234}} &= \mu_{\mathbf{1}}\mu_{\mathbf{2}}\mu_{\mathbf{3}}\mu_{\mathbf{4}} \left(-\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{4}} + 2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1+2}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3+4}}\right)\right) && (5.15b)\\
\Gamma^{2\Phi 2\Pi}_{\mathbf{1234}\perp} &= 2\tau_{\mathbf{1}}\tau_{\mathbf{2}}\mu_{\mathbf{3}}\mu_{\mathbf{4}} \left(3\left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{4}}\right) + 2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1+2}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3+4}}\right) - 2\left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1+3}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2+4}}\right)\right) && (5.15c)\\
\Gamma^{2\Phi 2\Pi}_{\mathbf{1234}\parallel} &= \tau_{\mathbf{1}}\tau_{\mathbf{2}}\mu_{\mathbf{3}}\mu_{\mathbf{4}} \left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{4}} + 3(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1+2}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3+4}}\right)\right) && (5.15d)\\
\Gamma^{\Phi\Pi\Phi\Pi}_{\mathbf{1234}} &= 2\tau_{\mathbf{1}}\mu_{\mathbf{2}}\tau_{\mathbf{3}}\mu_{\mathbf{4}} \left(-\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{4}} + 2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1+3}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3+4}}\right)\right) && (5.15e)\\
\tilde{\Gamma}^{4\Phi}_{\mathbf{1234}} &= \frac{1}{3}\tau_{\mathbf{1}}\tau_{\mathbf{2}}\tau_{\mathbf{3}}\tau_{\mathbf{4}}(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} - 3\tilde{\gamma}_{\mathbf{4}}) && (5.15f)\\
\tilde{\Gamma}^{4\Pi}_{\mathbf{1234}} &= \frac{1}{3}\mu_{\mathbf{1}}\mu_{\mathbf{2}}\mu_{\mathbf{3}}\mu_{\mathbf{4}}(-\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} + 3\tilde{\gamma}_{\mathbf{4}}) && (5.15g)\\
\tilde{\Gamma}^{2\Phi 2\Pi}_{\mathbf{1234}} &= \frac{1}{2}\tau_{\mathbf{1}}\tau_{\mathbf{2}}\mu_{\mathbf{3}}\mu_{\mathbf{4}}(-\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} - 3\tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{4}}) && (5.15h)\\
\tilde{\Gamma}^{2\Pi 2\Phi}_{\mathbf{1234}} &= \frac{1}{2}\tau_{\mathbf{1}}\mu_{\mathbf{2}}\mu_{\mathbf{3}}\tau_{\mathbf{4}}(3\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{4}}), && (5.15i)
\end{aligned}
$$

die für $\lambda = 0$ in die in [73] diskutierte Form übergehen. Durch die Symmetrisierung sowie die Darstellung nicht-vertauschender Operatoren als Antikommutator $\{A, B\} = AB + BA$ erhält man die Relation für alle antihermiteschen Anteile

$$
\left(H^{\mathrm{AH}}\right)^{\dagger} = -H^{\mathrm{AH}}, \tag{5.16}
$$

so dass sich die Relation (4.19) ganz leicht überprüfen lässt, indem man die Identität $\{A,B\}^\dagger = \{A^\dagger, B^\dagger\}$ sowie die Symmetrie der Vertexfunktionen $\Gamma_{\mathbf{1234}} = \Gamma_{\mathbf{-1-2-3-4}}$ benutzt.
Im Bereich tiefer Temperaturen sind nur Quasiteilchenanregungen bei kleinen Impulsen maßgeblich, so dass wir auch nur Wechselwirkungen im Bereich kleiner Impulsüberträge berücksichtigen müssen. Daher geben wir hier die Entwicklungen der Vertexfunktionen für kleine Eintritts- bzw. Austrittsimpulse an. Für deren Bestimmung benutzen wir (4.30) sowie daraus abgeleitet die Entwicklung der Bogoliubov-Koeffizienten

$$\begin{aligned}
u_{\boldsymbol{k}} &= u_0 + u_2\boldsymbol{k}^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) && \text{(5.17a)}\\
v_{\boldsymbol{k}} &= v_0 + v_2\boldsymbol{k}^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) && \text{(5.17b)}\\
u_0 &= \sqrt{\frac{1+\lambda+\tilde{\Delta}_0}{2\Delta_0}} = -v_0 && \text{(5.17c)}\\
u_2 &= -\frac{c_0^2(1+\lambda)}{4\sqrt{2}\sqrt{1+\lambda+\tilde{\Delta}_0}\Delta_0^{5/2}} && \text{(5.17d)}\\
v_2 &= -\frac{c_0^2(1+\lambda+2\tilde{\Delta}_0)}{4\sqrt{2}\sqrt{1+\lambda+\tilde{\Delta}_0}\Delta_0^{5/2}}, && \text{(5.17e)}
\end{aligned}$$

die für nicht-verschwindende Anisotropie nicht divergieren (vgl. Quantenantiferromagnet im Magnetfeld). Das dimensionslose Gap

$$\tilde{\Delta}_0 = \frac{\Delta_0}{\tilde{J}_0 S} = \sqrt{2\lambda+\lambda^2} \qquad \text{(5.18)}$$

wurde der Einfachheit halber eingeführt. Mittels der Definition (5.11a) findet man leicht die Entwicklung der Vorfaktoren der Vertexfunktionen

$$\begin{aligned}
\tau_{\boldsymbol{k}} &= \tau_2\boldsymbol{k}^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) && \text{(5.19a)}\\
\mu_{\boldsymbol{k}} &= \mu_0 + \mu_2\boldsymbol{k}^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) && \text{(5.19b)}\\
\tau_2 &= -\frac{c_0^2}{4\tilde{J}_0 S\sqrt{1+\lambda+\tilde{\Delta}_0}\Delta_0^3\sqrt{V\chi_0}} \sim \lambda^{-\frac{3}{2}} && \text{(5.19c)}\\
\mu_0 &= \sqrt{\frac{(1+\lambda+\tilde{\Delta}_0)\chi_0}{V}} \sim \lambda^0 && \text{(5.19d)}\\
\mu_2 &= \mu_0\frac{c_0^2}{2\Delta_0^2} \sim \lambda^{-1} && \text{(5.19e)}
\end{aligned}$$

und erhält mit (B.15) die Wechselwirkungen bei kleinen Impulsen

$$\begin{aligned}
\Gamma^{4\Phi}_{\mathbf{1234}} &\approx (8+4\lambda)\tau_2^4\boldsymbol{k}_1^2\boldsymbol{k}_2^2\boldsymbol{k}_3^2\boldsymbol{k}_4^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^{10}) \sim \lambda^{-6} && \text{(5.20a)}\\
\Gamma^{4\Pi}_{\mathbf{1234}} &\approx 4\lambda\mu_0^4 + 4\lambda\mu_0^4\mu_2(\boldsymbol{k}_1^2+\boldsymbol{k}_2^2+\boldsymbol{k}_3^2+\boldsymbol{k}_4^2) - \frac{a^2}{D}\mu_0^4(\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{k}_4) + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) \sim \lambda && \text{(5.20b)}\\
\Gamma^{2\Phi 2\Pi}_{\mathbf{1234}\perp} &\approx 4\tau_2^2\mu_0^2\boldsymbol{k}_1^2\boldsymbol{k}_2^2(6+\lambda) + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^6) \sim \lambda^{-3} && \text{(5.20c)}\\
\Gamma^{2\Phi 2\Pi}_{\mathbf{1234}\parallel} &\approx 6\tau_2^2\mu_0^2\boldsymbol{k}_1^2\boldsymbol{k}_2^2(1+\lambda) + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) \sim \lambda^{-3} && \text{(5.20d)}\\
\Gamma^{\Phi\Pi\Phi\Pi}_{\mathbf{1234}} &\approx 2\tau_2^2\mu_0^2\boldsymbol{k}_1^2\boldsymbol{k}_3^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) \sim \lambda^{-3} && \text{(5.20e)}\\
\tilde{\Gamma}^{4\Phi}_{\mathbf{1234}} &\approx \frac{a^2}{6D}\tau_2^4\boldsymbol{k}_1^2\boldsymbol{k}_2^2\boldsymbol{k}_3^2\boldsymbol{k}_4^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^{12}) \sim \lambda^{-6} && \text{(5.20f)}\\
\tilde{\Gamma}^{4\Pi}_{\mathbf{1234}} &\approx \frac{a^2}{6D}\mu_0^4(\boldsymbol{k}_1^2+\boldsymbol{k}_2^2+\boldsymbol{k}_3^2-3\boldsymbol{k}_4^2) + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) \sim (1+2\sqrt{2\lambda}) && \text{(5.20g)}\\
\tilde{\Gamma}^{2\Phi 2\Pi}_{\mathbf{1234}} &\approx -2\tau_2^2\mu_0^2\boldsymbol{k}_1^2\boldsymbol{k}_2^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) \sim \lambda^{-3} && \text{(5.20h)}\\
\tilde{\Gamma}^{2\Pi 2\Phi}_{\mathbf{1234}} &\approx 2\tau_2^2\mu_0^2\boldsymbol{k}_1^2\boldsymbol{k}_4^2 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4) \sim \lambda^{-3}. && \text{(5.20i)}
\end{aligned}$$

Wie man sieht, verschwinden alle Vertexfunktionen für kleine Impulse mindestens quadratisch, bis auf $\Gamma^{4\Pi}_{\mathbf{1234}}$, die einen endlichen Grenzwert bei nicht-verschwindender Anisotropie hat. Aufgrund der Erhaltung

des Gesamtspins im Falle des isotropen QAF sind keine starken Wechselwirkungen zwischen Spinwellen im Infrarot-Bereich erlaubt [75, 73]. Beim isotropen Heisenberg-QAF handelt es sich um eine schwache Wechselwirkung der antiferromagnetischen Fluktuationen. Man beachte weiterhin, dass die Vorfaktoren fast aller anderen Vertexfunktionen für kleine Anisotropien $\lambda \to 0$ divergieren und so zum in [73] diskutierten endlichen Grenzwert für kleine Impulse werden.

5.2.1 Interpretation der Operatoren

Die oben dargestellte, etwas unkonventionelle Formulierung der Spinwellentheorie durch hermitesche Operatoren, scheint zunächst einmal das Problem komplizierter zu machen. Damit erkauft man sich allerdings eine leichtere physikalische Interpretation der benutzten Operatoren. Wir formulieren dazu die Spinoperatoren und ihre Pendants für den Antiferromagneten, die gestaffelten Spinoperatoren im Impulsraum

$$S^{\chi}_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_i e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} S^{\chi}_i \tag{5.21a}$$

$$S^{\chi}_{\mathrm{st}\,\boldsymbol{k}} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_i e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} S^{\chi}_i \zeta_i. \tag{5.21b}$$

Gemäß der sphärischen Zerlegung gelten die Definitionen für $\chi \in \{+, -, \|, x, y\}$. Betrachtet man diese Größen in linearer Spinwellentheorie, was dem Abbruch der Entwicklung (3.9) nach nullter Ordnung entspricht, so erhält man

$$S^{z}_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\frac{1}{N}} S\, \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{Q}} \tag{5.22a}$$

$$S^{z}_{\mathrm{St}\boldsymbol{k}} = \sqrt{\frac{1}{N}} \left(S\, \delta_{\boldsymbol{k},0} - \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (\tau^2_{\boldsymbol{k}} \Phi_{-\boldsymbol{k}\sigma} \Phi_{\boldsymbol{k}\sigma} + \mu^2_{\boldsymbol{k}} \Pi_{-\boldsymbol{k}\sigma} \Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}) \right) \tag{5.22b}$$

$$S^{y}_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{S} \tau_{\boldsymbol{k}} \Phi_{\boldsymbol{k}+} = \sqrt{\frac{1}{N}} \lambda^{-1}_{\boldsymbol{k}} \Phi_{\boldsymbol{k}+} \tag{5.22c}$$

$$S^{x}_{\boldsymbol{k}} = -\sqrt{S} \tau_{\boldsymbol{k}} \Phi_{\boldsymbol{k}-} = -\sqrt{\frac{1}{N}} \lambda^{-1}_{\boldsymbol{k}} \Phi_{\boldsymbol{k}-} \tag{5.22d}$$

$$S^{y}_{\mathrm{St}\boldsymbol{k}} = \sqrt{S} \mu_{\boldsymbol{k}} \Pi_{\boldsymbol{k}-} = \frac{S}{\sqrt{N} a^D} \lambda_{\boldsymbol{k}} \Pi_{\boldsymbol{k}-} \tag{5.22e}$$

$$S^{x}_{\mathrm{St}\boldsymbol{k}} = \sqrt{S} \mu_{\boldsymbol{k}} \Pi_{\boldsymbol{k}+} = \frac{S}{\sqrt{N} a^D} \lambda_{\boldsymbol{k}} \Pi_{\boldsymbol{k}+}. \tag{5.22f}$$

Hierbei haben wir die dimensionslose Konstante

$$\lambda_{\boldsymbol{k}} = \mu_{\boldsymbol{k}} a^D \frac{N}{S} = \frac{\tau_{\boldsymbol{k}}}{\sqrt{N} S} \tag{5.23}$$

eingeführt, um die korrekte Spinabhängigkeit aufzuzeigen. Betrachtet man die Gleichungen, so stellt man fest, dass die ferromagnetische Magnetisierung (5.22a) für den statischen Fall ($\boldsymbol{k} = 0$) verschwindet, wohl aber für andere Wellenvektoren ungleich Null sein kann, da im Néel-Grundzustand wie auch im korrekten Grundzustand eine langreichweitige Ordnung auftritt [11, 54]. Dagegen erhalten wir für $\boldsymbol{k} = 0$ im Wesentlichen die volle gestaffelte Magnetisierung des Néel-Zustandes in (5.22b), die um die Erwartungswerte aller Operatoren vermindert wird. Die Gleichungen ((5.22c)-(5.22f)) zeigen eine Proportionalität der Spinoperatoren zu den eingeführten hermiteschen Operatoren.
Abschließend kann man also zusammenfassen, dass die Operatoren $\Phi_{\boldsymbol{k}\sigma}$ die ferromagnetischen Fluktuationen in den Richtungen senkrecht zur Anisotropie repräsentieren, während die $\Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}$-Operatoren gerade die antiferromagnetischen Fluktuationen senkrecht zur Anisotropierichtung darstellen.

5.2.2 Vorteile der hermiteschen Parametrisierung

1. Schwache Wechselwirkungen zwischen antiferromagnetischen Magnonen
   Wie schon im Fall ohne Magnetfeld diskutiert [73, 80], verschwinden die Vertexfunktionen, die die

Wechselwirkungen zwischen antiferromagnetischen Magnonen vermitteln, für kleine Impulse quadratisch. Im Falle des QAF mit Anisotropie hat der Vertex (5.15b) zwar einen endlichen Wert für $\boldsymbol{k} = 0$, der aber für $\lambda \to 0$ verschwindet (5.20b). Alle anderen Vertexfunktionen des Holstein-Primakoff-Hamiltonian verschwinden sogar in höheren Ordnungen der Impulse (5.20) und sollten daher für niederenergetische Anregungen unwichtig sein, solange die Anisotropie nicht verschwindet. Ganz anders liegt der Fall beim gewöhnlichen Erzeuger-Vernichter-Zugang, wo alle Vertexfunktionen der 2-Teilchen-Wechselwirkung in gewissen Grenzwerten infrarot-divergent sind [73]. Die auftretenden Divergenzen kürzen sich allerdings in bisher berechneten physikalischen Größen bis zur 2. Ordnung in $1/S$ heraus (z. B. in [14]). Daher scheint der gewöhnliche Zugang zu kompliziert für eine systematische Betrachtung des Quantenantiferromagneten; die hermitesche Parametrisierung hat jedoch mathematisch günstigere Eigenschaften zur Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen relevanten Freiheitsgraden.

2. Physikalische Interpretation der Operatoren
   Die Operatoren können gemäß der Betrachtungen in (5.2.1) mit physikalischen Größen in Verbindung gebracht werden, ohne den Umweg über Bogoliubov-Koeffizienten machen zu müssen (siehe hierzu [62]).

3. Nichtlineares-σ-Modell
   Eine Verbindung zwischen der hermiteschen Parametrisierung und der zur Charakterisierung allgemeiner Heisenberg-Antiferromagneten erfolgreichen Theorie des Nichtlinearen-σ-Modells (NLSM) ist möglich. Während das NLSM nicht nur Heisenberg Magnete mit NN-Wechselwirkung beschreiben kann, berücksichtigt es aber nur bestimmte Wechselwirkungen zwischen Magnonenfreiheitsgraden. Dagegen beschränken wir uns auf Heisenberg-Modelle mit NN-Wechselwirkung, berücksichtigen aber zusätzliche Wechselwirkungsterme zwischen Spinwellen [80].

4. Endliche Ausdehnung des Antiferromagneten
   Wie schon von Anderson in [44] vorgeschlagen, ist die Berücksichtigung von finite-size Effekten in der Spinwellentheorie des Quantenantiferromagneten in der Hermiteschen Parametrisierung einfacher.[23] Dennoch ist dieser Zugang lange Zeit in Vergessenheit geraten [73].

5.3 Freie Green-Funktion $T = 0$

Für eine störungstheoretische Behandlung unseres wechselwirkenden Modells von Bosonen, ausgedrückt durch die hermiteschen Felder (5.3), brauchen wir zunächst einmal die ungestörten Korrelationsfunktionen oder freie Propagatoren. Dazu gehen wir vom freien Spinwellenmodell mit dem quadratischen Hamiltonian (4.35) aus. Für $T = 0$ ist der freie Propagator dann als Green-Funktion im Heisenberg-Bild gemäß

$$\begin{aligned} iG_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}', t - t') &= \langle 0 | \hat{T} \left[\Psi_{\boldsymbol{k}\sigma}(t) \Psi_{\boldsymbol{k}'\sigma'}(t) \right] | 0 \rangle && (5.24) \\ &= \langle 0 | \Psi_{\boldsymbol{k}\sigma} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t')} \Psi_{\boldsymbol{k}'\sigma'} | 0 \rangle && (5.25) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_{\boldsymbol{k}\sigma}(t-t')} \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} && (5.26) \end{aligned}$$

gegeben, wobei der Zeitordnungsoperator $\hat{T}$ analog zu (6.81) definiert ist und der normierte Vielteilchengrundzustand $|0\rangle$ die Eigenschaft

$$\Psi_{\boldsymbol{k}\sigma} | 0 \rangle = 0 \tag{5.27}$$

hat. Im letzten Schritt haben wir die Eigenwertgleichung des Hamiltonian sowie den Kommutator (4.33) benutzt. Die gleichzeitige Green-Funktion $t = t'$ ist dann durch

$$iG_{\sigma\sigma'}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} = \langle \Psi_{\boldsymbol{k}\sigma} \Psi_{\boldsymbol{k}'\sigma'} \rangle \tag{5.28}$$

definiert. Mittels der Transformation auf Operatorebene (5.6a) erhalten wir sofort auch die Propagatoren der hermiteschen Felder, die analog zu (5.28) als

$$iG_{AB} = \left\langle AB^{\dagger} \right\rangle , \qquad A, B \in \{ \Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}, \Phi_{\boldsymbol{k}\sigma} \} \tag{5.29}$$

[23] Das Problem der $\boldsymbol{k} = 0$-Mode wird durch die Wahl von Wellenpaketzuständen behoben, die zwar keine Eigenzustände sind aber deren Zeitentwicklung für die betrachteten Systeme sehr langsam verläuft.

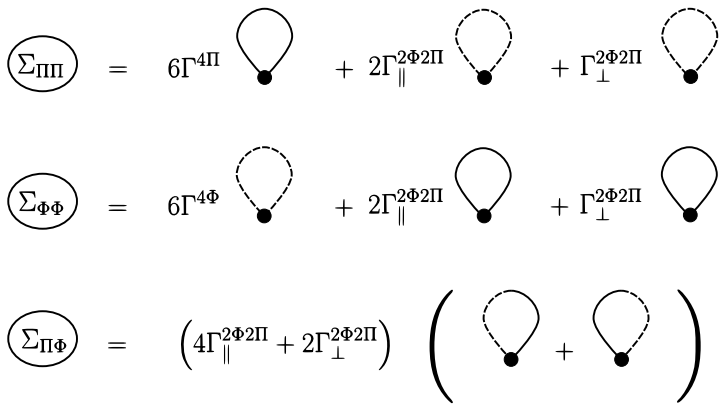

Abbildung 19: Berechnung der Selbstenergie in erster Ordnung Störungstheorie: Durchgehende Linien entsprechen den (ungerichteten) Propagatoren der Π-Felder, gestrichelte Linien entsprechen den Propagatoren der Φ-Felder. Die nicht-diagonalen Propagatoren sind entsprechend durch jeweils halb gestrichelte und durchgezogene Linien dargestellt. Gemäß der Formel (5.33) wird jeweils noch über σ summiert.

definiert sind. Wie nicht anders zu erwarten sind die Propagatoren wieder diagonal im $\boldsymbol{k}$-Raum. Wir schreiben nun in Matrixform [38]

$$\boxed{iG_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} = \begin{pmatrix} \langle \Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}\Pi_{-\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle & \langle \Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}\Phi_{-\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle \\ \langle \Phi_{\boldsymbol{k}\sigma}\Pi_{-\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle & \langle \Phi_{\boldsymbol{k}\sigma}\Phi_{-\boldsymbol{k}'\sigma'}\rangle \end{pmatrix} = \frac{V}{2E_{\boldsymbol{k}}}\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}\begin{pmatrix} \chi_0^{-1} & i \\ -i & \chi_0 E_{\boldsymbol{k}}^2 \end{pmatrix}.} \tag{5.30}$$

Damit erfüllt der Propagator die übliche Hermizitätsbedingung $iG = (iG)^\dagger$, ist aber nicht diagonal. Für die spätere Darstellung im Frequenzraum ist eine Diagonalisierung nicht notwendig, da die Zeitableitung im Frequenzraum ohnehin nicht-diagonale Terme erzeugt.

5.4 Hartree-Fock-Näherung

Im nächsten Schritt führen wir eine Störungtheorie erster Ordnung explizit durch. Dazu bedienen wir uns diagrammatischer Methoden, um die einzelnen Schritte übersichtlich zu halten. Für diese Näherung, die auf der Aufspaltung der Felder in ihre Erwartungswerte und entsprechende Fluktuationen beruht, ersetzen wir jeweils vier Operatoren des Wechselwirkungsterms durch quadratische Anteile und Operatormittelwerte, zum Beispiel

$$\Pi_{\mathbf{1}}\Pi_{\mathbf{2}}\Pi_{\mathbf{3}}\Pi_{\mathbf{4}} \to \overbrace{\Pi_{\mathbf{1}}\Pi_{\mathbf{2}}}\Pi_{\mathbf{3}}\Pi_{\mathbf{4}} + \Pi_{\mathbf{1}}\Pi_{\mathbf{2}}\overbrace{\Pi_{\mathbf{3}}\Pi_{\mathbf{4}}} + \Pi_{\mathbf{1}}\overbrace{\Pi_{\mathbf{2}}\Pi_{\mathbf{3}}}\Pi_{\mathbf{4}} + \overbrace{\Pi_{\mathbf{1}}\Pi_{\mathbf{2}}}\Pi_{\mathbf{3}}\Pi_{\mathbf{4}} + \overbrace{\Pi_{\mathbf{1}}\Pi_{\mathbf{2}}\Pi_{\mathbf{3}}\Pi_{\mathbf{4}}} + \Pi_{\mathbf{1}}\overbrace{\Pi_{\mathbf{2}}\Pi_{\mathbf{3}}}\Pi_{\mathbf{4}}. \tag{5.31}$$

Die Kontraktion zweier Operatoren wird nun durch deren Mittelwert zum Beispiel

$$\overbrace{\Pi_{\mathbf{1}}\Pi_{\mathbf{2}}} = \langle \Pi_{\mathbf{1}}\Pi_{\mathbf{2}}\rangle = \frac{V}{2E_{\mathbf{1}}\chi_0}\delta_{\mathbf{1}+\mathbf{2},0} \tag{5.32}$$

ersetzt und die Einträge in (5.30) benutzt. Diese Rechnung lässt sich grafisch durch die in Abbildung 19 dargestellten Gleichungen für die Selbstenergiebeiträge der Felder veranschaulichen. Unter Berücksichtigung der Symmetrien der Vertexfunktionen und der Hermizität von $G_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$ geben insbesondere die Terme mit Antikommutator keinen Beitrag. Nach längerer, aber elementarer Rechnung unter Berücksichtigung der Symmetrien der Vertexfunktionen (5.30) und der Eigenschaft (B.16), können wir den Wechselwir-

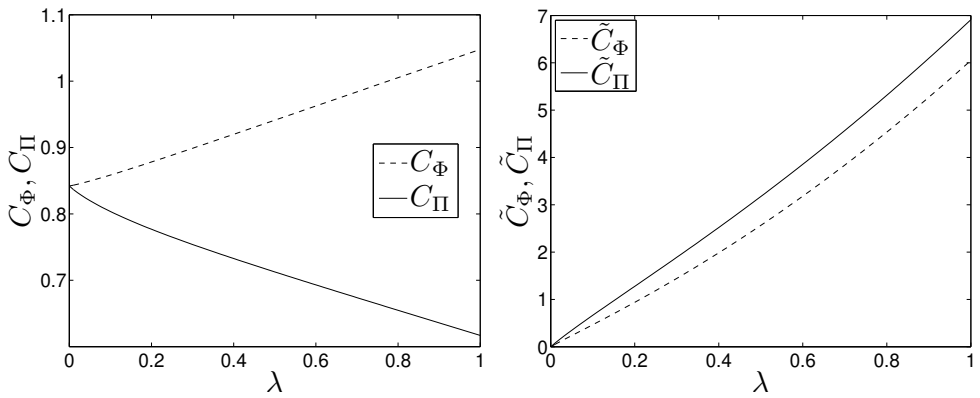

Abbildung 20: Ergebnis der Auswertung der Integrale (5.33)

kungsterm des Holstein-Primakoff-Hamiltonian (5.13a) und (5.13b) durch den quadratischen Anteil

$$\boxed{H_4 = \frac{1}{4VS}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\left[\chi_0^{-1}\Phi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\Phi_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(1 - C_\Phi - \frac{\tilde{C}_\Phi}{1+\lambda+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right) + \chi_0 E^2_{\boldsymbol{k}}\Pi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(1 - C_\Pi - \frac{\tilde{C}_\Pi}{1+\lambda-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right)\right]}$$

ersetzen. Wobei die Konstanten als Summen über die reduzierte Brillouin-Zone

$$C_\Phi = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{1-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}{1+\lambda-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}} + \frac{1+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}(1+\lambda)}{1+\lambda+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right) \tag{5.33a}$$

$$C_\Pi = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{1-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}(1+\lambda)}{1+\lambda-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}} + \frac{1+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}{1+\lambda+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right) \tag{5.33b}$$

$$\tilde{C}_\Phi = \frac{4\lambda}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}{1+\lambda-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}} - \frac{2+\lambda}{1+\lambda+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right) \tag{5.33c}$$

$$\tilde{C}_\Pi = \frac{4\lambda}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}\left(-\frac{\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}{1+\lambda+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}} + \frac{2+\lambda}{1+\lambda-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right) \tag{5.33d}$$

gegeben sind. Man beachte, dass (5.33) bereits diagonal ist, was ein wesentlicher Vorteil dieser Art von Störungstheorie in den hermiteschen Feldern ist.[24]

5.4.1 Renormierungsfaktoren

Die Konstanten (5.33) ergeben eine impulsabhängige Renormierung der Suszeptibilität[25] und Energiedispersion. Wir führen das Ergebnis auf den Hamiltonian des freien Magnonengases (5.8) zurück indem wir die Ersetzungen

$$\chi_0 \rightarrow \chi = Z_\chi(\boldsymbol{k})\chi_0 \tag{5.34a}$$

$$E_{\boldsymbol{k}} \rightarrow Z(\boldsymbol{k})E_{\boldsymbol{k}} \tag{5.34b}$$

[24] Würde man eine Störungstheorie in den Magnonen-Erzeugern und -Vernichtern aus (4.35) durchführen, so wäre der entstehende Hamiltonian nicht mehr diagonal und eine erneute Bogoliubov-Transformation notwendig (siehe Abschnitt 7.1.2).

[25] Gemeint ist die Renormierung der Suszeptibilität durch Wechselwirkungen.

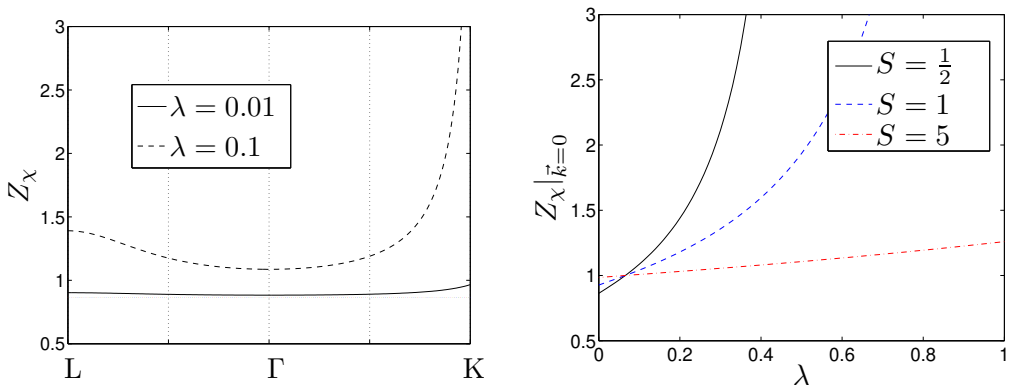

Abbildung 21: Der Renormierungsfaktor Z_χ ist in erster Ordnung Störungstheorie (enthält auch höhere Ordnungen in $1/S$) impulsabhängig. Der Wert ohne Anisotropie $Z_\chi = 0.86$ aus [73] wird im Grenzwert $\lambda \to 0$ erreicht (gepunktete Linie). links: Veranschaulichung der Impulsabhängigkeit entlang der Zonenlinien hoher Symmetrie für $S = 1/2$, rechts: $\boldsymbol{k} = 0$-Werte für verschiedene Spins gegen die Stärke der Anisotropie aufgetragen.

machen wobei die Renormierungsfaktoren durch

$$Z_\chi(\boldsymbol{k}) = \left[1 + \frac{1}{2S}\left(1 - C_\Phi - \frac{\tilde{C}_\Phi}{1+\lambda+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right)\right]^{-1} \tag{5.35a}$$

$$Z(\boldsymbol{k}) = \sqrt{\frac{1 + \frac{1}{2S}\left(1 - C_\Pi - \frac{\tilde{C}_\Pi}{1+\lambda-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right)}{1 + \frac{1}{2S}\left(1 - C_\Phi - \frac{\tilde{C}_\Phi}{1+\lambda+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right)}} \tag{5.35b}$$

gegeben sind. Für verschwindende Anisotropie $\lambda = 0$ verschwindet auch die Impulsabhängigkeit

$$1 - \lim_{\lambda\to 0} C_\Phi = 1 - \lim_{\lambda\to 0} C_\Pi = \frac{2}{N}\sum_{\boldsymbol{k}} \epsilon_{\boldsymbol{k}} = C \tag{5.36a}$$

$$\lim_{\lambda\to 0} \tilde{C}_\Phi = \lim_{\lambda\to 0} \tilde{C}_\Pi = 0 \tag{5.36b}$$

und wir erhalten das Ergebnis

$$Z_\chi = \left[1 + \frac{C}{2S}\right]^{-1} \tag{5.37a}$$

$$Z_c = 1 + \frac{C}{2S} \tag{5.37b}$$

aus [73] (vgl. auch [89, 54, 55]), so dass die Magnonendispersion nur gemäß

$$H_4 = \frac{C}{2S}\frac{1}{2V}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(\chi_0^{-1}\Pi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\Pi_{\boldsymbol{k}\sigma} + \chi_0 E_{\boldsymbol{k}}^2 \Pi^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}\right) = \frac{C}{2S}H_2 \tag{5.38}$$

reskaliert wird [47, 85].
Aus der speziellen Form der Dispersion für kleine Impulse (4.30) ist es auch möglich aus (5.35b) den Renormierungsfaktor des Gaps

$$Z_\Delta = \frac{\Delta}{\Delta_0} = Z(0) = \sqrt{\frac{1 + \frac{1}{2S}\left(1 - C_\Pi - \frac{\tilde{C}_\Pi}{\lambda}\right)}{1 + \frac{1}{2S}\left(1 - C_\Phi - \frac{\tilde{C}_\Phi}{2+\lambda}\right)}} \tag{5.39}$$

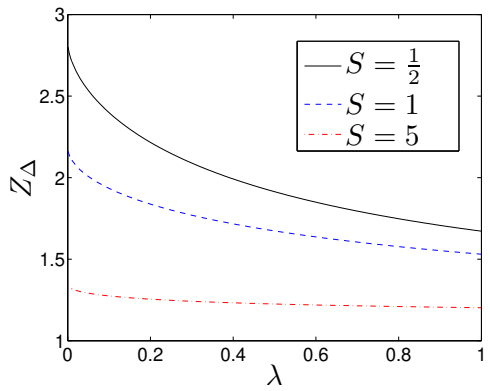

Abbildung 22: Renormierungsfaktor der Anregungslücke Z_Δ für verschiedene Spins. Für kleine Anisotropien wird die Renormierung des Gaps groß, während für $S \to \infty$ der klassische Grenzwert $Z_\Delta = 1$ erreicht wird; den Grenzwert $\lambda \to 0$ kann man nicht durchführen, da die Dispersion für verschwindenden Anisotropie linear im Impuls wird.

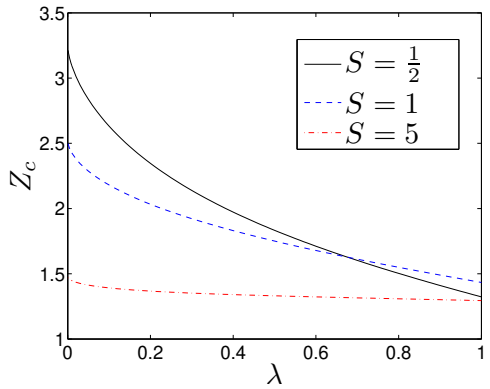

Abbildung 23: Darstellung der Spinwellenrenormierung Z_c für verschiedene Spins als Funktion der Anisotropie. Der Grenzwert $\lambda \to 0$ kann nicht ausgeführt werden, da für $\lambda = 0$ die Form der Dispersion von (4.30) in $E_{\boldsymbol{k}} = c_0|\boldsymbol{k}|$ übergeht und damit die relevanten Impulse durch (5.45) beschränkt sind.

sowie einen Renormierungsfaktor der Spinwellengeschwindigkeit

$$Z_c = \sqrt{Z_\Delta^2 + \frac{(2\lambda+\lambda^2)Z_1}{2}} \tag{5.40}$$

$$Z_1 = -\frac{\tilde{C}_\Phi \lambda^2 (C_\Pi - 1 - 2S) + \tilde{C}_\Pi [2\tilde{C}_\Phi (1+\lambda) + (2+\lambda)^2 (C_\Phi - 1 - 2S)]}{2\lambda^2 [\tilde{C}_\Phi + (2+\lambda)(C_\Phi - 1 - 2S)]^2} \tag{5.41}$$

zu definieren, so dass die Dispersion in Hartree-Fock-Näherung für kleine Impulse dann die Form

$$E_{\boldsymbol{k}} = Z_\Delta \Delta_0 \left(1 + \frac{Z_c^2 c_0^2}{2 Z_\Delta^2 \Delta_0^2} \boldsymbol{k}^2\right) \tag{5.42}$$

hat.
Der Dyson-Maleev-Hamiltonian hat die Zusatzterme (5.14), die aber in der Hartree-Fock-Näherung keinen zusätzlichen Beitrag geben, so dass beide Formulierungen sowohl in der linearen Spinwellentheorie als auch in der 1. Ordnung Störungstheorie äquivalent sind. Wegen der schwachen Wechselwirkung bei kleinen Impulsen (5.20) ist auch in höheren Ordnungen bei nicht-verschwindender Anisotropie $\lambda \neq 0$ kein wesentlicher Beitrag zu erwarten.

Koeffizienten der $1/S$-Entwicklung Die oben angegebenen Renormierungsfaktoren sind bei Anwesenheit der Anisotropie in 1. Ordnung Störungstheorie berechnet, d.h. konsistent bis zur Ordnung $1/S$,

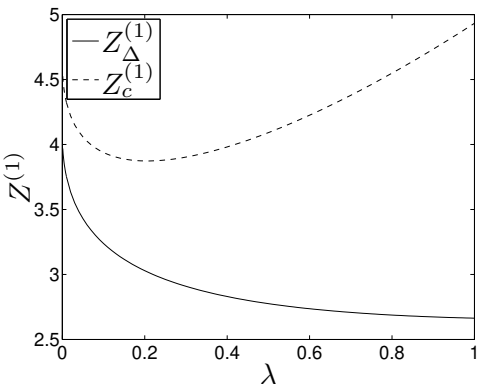

Abbildung 24: Darstellung der echten Koeffizienten erster Ordnung der Renormierungsfaktoren (5.44c) und (5.44d), die für $\lambda \to 0$ die Werte $Z_c^{(1)} \approx 4.64$ und $Z_\Delta^{(1)} \approx 4.08$ annehmen.

aber enthalten noch höhere Terme. Eine Entwicklung nach inversem Gesamtspin ergibt schließlich:

$$Z_\chi(\boldsymbol{k}) = 1 + \frac{Z_\chi^{(1)}(\boldsymbol{k})}{2S} + \mathcal{O}(1/S^2) \tag{5.43a}$$

$$Z(\boldsymbol{k}) = 1 + \frac{Z^{(1)}(\boldsymbol{k})}{2S} + \mathcal{O}(1/S^2) \tag{5.43b}$$

$$Z_\Delta = 1 + \frac{Z_\Delta^{(1)}}{2S} + \mathcal{O}(1/S^2) \tag{5.43c}$$

$$Z_c = 1 + \frac{Z_c^{(1)}}{2S} + \mathcal{O}(1/S^2) \tag{5.43d}$$

mit den Koeffizienten

$$Z_\chi^{(1)}(\boldsymbol{k}) = 1 - C_\Phi - \frac{\tilde{C}_\Phi}{1+\lambda-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}} \tag{5.44a}$$

$$Z^{(1)}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{2}\left(C_\Phi - C_\Pi + \frac{\tilde{C}_\Phi}{1+\lambda+\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}} - \frac{\tilde{C}_\Pi}{1+\lambda-\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}}\right) \tag{5.44b}$$

$$Z_\Delta^{(1)} = Z^{(1)}(0) \tag{5.44c}$$

$$Z_c^{(1)} = Z_\Delta^{(1)} + \frac{\lambda^2+2\lambda}{4} Z_1^{(1)} \tag{5.44d}$$

$$Z_1^{(1)} = \frac{\tilde{C}_\Phi \lambda^2 + \tilde{C}_\Pi (2+\lambda)^2}{2(2\lambda+\lambda^2)^2}. \tag{5.44e}$$

5.4.2 Vergleich der Ergebnisse

Betrachtet man das Ergebnis für die Renormierungsfaktoren (siehe Abbildungen 21, 22 und 23), so nähern sich alle Renormierungsfaktoren für den klassischen Grenzfall $S \to \infty$ dem Wert 1. Dies ist klar, da alle hier berechneten Korrekturen höherer Ordnung in $1/S$ sind. Für Spinsysteme mit großem Gesamtspin spielen höhere Korrekturen und somit Quantenfluktuationen eine geringere Rolle und die Renormierungsfaktoren sind nahe bei 1.

Die Abhängigkeit des Renormierungsfaktors Z_χ vom Wellenvektor wird weiterhin für verschwindende Anisotropie klein. Das Ergebnis von [73] für $\lambda \to 0$ wird reproduziert (siehe Abbildung 21). Stärkere Anisotropien schlagen sich so im Renormierungsfaktor der Suszeptibilität nieder, dass χ nun eine richtungsgemittelte Suszeptibilität ist und somit im Falle von Anisotropien erhöht wird. Die Suszeptibilität ist dann keine Zahl mehr, sondern wird zu einem Tensor, dessen Richtungsmittelwert um so mehr abweicht je stärker der damit verbundene Ellipsoid von der Kugelgestalt abweicht. Insofern ist das Ergebnis für Z_χ ein klassisch zu erwartendes Ergebnis und liefert kaum neue Erkenntnisse.

Ganz anders sieht es beim Renormierungsfaktor des Gaps Z_Δ aus: Bei großen Anisotropien ist die Anregungslücke auch groß (siehe Abbildung 15). Daher spielen für starke Anisotropien die Wechselwirkungen zwischen den antiferromagnetischen Fluktuationen eine geringe Rolle und der Renormierungsfaktor wird kleiner, d.h. das aus linearer Spinwellentheorie berechnete Gap stimmt gut mit dem realen Gap überein. Dagegen ist das Gap für kleine Anisotropien klein und Quantenfluktuationen wirken so auf die Eigenschaften der Quasiteilchen, dass das Gap auch in Mean-Field-Berechnungen stark renormiert wird (für $S = 1/2$ ergibt sich nahe bei $\lambda = 0$ ein endlicher Faktor von $Z_\Delta \approx 2.84$). Eine Erhöhung des Spins verringert wieder den Effekt gemäß der $1/S$-Entwicklung der Wechselwirkung.

Am schwierigsten ist die Renormierung der Spinwellengeschwindigkeit zu verstehen. Dies liegt daran, dass beim Verschwinden der Anisotropie $\lambda \to 0$ die Form der Dispersion grundlegend geändert wird. Während für $\lambda = 0$ eine Goldstone-Anregung mit $E_{\boldsymbol{k}} = c|\boldsymbol{k}|$ vorliegt, ist bei endlicher Anisotropie die Form der Dispersion nach oben gebogen und hat für kleine Wellenvektoren quadratische Abhängigkeit (4.30). Daher ist es nicht außergewöhnlich, dass sich Z_c für $\lambda \to 0$ nicht den bekannten Ergebnissen nähert, sondern ähnlich wie Z_Δ groß wird.[26] Die physikalische Interpretation von Z_c als Renormierungsfaktor ist nur im Bereich linearer Dispersion sinnvoll: Mit dem Zusammenhang (4.28) haben wir für große $\boldsymbol{k}$ eine lineare Dispersion, so dass die Definition von Z_c nur im Bereich

$$\frac{\Delta}{c} \ll |\boldsymbol{k}| \ll \frac{1}{a} \tag{5.45}$$

Sinn macht. Weiterhin ist zu beachten, dass die Renormierungsfaktoren zu verschiedenen Spins sich schneiden (z. B. die von $S = 1/2$ und $S = 1$ bei etwa $\lambda = 0.7$). Sie bleiben aber für alle λ immer größer als 1 und erreichen 1 im Grenzwert $S \to \infty$. Die Schnittpunkte scheinen vielmehr ein Artefakt des Modells zu sein, welches für kleine Spins und große Anisotropien eher in das Ising-Modell übergeht und somit unterschiedliche Spinwellengeschwindigkeiten hervorruft.

Abschließend sollte man das Ergebnis des Renormierungsfaktors der Anregungslücke hervorheben. Der Einfluss von Wechselwirkungen hat für kleine Anisotropien einen großen Effekt und vergrößert das Gap wesentlich. Insbesondere die Kopplung zwischen longitudinalen und transversalen Fluktuationen der Felder, die in der Parametrisierung (5.3) eingeführt werden, erzeugt wohl ähnliche Divergenzen für kleine Anisotropien bzw. für kleine Anregunslücken, wie sie auch in [21] beschrieben sind. Der Fall $\lambda \ll 1$ ist auch in realen Systemen am ehesten realisiert, da die Effekte des Kristallfeldes auf die Austauschkopplungen (1.45) eher klein sind, bzw. die schwachen Dipol-Dipol-Wechselwirkungen auch mittels Easy-Axis-Anisotropie modelliert werden können. [21, 81]

Die Störungstheorie 1. Ordnung scheint zwar schon einige interessante Effekte zu zeigen, jedoch wäre noch zu überprüfen, ob in höheren Ordnungen Störungstheorie noch neue Effekte auftreten, insbesondere die in [21] gefundenen großen Beiträge zur Renormierung der Anregungslücke. Dazu müsste man die gemäß Abbildung 19 durchgeführte Näherung der Selbstenergie auf die 2. Ordnung erweitern. Weiterhin wurden in [75] sowohl Eigenschaften des Quantenantiferromagneten mit Anisotropie im Magnetfeld als auch bei endlichen Temperaturen untersucht. Daher scheint es sinnvoll unsere Theorie auch auf diese beiden Aspekte zu erweitern. Aus diesem Grund wird im nächsten Abschnitt kurz der $T \neq 0$-Formalismus für die benutzte hermitesche Parametrisierung vorgestellt.

5.5 Matsubara-Methode

Analog zur Formulierung des Vielteilchenproblems im Phasenraum mittels Funktionalintegralformalismus (siehe Appendix F) behandeln wir die hermiteschen Operatoren im $\boldsymbol{k}$-Raum nun als Orts- und Impulsvariablen mit Modenindex $(\boldsymbol{k}, \sigma)$ und erhalten so ein Funktionalintegral über $\mathcal{C}$-Zahlen.[27] Die

[26] Der numerische Wert für $\lambda \to 0$ ist $Z_c \approx 3.26$, hat aber wegen der Beschränkung der relevanten Impulse (5.45) keine physikalische Bedeutung.

[27] Im Phasenraum handelt es sich um reelle Variablen. Da wir unsere Feldoperatoren Π und Φ aber mit reellen Eigenwerten im Ortsraum gewählt haben, sind die entsprechenden Eigenwerte der Operatoren im Impulsraum nicht mehr reell und somit auch die Felder im Funktionalintegral komplex.

Fourier-Tranformation in den Frequenzraum lautet

$$\Pi_{\boldsymbol{k}\sigma}(\tau) = \int_\omega e^{-i\omega\tau}\Pi_{K\sigma} \tag{5.46a}$$

$$\Phi_{\boldsymbol{k}\sigma}(\tau) = \int_\omega e^{-i\omega\tau}\Phi_{K\sigma} \tag{5.46b}$$

wobei

$$K = \begin{cases} (\boldsymbol{k}, i\omega_n) & T > 0 \\ (\boldsymbol{k}, \omega) & T = 0 \end{cases} \tag{5.47}$$

einem $(D+1)$-Wellenvektor entspricht und

$$\int_\omega = \begin{cases} \frac{1}{\hbar\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty} & T > 0 \\ \int \frac{d\omega}{2\pi} & T = 0 \end{cases} \tag{5.48}$$

eine Abkürzung für die Summation / Integration ist. Mit der Relation

$$\int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i(\omega_n+\omega_m)\tau} = \delta_{-n,m}\hbar\beta \tag{5.49}$$

sowie der Fourier-Darstellung der δ-Funktion lässt sich die Gaußsche Wirkung des Modells schreiben als

$$\begin{aligned} S_0[\Pi_{K\sigma}, \Phi_{K\sigma}] &= \frac{1}{2}\sum_\sigma \int_K \left(\chi_0^{-1}\Phi_{-K\sigma}\Phi_{K\sigma} + \chi_0 E_{\boldsymbol{k}}^2 \Pi_{-K\sigma}\Pi_{K\sigma} - \omega(\Phi_{-K\sigma}\Pi_{K\sigma} - \Pi_{-K\sigma}\Phi_{K\sigma})\right) \\ &= \frac{1}{2}\sum_\sigma \int_K \begin{pmatrix} \Phi_{-K\sigma}\Pi_{-K\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_0^{-1} & -\omega \\ \omega & \chi_0 E_{\boldsymbol{k}}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{K\sigma} \\ \Pi_{K\sigma} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{5.50}$$

wobei

$$\int_K = \int \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D}\int_\omega . \tag{5.51}$$

Führen wir nun einen 4-komponentigen Vektor

$$\boldsymbol{\Psi}_K = \begin{pmatrix} \Phi_{K+} \\ \Phi_{K-} \\ \Pi_{K+} \\ \Pi_{K-} \end{pmatrix} \tag{5.52}$$

ein, so lässt sich vereinfachend

$$\boxed{S_0[\boldsymbol{\Psi}] = \frac{1}{2}\int_K \boldsymbol{\Psi}_K^+ \tilde{H} \boldsymbol{\Psi}_K} \tag{5.53}$$

mit der Matrix

$$\tilde{H} = \mathbf{1}_2 \otimes \begin{pmatrix} \chi_0^{-1} & -\omega \\ \omega & \chi_0 E_{\boldsymbol{k}}^2 \end{pmatrix} \tag{5.54}$$

schreiben, wobei die Matrix $\tilde{H}$ in Abwesenheit von Magnetfeldern diagonal in σ ist. Die Korrelationsfunktionen in Gaußscher Näherung erhält man schließlich, indem man die volle Wirkung im Funktionalintegral (F.7) durch die Wirkung (5.53) ersetzt, das entsprechende Gaußsche Integral löst und die Fourier-Koeffizienten der Imaginärzeit-Korrelationsfunktionen

$$\boxed{G_{K,K'} = V\delta_{K,-K'}\tilde{H}^{-1} = \frac{V\delta_{K,-K'}}{E_{\boldsymbol{k}}^2 + \omega^2} \begin{pmatrix} \chi_0 E_{\boldsymbol{k}}^2 & \omega \\ -\omega & \chi_0^{-1} \end{pmatrix}} \tag{5.55}$$

berechnet. Die formale Gleichheit mit dem Propagator (5.30), der ohne Pfadintegralformalismus abgeleitet wurde, aber nicht so einfach auf den Fall $T \neq 0$ verallgemeinert werden kann, zeigen wir durch

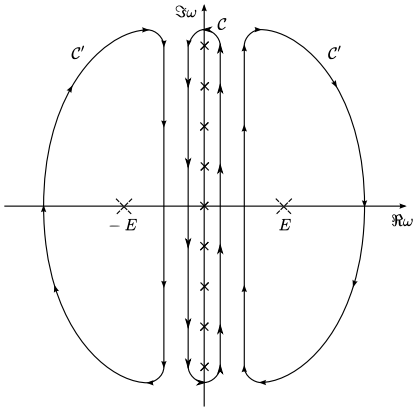

Abbildung 25: Wahl der Integrationswege $\mathcal{C}$ und $\mathcal{C}'$ sowie Pole des Integranden in (5.58a) auf der imaginären Achse bei den bosonischen Matsubara-Frequenzen $i\omega_n$ (kleine Kreuze auf der imaginären Achse) sowie die Quasiteilchenresiduen bei $\pm E_{\boldsymbol{k}}$ (große Kreuze).

Rücktransformation in die Imaginärzeit-Darstellung mittels (F.10). Anstatt das ω-Integral direkt zu lösen, führen wir die Berechnung der Matsubara-Summe mittels eines komplexen Integrals [38] aus und nehmen dann den Grenzwert $T \to 0$.

$$\frac{1}{\hbar\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty} F(i\omega_n) = \frac{i}{2\pi\hbar}\int_{\mathcal{C}} \frac{F(\omega)d\omega}{1-\zeta e^{\beta\omega}} \qquad \zeta = \begin{cases} 1 & \text{Bosonen} \\ -1 & \text{Fermionen.} \end{cases} \tag{5.56}$$

Der Integrand auf der rechten Seite, der über den Weg $\mathcal{C}$ integriert wird (siehe Abbildung 25) hat einfache Pole an den Punkten, die den Matsubara-Frequenzen entsprechen und sammelt über den Residuen-Satz [90] gerade die Summe auf der linken Seite auf. In unserem Fall ist

$$F_1(i\omega_n) \sim \frac{e^{-i\omega_n\tau}}{E_{\boldsymbol{k}}^2-(i\omega_n)^2} \qquad F_2(i\omega_n) \sim \frac{\omega e^{-i\omega_n\tau}}{E_{\boldsymbol{k}}^2-(i\omega_n)^2} \tag{5.57}$$

was asymptotisch schneller als $\frac{1}{\omega}$ abfällt, so dass wir den Integrationsweg $\mathcal{C}'$ (siehe Abbildung 25) schließen und den Weg $\mathcal{C}$ durch den Weg $\mathcal{C}'$ ersetzen können:

$$G^0_{\Pi\Pi}(\boldsymbol{k},\tau) = \frac{V}{2\pi\hbar i\chi_0}\int_{\mathcal{C}'} \frac{e^{-\omega\tau}d\omega}{(E_{\boldsymbol{k}}^2-\omega^2)(1-e^{\beta\omega})} \tag{5.58a}$$

$$G^0_{\Pi\Phi}(\boldsymbol{k},\tau) = \frac{V}{2\pi}\int_{\mathcal{C}'} \frac{\omega e^{-\omega\tau}d\tau}{(E_{\boldsymbol{k}}^2-\omega^2)(1-e^{\beta\omega})}. \tag{5.58b}$$

Der Integrand von (5.58a) hat Pole an $\omega_0 = \pm E_{\boldsymbol{k}}$ mit den Residuen

$$a_{-1} = \frac{e^{\pm E\tau}}{2E_{\boldsymbol{k}}(1-e^{\pm\beta E})}, \tag{5.59}$$

so dass wir unter Berücksichtigung der Umlaufrichtung

$$G^0_{\Pi\Pi}(\boldsymbol{k},\tau) = \frac{V}{2E_{\boldsymbol{k}}\chi_0}\,\frac{\cosh(E_{\boldsymbol{k}}\tau)+\cosh(E_{\boldsymbol{k}}(\tau+\hbar\beta))}{\cosh(\hbar\beta E_{\boldsymbol{k}})} \tag{5.60a}$$

$$G^0_{\Phi\Phi}(\boldsymbol{k},\tau) = \frac{V\chi_0 E_{\boldsymbol{k}}}{2}\,\frac{\cosh(E_{\boldsymbol{k}}\tau)+\cosh(E_{\boldsymbol{k}}(\tau+\hbar\beta))}{\cosh(\hbar\beta E_{\boldsymbol{k}})} \tag{5.60b}$$

$$G^0_{\Pi\Phi}(\boldsymbol{k},\tau) = -\frac{iV}{2}\,\frac{-\sinh(E_{\boldsymbol{k}}\tau)+\sinh(E_{\boldsymbol{k}}(\tau+\hbar\beta))}{\cosh(\hbar\beta E_{\boldsymbol{k}})-1} = -G^0_{\Phi\Pi}(\boldsymbol{k}\tau) \tag{5.60c}$$

erhalten. Ausführung des Grenzwertes $T \to 0$ lässt die Brüche verschwinden und ergibt dann direkt die Einträge in (5.30).

5.6 Zusammenfassung

Im vorangegangenen Kapitel haben wir das Problem des Quantenantiferromagneten mit Anisotropie auf einen Zugang mittels hermitescher Operatoren abgebildet. In dieser Darstellung sind die physikalischen Freiheitsgrade des Spinsystems (Spinfluktuationen) durch die Operatoren repräsentiert, so dass Ergebnisse für die Korrelationsfunktionen leichter interpretiert werden können als im konventionellen Spinwellenzugang mit Magnonenerzeugern und -Vernichtern. Daneben haben die Wechselwirkungsvertizes für lange Wellenlängen endliche Grenzwerte und erzeugen keine Singularitäten in der Störungstheorie. Schließlich wurde mittels Störungstheorie der Einfluss der Wechselwirkung auf die Magnonendispersion in erster Ordnung berechnet und dieser in Renormierungsfaktoren quantifiziert. Für die Renormierung der Suszeptibilität durch Wechselwirkungen ergeben sich die aus der Literatur bekannten Grenzwerte der Renormierungsfaktoren in $1/S$-Entwicklung, während die Spinwellengeschwindigkeit sowie die Anregungslücke durch die Wechselwirkungen für kleine Anisotropien ($\lambda \ll 1$) stark renormiert werden, was am Übergang von quadratischer zu linearer Dispersion für $\lambda \to 0$ liegt. Wie auch in [21] sind die Renormierungsfaktoren in erster Ordnung Störungstheorie endlich, vergrößern aber sowohl die Spinwellengeschwindigkeit als auch die Anregungslücke für kleine Anisotropien, so dass die Berücksichtigung von Anisotropien bei der Beschreibung von realen Systemen für tiefe Temperaturen wichtig wird.
Eine Analyse in höheren Ordnungen Störungstheorie sowie die Betrachtung von Magnetfeldern steht ebenso noch aus wie die Berechnung der Temperaturabhängigkeiten der entsprechenden Größen, die auch im Experiment gemessen werden [81].

6 Anomale longitudinale Fluktuationen im wechselwirkenden Bose-Gas bei BEC von Magnonen

6.1 Überblick

Im Folgenden werden wir eine Beschreibung des Quantenantiferromagneten (QAF) in einem homogenen Magnetfeld ausarbeiten, die es erlaubt das Modellsystem auf das wechselwirkende Bose-Gas abzubilden. Wir werden sehen, wie die endliche Untergittermagnetisierung M_s des QAF als Ordnungsparameter mit dem Ordnungsparameter eines Bose-Einstein-Kondensats von Magnonen (MBEC) in Verbindung gebracht werden kann. Unter Verwendung von Symmetrieeigenschaften des wechselwirkenden Bose-Gases lassen sich Eigenschaften der Korrelationsfunktionen im Bereich langer Wellenlängen ableiten, die sich auf unser System übertragen lassen. Auf diese Weise erhalten wir ein nicht-pertubatives Ergebnis der antiferromagnetischen Spin-Spin-Korrelationsfunktion des QAF im Magnetfeld für $T = 0$. Daraus lässt sich mittels des Fluktuations-Disspiations-Theorems der entsprechende longitudinale Strukturfaktor $S_{\parallel}(\boldsymbol{q}, \omega)$ berechnen. Dieser beruht auf Fluktuationen des gestaffelten Spins in Richtung von M_s, die gerade als Richtung der Symmetriebrechung im Ortsraum ausgezeichnet ist. Es wird sich zeigen, dass $S_{\parallel}(\boldsymbol{q}, \omega)$ in den Dimensionen $1 < D \leq 3$, für die unsere Theorie gültig ist, einen kontinuierlichen Beitrag enthält. Weiterhin lässt sich das spektrale Gewicht dieses kritischen Kontinuums experimentell durch Einstellen des Magnetfeldes nahe des kritischen Magnetfeldes h_c des QAF kontrollieren und bietet somit einen Zugang für Messungen der Eigenschaften des wechselwirkenden Magnonengases in der symmetriegebrochenen Phase.

6.2 Motivation

Das Konzept des Quasiteilchens, wie es zum Beispiel in [91] eingeführt wird, geht davon aus, dass sich das Ensemble eines Vielteilchensystems durch die Wechselwirkungen der Teilchen untereinander wie ein System schwach wechselwirkender Teilchen mit veränderten Eigenschaften (veränderte Masse, veränderte Dispersionsrelation etc.) verhalten. In unserem Fall entstehen die betrachteten Quasiteilchen (Magnonen) bei Anregungen des Spin-Vielteilchensystems. Nun ist es möglich aus den Eigenschaften der Quasiteilchen auf kollektive Eigenschaften des Gesamtsystems zu schließen. Dieses Konzept hat sich in der Festkörpertheorie in der Beschreibung von elektronischen Anregungen (z.B. Exzitonen, Plasmonen), wie auch Anregungen der Kristallstruktur (Phononen) und magnetischen Anregungen (Magnonen) mit Erfolg durchgesetzt und erlaubt die Vorhersage vieler Eigenschaften von Festkörpern wie spezifische Wärme, thermische Ausdehnungskoeffizienten oder magnetische Suszeptibilität.
Die oben erwähnten Magnonen sind bosonische Quasiteilchen, daher sollte es möglich sein, allgemeine Eigenschaften des wechselwirkenden Bose-Gases in magnetischen Systemen zu finden. Wir zielen hier vor allem auf das Phänomen der Bose-Einstein-Kondensation (BEC),[28] das in den letzten Jahren in den Mittelpunkt vieler Forschungsprojekte gerückt ist und auch am Beispiel der Bose-Einstein-Kondensation von Magnonen (MBEC) untersucht wird [93, 94, 6].
Tatsächlich gibt es bereits experimentelle Nachweise des MBEC mittels zweier verschiedener Modellsysteme. In [93] wird vom MBEC bei Spin-Singulett-Systemen in $TlCuCl_3$ bei Anwesenheit eines Magnetfeldes berichtet, wenn infolge der Zeeman-Energie die Singulett-Triplett-Anregungslücke verschwindet. Oberhalb eines kritischen Feldes kondensieren dann Magnonen mit $S = 1$ und erzeugen damit eine langreichweitige magnetische Ordnung, die sich durch Messung der Magnetisierung identifizieren lässt. Bei den hier relevanten Systemen handelt es sich jedoch um Antiferromagneten wie Cs_2CuCl_4 in einem Magnetfeld, das senkrecht zur einfachen magnetischen Kristallachse angelegt wird und bei dem ein feldgetriebener Phasenübergang mit kritischen Exponenten wie beim BEC beobachtet wurde [94], obwohl über die Ergebnisse kontrovers diskutiert wird.[29] Der Grundzustand dieser Modellsysteme ist im klassischen wie auch im quantenmechanischen Fall ein Ferromagnet, falls ein Magnetfeld h angelegt wird, das stärker als das Austauschfeld h_c ist. Ausgehend von diesem Grundzustand, der ebenso wie der Heisenberg-Hamiltonian eine $U(1)$-Symmetrie aufweist, ergibt sich eine spontane Symmetriebrechung, wenn das Magnetfeld kleiner als das Austauschfeld wird ($h < h_c$). Wir erhalten dann eine langreichweitige Ordnung, wie sie vom klassischen Néel-Zustand des Antiferromagneten bekannt ist. Gemäß dem betrachteten Modell des

[28] Einen Überblick über die Theorie der BEC des nicht-wechselwirkenden Bose-Gases gibt [92].
[29] Weiterhin gibt es einen Kondensationsmechanismus von Magononen in YIG mittels parametrischen Pumpen [95].

wechselwirkenden Magnonengases ist die Bosonendichte am Punkt des Quanten-Phasenübergangs zum Antiferromagneten für verschwindende Temperatur gleich Null, so dass Mehrteilchenwechselwirkungen keine Rolle spielen. Für endliche Temperaturen gehört der Phasenübergang natürlich zur gleichen Universalitätsklasse wie die Bose-Einstein-Kondensation des wechselwirkenden Bose-Gases.
Anders als bei Experimenten mit fester Teilchenzahl kann im vorliegenden System die zum chemischen Potential äquivalente Größe $h - h_c$ experimentell durch Einstellen des Magnetfeldes nahe des kritischen Feldes variiert weden. Dies schränkt die Wahl der in Frage kommenden Materialien allerdings auf solche mit kleiner Austauschwechselwirkung [41] ein, da die zugänglichen Magnetfeldstärken begrenzt sind. Mögliche Materialien auf metallorganischer Basis sind zum Beispiel in [96] beschrieben. Man beachte weiterhin, dass die Zweidimensionalität bei tiefen Temperaturen insbesondere bei schwachen intraplanaren Kopplungen aufgrund von Anisotropien oder Dipol-Dipol-Wechselwirkungen aufgehoben wird [96, 97].
Ist nun das Magnetfeld kleiner als das kritische Feld, so befinden wir uns im Bereich langreichweitiger Néel-Ordnung, d.h. der Ordnungsparameter des QAF, die Untergittermagnetisierung M_s, ist ungleich Null. Wir werden später die Proportionalität von M_s^2 mit der Dichte der kondensierten Magnonen herausstellen und so die Verbindung zwischen dem Phasenübergang des Antiferromagneten und dem der Bose-Einstein-Kondensation aufzeigen. Eine genauere Analyse zeigt weiterhin, dass die Untergittermagnetisierung proportional zum Erwartungswert des Magnonenvernichters im Grundzustand ist und somit der Parameter der spontanen Symmetriebrechung. Wie in [98] diskutiert, besteht für endliche Systeme nicht wechselwirkender Bosonen ein Unterschied zwischen Bose-Einstein-Kondensation und spontaner Symmetriebrechung. In diesem Fall ist der Ordnungsparameter nicht identisch mit dem Quadrat des Parameters der spontanen Symmetriebrechung. Wir können jedoch auf eine strenge Unterscheidung verzichten, da wir nur den thermodynamischen Grenzfall $N \to \infty$ betrachten, in dem beide Formulierungen äquivalent sind.
In früheren Arbeiten zur theoretischen Behandlung des MBEC [99, 100, 101, 102, 103] wurde vor allem die Art des Quantenphasenübergangs durch Magnetfeld behandelt, also die Eigenschaften direkt am Phasenübergang untersucht. Weiterhin ist bekannt, dass die Störungstheorie des wechselwirkenden Bose-Gases auch weit weg vom kritischen Punkt des Quantenphasenübergangs zusammenbricht [23, 104, 105]. Aufgrund des Goldstone-Theorems sind beim spontanen Brechen einer kontinuierlichen Symmetrie Anregungen ohne Anregungslücke vorhanden, die zu Infrarot-Divergenzen in der Störungstheorie führen und nichtanalytische Korrekturen einiger Korrelationsfunktionen erzeugen [104, 106]. Bestätigungen dieses Verhaltens mittels einer einfacheren Analyse ohne Verwendung von Ward-Identitäten sind z. B. in [107, 108] beschrieben und wohl auf die Tatsache zurückzuführen, dass der Quasiteilchenzerfall energetisch nicht verboten ist [123]. Darauf kommen wir noch in Abschnitt 6.9.1 zurück. Allerdings heben sich diese Korrekturen bei der Berechnung der Observablen des Bose-Gases weg, so dass sie bisher nicht nachmessbar scheinen. Die Interpretation spezieller Korrelationsfunktionen im Modell des MBEC als Spinkorrelationen sollte es ermöglichen, das anomale Verhalten dieser Korrelationsfunktionen experimentell zu beobachten.
In den nachfolgenden Berechnungen werden Ergebnisse der feldtheoretischen Renormierungsgruppe [106] benutzt, um das korrekte Ergebnis der antiferromagnetischen Spin-Spin-Korrelationsfunktion des QAF im homogenen Magnetfeld für $T = 0$ bei langen Wellenlängen herzuleiten.

6.3 Heisenberg-Quantenantiferromagnet im Magnetfeld

Wir starten mit dem Modell des Heisenberg-QAF im starken Magnetfeld in seiner gewöhnlichen Beschreibung im $\boldsymbol{k}$-Raum (siehe Abschnitt 4.2.2). Schon mit dem Abbruch der Entwicklung für die Leiteroperatoren haben wir Wechselwirkungen zwischen drei oder mehr Teilchen vernachlässigt, was beim dünnen Bose-Gas eine gute Näherung ist. Die Fourier-Transformation des H_4 ist aufwendig, da wir das Produkt von vier verschiedenen Operatoren ausführen müssen. Gemäß der Entwicklung der Dispersionsrelationen (4.62) erwarten wir, dass die Moden mit dem positiven Index keinen merklichen Beitrag zur Wechselwirkung haben, da ihr Energiespektrum eine hier groß angenommene Anregungslücke hat und wir an dem Infrarot-Verhalten interessiert sind. Diese Moden können ausintegiert werden und man erhält so ein effektives Modell mit renormierten Kopplungskonstanten, die dann diese Moden als Ganzes berücksichtigen. Wir ordnen den neuen Kopplungen aber kein anderes Symbol zu, da weder die renormierte noch die reine Kopplung bekannt ist und ohnehin im Experiment gemessen, bzw. an experimentelle Kurven angepasst werden muss. Wir können daher hier alle Terme, die Operatoren zur positiven Mode enthalten, weglassen; später werden wir diese im Sinne der Renormierungsgruppe dadurch berücksichtigen, dass

wir renormierte Kopplungskonstanten, Wellengeschwindigkeit usw. einsetzen. Gemäß (6.57) hängen dann die renormierten Größen mit den ursprünglichen zusammen. Die Z-Faktoren sind dann im allgemeinen unbekannt, aber von der Ordnung 1. Ohne Berücksichtigung der +-Mode ergibt sich aus (4.64a) unser Modellhamiltonian

$$H_4 = \frac{\tilde{J}_0}{4N} \sum_{\mathbf{1}\cdots\mathbf{4}} \delta_{\mathbf{1}+\mathbf{2},\mathbf{3}+\mathbf{4}} \tilde{\Gamma}^{--}_{\mathbf{1234}} b^\dagger_{\mathbf{1}-} b^\dagger_{\mathbf{2}-} b_{\mathbf{3}-} b_{\mathbf{4}-} + \mathcal{O}\left(b_{k+}\right) \tag{6.1}$$

in diskreter Formulierung. Für die quantenfeldtheoretische Betrachtung führen wir Feldoperatoren gemäß

$$b_{\boldsymbol{k}-} = \frac{1}{\sqrt{Na^D}} \psi_{\boldsymbol{k}} \tag{6.2}$$

ein, wobei der Kommutator

$$\left[\psi_{\boldsymbol{k}}, \psi^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\right] = (2\pi)^D \delta\left(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'\right) \tag{6.3}$$

aus den Vertauschungsrelationen (4.57) für die Operatoren mit diskretem Impuls folgt. Im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ müssen wir den Grenzübergang von der diskreten $\boldsymbol{k}$-Summe zum Integral $\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} \longrightarrow \int \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D}$ machen und erhalten den quadratischen Hamiltonian zu

$$\boxed{H_2^{\mathrm{red}} = \int \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D} \left(\frac{\boldsymbol{k}^2}{2m} - \mu\right) \psi^\dagger_{\boldsymbol{k}} \psi_{\boldsymbol{k}},} \tag{6.4}$$

wobei wir die Näherung (4.62b) benutzt haben und die Mode mit Anregungslücke vernachlässigt haben, da uns nur Energieskalen interessieren, die weit unterhalb des Magnetfeldes h liegen. Ebenso lässt sich der Wechselwirkungsterm auf kontinuierliche Notation umschreiben, wobei gleichzeitig die effektive Wechselwirkung $U_{\boldsymbol{q}}$ aus (4.64b) hervorgeht und proportional zu einer Stufenfunktion mit einem Cutoff[30] $\Lambda_0 \approx a^{-1}$ wird:

$$H_4^{red} = \frac{1}{2} \int_{\boldsymbol{k}} \int_{\boldsymbol{k}'} \int_{\boldsymbol{q}} U_{\boldsymbol{q}} \psi^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} \psi^\dagger_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}} \psi_{\boldsymbol{k}} \psi_{\boldsymbol{k}'} \tag{6.5}$$

$$U_{\boldsymbol{q}} = \frac{1}{\chi_0} \Theta\left(\Lambda_0 - |\boldsymbol{q}|\right). \tag{6.6}$$

Hier benutzen wir die übliche Abkürzung $\int_{\boldsymbol{k}} = \int \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D}$ für das D-dimensionale Impulsintegral. χ_0 ist die bereits in (5.4) eingeführte antiferromagnetische Suszeptibilität. Für die folgenden Betrachtungen wird also der Hamiltonian

$$H = E_0 + H_2^{\mathrm{red}} + H_4^{\mathrm{red}} \tag{6.7}$$

benutzt, der den Heisenberg-Hamiltonian auf das wechselwirkende Bose-Gas abbildet. An dieser Stelle sei angemerkt, dass die Wechselwirkung (6.6) nur für den QAF im starken Magnetfeld im thermodynamischen Grenzwert eine Konstante ist. Betrachtet man den Quanten-Ferromagneten (QFM) im Magnetfeld, so stellt sich heraus, dass die Wechselwirkung bei kleinen Impulsüberträgen quadratisch im Impuls verschwindet und somit vorhandene ferromagnetische Magnonen zu schwach wechselwirken, um die speziellen Eigenschaften des Bose-Einstein-Kondensats zu beobachten. Zwar sind auch im QFM aufgrund der spontanen Symmetriebrechung gemäß dem Goldstone-Theorem Magnonen ohne Anregungslücke vorhanden, diese können aber nicht kondensieren.

Für den Heisenberg-QAF in der üblichen Formulierung [44, 52, 47] erhält man nach Holstein-Primakoff-Transformation und Diagonalisierung mittels Bogoliubov-Transformation ebenfalls einen Wechselwirkungsteil, der allerdings Vertexfunktionen enthält, die einerseits von der Richtung des Impulsübertrags abhängen und andererseits für kleine Wellenvektoren in einigen Grenzwerten singulär sind [73]. Es wurde zwar gezeigt [43], dass die daraus resultierenden Divergenzen in der Störungstheorie bis zur Ordnung $1/S^2$ in den physikalischen Messgrößen verschwinden. Dennoch ist diese Art der Abbildung des QAF auf ein System wechselwirkender Bosonen kein geeigneter Startpunkt für die Beschreibung des MBEC.

[30] Der Wert des Cutoff Λ_0 ist hier willkürlich gewählt und regularisiert die Ultraviolett-Divergenzen der Theorie. Der Wert liegt im Bereich für das Modell relevanter Größenordnungen (hier die Gitterkonstante). Die letztendlich berechneten Größen dürfen am Ende allerdings nicht von der Wahl des Cutoffs abhängen.

6.4 Spontane Symmetriebrechung

Wie beim wechselwirkenden Bose-Gas haben die Feldoperatoren in (6.7) für positives chemisches Potential μ einen endlichen Erwartungswert im Grundzustand, dessen physikalische Interpretation das Auftreten einer langreichweitigen magnetischen Ordnung, nämlich der antiferromagnetischen Magnetisierung ist.

Wie in der Abbildung 17 gezeigt, sind die Spins im klassischen Grundzustand gegenüber der z-Achse um einen Winkel θ gekippt. Wenig unterhalb des kritischen Feldes h_c ist der Winkel klein und der Modellhamiltonian (6.7) eine gute Näherung, da kleine Kippwinkel einem verdünnten Bose-Gas entsprechen. Für kleinere Magnetfelder müssen wir im Prinzip 3-Teilchenwechselwirkungen (siehe Abbildung 31) berücksichtigen, aber das Verhalten der Korrelationsfunktionen wird qualitativ durch die Symmetrien des Systems bestimmt [23, 106], so dass die Korrelationsfunktionen auch für größere Kippwinkel noch korrekt sind. Weiterhin sei auf eine alternative Formulierung hingewiesen, bei der die Spinoperatoren entlang der Achse der lokalen Magnetisierung des klassischen Grundzustandes quantisiert werden, was die Definition gedrehter Koordinatensysteme an jedem Gitterpunkt erfordert [73, 97] (siehe auch Abschnitt 4.2.1). Zunächst einmal sei der Fall kleiner Winkel $\theta \ll 1$ betrachtet, bei dem die Spinwellentheorie gemäß Abschnitt 4.2.2 für große S korrekt ist. Eine Darstellung des Modells mittels projizierter Bosonen [100, 101] (siehe Seite 96), die als eine konsistente Entwicklung in der Bosonendichte auch höhere Terme der $1/S$-Entwicklung enthält, ändert jedoch nur die Vorfaktoren der Wechselwirkung. Die zusätzlichen Vorfaktoren werden analog zum Vorgehen von in [11, 109] berücksichtigt, indem die Endergebnisse durch die echte Spinwellengeschwindigkeit c und die echte Suszeptibilität χ ausgedrückt werden, die im Experiment schließlich gemessen werden.[31]

Um nun schließlich zur Beschreibung des QAF zu gelangen, müssen wir spontane Symmetriebrechung fordern. Das Feld im Grundzustand hat dann einen endlichen Erwartungswert und somit nicht mehr die gleiche Symmetrie, wie der Hamiltonian (6.7). Wir spalten das Feld nun explizit in einen Anteil $\Delta\psi_{\boldsymbol{k}}$ ohne endlichen Erwartungswert im Grundzustand ($\langle 0 \left|\Delta\psi_{\boldsymbol{k}}\right| 0\rangle = 0$)und einen Feldbeitrag für die $\boldsymbol{k} = 0$-Mode auf

$$\boxed{\psi_{\boldsymbol{k}} = (2\pi)^D \delta(\boldsymbol{k}) \psi_0 + \Delta\psi_{\boldsymbol{k}}.} \tag{6.8}$$

Damit erhalten wir einen Hamilton-Operator, der ungerade Potenzen des neuen Feldes enthält

$$H = \tilde{E}_0 + \tilde{H}_1 + \tilde{H}_2 + \tilde{H}_3 + \tilde{H}_4. \tag{6.9}$$

In der symmetriegebrochenen Phase befindet sich das System im Grundzustand in einem Minimum. Ersetzen wir die Operatoren im Hamiltonian durch komplexe Variablen ($\psi^\dagger_{\boldsymbol{k}} \to \psi^*_{\boldsymbol{k}}$) in der Funktionalintegral-Formulierung des Problems, so müssen wir $\tilde{H}_1 = 0$ fordern. Mit

$$\tilde{H}_1 = \left(U_0 \left|\psi_0\right|^2 - \mu\right) \left(\psi_0^* \Delta\psi_0 + \psi_0 \Delta\psi_0^*\right) \tag{6.10}$$

wird dann das eingeführte chemische Potential

$$\boxed{\mu = U_0 \left|\psi_0\right|^2} \tag{6.11}$$

festgelegt [110] und die Energieverschiebung ist dann

$$\tilde{E}_0 = -\frac{1}{2} V U_0 \left|\psi_0\right|^4. \tag{6.12}$$

In der symmetriegebrochenen Phase haben wir dann wieder einen Hamiltonian, der in den Feldern $\Delta\psi_{\boldsymbol{k}}$ nicht mehr diagonal ist

$$\begin{aligned} \tilde{H}_2 \;=\; & \frac{1}{2}\int_{\boldsymbol{k}} \Bigg[\left(\frac{\boldsymbol{k}^2}{2m} + U_{\boldsymbol{k}} \left|\psi_0\right|^2\right) \left(\Delta\psi^\dagger_{\boldsymbol{k}} \Delta\psi_{\boldsymbol{k}} + \Delta\psi^\dagger_{-\boldsymbol{k}} \Delta\psi_{-\boldsymbol{k}}\right) \\ & + U_{-\boldsymbol{k}} \psi_0^{*2} \Delta\psi_{-\boldsymbol{k}} \Delta\psi_{\boldsymbol{k}} + U_{\boldsymbol{k}} \psi_0^2 \Delta\psi^\dagger_{\boldsymbol{k}} \Delta\psi^\dagger_{-\boldsymbol{k}} \Bigg]. \end{aligned} \tag{6.13}$$

[31] Damit ist unser Vorgehen analog zu dem in der Quantenelektrodynamik, die als renormierbare Quantenfeldtheorie zwar Divergenzen physikalischer Größen enthält, die allerdings in renormierten Größen (Masse, Ladung) definiert werden. Die Theorie ist dann erst festgelegt, wenn jede renormierte Größe durch ein Experiment bestimmt wurde. Jede weitere Messung bestätigt oder widerlegt die Theorie dann.

Eine alternative Formulierung

$$\tilde{H}_2 = \frac{1}{2}\int_{\boldsymbol{k}} \left(\Delta\psi^\dagger_{\boldsymbol{k}}, \Delta\psi_{-\boldsymbol{k}}\right) \tilde{H} \begin{pmatrix} \Delta\psi_{\boldsymbol{k}} \\ \Delta\psi^\dagger_{-\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} V \int_{\boldsymbol{k}} \tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} \tag{6.14}$$

mittels Dispersion und Matritze

$$\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} = \frac{\boldsymbol{k}^2}{2m} + U_{\boldsymbol{k}} \left|\psi_0\right|^2 \tag{6.15}$$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} & U_{\boldsymbol{k}}\psi_0^2 \\ U_{\boldsymbol{k}}\psi_0^{*2} & \tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \tag{6.16}$$

zeigt unmittelbar, dass der quadratische Anteil diagonalisierbar ist. Mit der Identifizierung $\Delta\psi_{\boldsymbol{k}} \to A_{\boldsymbol{k}}$ und $\Delta\psi_{-\boldsymbol{k}} \to B_{-\boldsymbol{k}}$ sieht man sofort, dass (6.14) genau die Form von (C.1) hat und somit mittels Bogoliubov-Transformation diagonalisiert werden kann. Wir erhalten dann den diagonaliserten Hamiltonian zu

$$\boxed{H_2 = \frac{1}{2}\int_{\boldsymbol{k}} \epsilon_{\boldsymbol{k}} \left(\alpha^\dagger_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta^\dagger_{-\boldsymbol{k}}\beta_{-\boldsymbol{k}}\right) + E_0} \tag{6.17}$$

mit der Dispersionsrelation

$$\boxed{\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\tilde{\epsilon}^2_{\boldsymbol{k}} - U^2_{\boldsymbol{k}} \left|\psi_0\right|^4} = c_0|\boldsymbol{k}| + \alpha|\boldsymbol{k}|^3 + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^5)} \tag{6.18}$$

sowie der Geschwindigkeit der Magnonen (4.29a) und der Anharmonizitätskonstante

$$c_0 = \frac{\tilde{J}_0 S a}{\sqrt{D}} \tag{6.19a}$$

$$\alpha = \frac{1}{8\sqrt{m^3\mu}}. \tag{6.19b}$$

Somit handelt es sich bei Vernachlässigung der Wechselwirkungsterme in (6.9) um ein lineares Spektrum, wie wir es schon in (4.28) gefunden hatten. Wie man anhand der Abbildung 17 abliest, gilt für den Neigungswinkel

$$s \sin\theta = M_s, \tag{6.20}$$

wobei wir die Untergittermagnetisierung pro Volumenelement M_s und die Spindichte s als

$$M_s = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{r}_i} \zeta_i \left\langle S^y_i \right\rangle \tag{6.21}$$

$$s = \frac{S}{a^D} \tag{6.22}$$

definiert haben (siehe (4.12)). Hinreichend nahe am kritischen Magnetfeld h_c ist der Winkel θ klein, so dass näherungsweise

$$\boxed{\theta \approx \frac{M_s}{s}} \tag{6.23}$$

gilt. Die Untergittermagnetisierung bringen wir nun mit den anderen Größen in Verbindung, indem wir die Summe explizit auswerten. Mit der Definition (6.21) sowie elementaren Relationen der Drehimpulsalgebra (1.2) erhalten wir zunächst

$$M_s = \frac{1}{N a^D}\sum_{\boldsymbol{r}_i} \zeta_i \frac{1}{2i} \left\langle S^+_i - S^-_i \right\rangle. \tag{6.24}$$

Für die Berechnung in linearer Spinwellentherorie reicht nun die Berücksichtigung der Terme nullter Ordnung in (3.9), so dass die Stufenoperatoren einfach proportional zu den Erzeugern / Vernichtern sind:

$$S^+_i = 2Sb_i = \left(S^-_i\right)^\dagger. \tag{6.25}$$

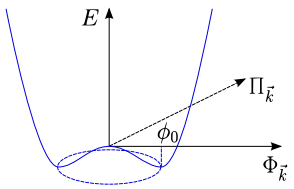

Abbildung 26: Übertragung der Symmetriebrechung gemäß (6.8) auf die hermitesche Parametrisierung. Lediglich das Φ-Feld erhält einen endlichen Erwartungswert im Grundzustand. Damit nimmt der Grundzustand die niedrigste Energie im vorliegenden Potential („mexican hat“) an. Die Anregung entlang der Talsohle entspricht dem Goldstone-Boson (Anregung ohne Anregungslücke).

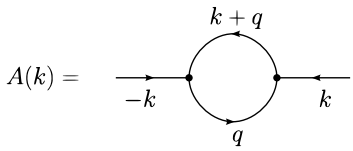

Abbildung 27: Divergentes Diagramm in Einschleifen-Näherung mit 3-Punkt-Vertex: Der Beitrag zum anomalen Propagator (2 eintretende Teilchen mit 4-Impulsen k und $-k$) ist proportional zum Quadrat des 3-Punkt-Vertex und enthält in Gaußscher Näherung ein divergentes Integral (siehe [106]).

Zusammen mit der Fourier-Transformation für $\boldsymbol{k} = 0$ aus (4.58) hebt sich ζ_i gerade weg und man erhält

$$M_s = \frac{\sqrt{2S}}{2\sqrt{N}a^D} \langle b_{0-} - b_{0+} \rangle \,. \tag{6.26}$$

Mit der Kontinuumsformulierung (6.2) sowie der Parametrisierung der Felder in der symmetriegebrochenen Phase (6.8) lesen wir M_s mit der Definition des Betrages einer komplexen Zahl direkt ab:

$$M_s = \frac{\sqrt{2S}}{2i\sqrt{a^D}} (\psi_0 - \psi_0^*) = \sqrt{2s\,|\psi_0|^2}. \tag{6.27}$$

Somit ist die Spinwellengeschwindigkeit proportional zum Neigungswinkel und das Quadrat des Neigungswinkels ist proportional zum Ordnungsparameter:

$$\begin{aligned} c_0 &= 2\theta JaS\sqrt{D} && \text{(6.28a)} \\ \theta^2 &\approx \frac{M_s^2}{s^2} \approx \frac{2\rho_0}{s} = 2\left(1 - \frac{h}{h_c}\right), && \text{(6.28b)} \end{aligned}$$

Wir haben die Dichte des Kondensats $\rho_0 = |\psi_0|^2$ definiert und für das letzte Gleichheitszeichen (6.11) sowie die Definition des chemischen Potentials (4.61) benutzt. Man beachte, dass (6.28b) gerade die Entwicklung des Ergebnisses

$$\cos\theta = \frac{h}{h_c} \tag{6.29}$$

aus [111] für kleine Kippwinkel θ ist.

6.5 Reelle Parametrisierung

Wie bereits erwähnt, führt die Parametrisierung (6.8) zu verschiedenen komplizierten kubischen und quartischen Termen aus dem Wechselwirkungsanteil des Hamiltonian, deren Behandlung im Rahmen der Störungstheorie zu Divergenzen führt. Ein Beispiel ist der Beitrag zum anomalen Propagator, der in Abbildung 27 gezeigt ist und später noch zur Diskussion der Gültigkeit unserer Theorie herangezogen wird (siehe Abschnitt 6.9.2).

Aufgrund der $U(1)$-Symmetrie des Modells [40] können wir durch Forderung der Invarianz der Korrelationsfunktionen und Vertexfunktionen unter einer Phasenrotation Ward-Identitäten formulieren, die die Berechnung des Verhaltens einiger Korrelationsfunktionen für kleine Impulse ohne Störungstheorie ermöglichen. Die Darstellung des Feldoperators mittels zweier hermitescher Felder, die die longitudinalen und transversalen Fluktuationen beschreiben, erlaubt die Anwendung der Ward-Identitäten, die

auch auf die hermitesche Parametrisierung abgebildet werden müssen (siehe Appendix G). Analog zur Parametrisierung in Abschnitt (5.3) sowie ähnlichen Parametrisierungen in früheren Arbeiten zur Spinwellentheorie [44, 99, 73, 80], führen wir eine Transformation auf hermitesche Operatoren $\hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}}$ und $\hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}}$ durch

$$\begin{aligned} \psi_{\boldsymbol{k}} &= \sqrt{\tfrac{s}{2}}\theta\, \hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}} + \tfrac{i}{\sqrt{2s\theta}}\, \hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}} \\ &= \sqrt{\rho_0}\, \hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}} + \tfrac{i}{2\sqrt{\rho_0}}\, \hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}}. \end{aligned} \tag{6.30}$$

Die hermiteschen Feldoperatoren erfüllen

$$\boxed{\hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} = \hat{\Pi}_{-\boldsymbol{k}} \qquad \hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} = \hat{\Phi}_{-\boldsymbol{k}}} \tag{6.31}$$

und stellen somit Operatoren mit reellen Eigenwerten im Ortsraum dar und sind wie Ort und Impuls kanonisch konjugiert

$$\boxed{\left[\hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}}, \hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}'}\right] = i\,(2\pi)^D\, \delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}').} \tag{6.32}$$

Die ungewöhnliche Normierung wurde so gewählt, dass $\hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}}$ dem transversalen Feld des Nichtlinearen-σ-Modells entspricht und somit eine mögliche Abbildung zwischen dem Spinsystem als wechselwirkende Magnonen und den Feldern im Nichtlinearen-σ-Modell möglich ist [73, 80, 109].

6.5.1 Physikalische Interpretation der Parametrisierung

Die eingeführten hermiteschen Operatoren $\hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}}$ und $\hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}}$ lassen sich in linearer Ordnung Spinwellentheorie mit den Fouriertransformierten der gestaffelten Spinoperatoren (2.74) in Verbindung bringen. Lineare Spinwellentheorie bedeutet nun $S_i^+ = \sqrt{2S} b_i$, $S_i^- = \sqrt{2S} b_i^{\dagger}$, so dass sich aus (2.74) eine Linearkombination der Operatoren $b_{\boldsymbol{k}\sigma}$ ergibt, die man dann mittels (6.2) und (6.30) zu

$$\hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{m_s} S^x_{\boldsymbol{k},\mathrm{St}} = \frac{1}{m_s} \sum_{\boldsymbol{r}_i} \zeta_i e^{-\boldsymbol{k}\cdot r_i} S_i^x \tag{6.33a}$$

$$\hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}} = \frac{m_s}{s} S^y_{\boldsymbol{k},\mathrm{St}} = \frac{m_s}{s} \sum_{\boldsymbol{r}_i} \zeta_i e^{-\boldsymbol{k}\cdot r_i} S_i^y \tag{6.33b}$$

umformen kann. Dabei haben wir die Untergittermagnetisierung pro Gitterplatz $m_s = \frac{M_s}{a^D}$ eingeführt. Die Symmetriebrechnung überträgt sich auch auf die hermiteschen Operatoren, wobei wir die Phase o.B.d.A. derart festlegen, dass nur $\hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}}$ einen endlichen Erwartungswert hat:

$$\left\langle \hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}} \right\rangle = (2\pi)^2\, \delta(\boldsymbol{k}) \phi_0 \qquad , \quad 0 \le \phi_0 \le S. \tag{6.34}$$

Dies manifestiert sich im physikalischen System durch die Untergittermagnetisierung, die als Ordnungsparameter identifiziert werden kann: Legen wir ein Feld an das System an und bilden den thermodynamischen Grenzwert $N \to \infty$ und lassen anschließend das Feld verschwinden, so hat das System anschließend immer noch eine endliche Untergittermagnetisierung. Im Ortsraum hat die Untergittermagnetisierung eine definierte Richtung, die im Feldraum gerade dem Φ-Feld entspricht (siehe Abbildung 26). Gemäß der Normierung der hermiteschen Operatoren können wir den Neigungswinkel durch den Erwartungswert ϕ_0 ausdrücken

$$s\theta^2 = \phi_0. \tag{6.35}$$

6.6 Pfadintegralformulierung der Korrelationsfunktionen

Wie im Appendix F dargestellt, lässt sich der Imaginärzeit-Zeitentwicklungsoperator mittels Funktionalintegral

$$U(\tau'', \tau') = \int \mathcal{D}\left[\Pi, \Phi\right] e^{-S[\Pi,\Phi]} \tag{6.36}$$

berechnen. Das System wird nun durch die Euklidsche Wirkung

$$S\left[\Pi, \Phi\right] = \int d\tau \left(\frac{1}{2} \int_{\boldsymbol{k}} \left(i\Pi_{-\boldsymbol{k}}(\tau) \partial_\tau \Phi_{-\boldsymbol{k}}(\tau) - i\left(\partial_\tau \Pi_{\boldsymbol{k}}(\tau)\right) \Phi_{\boldsymbol{k}}(\tau) \right) - H\left[\Pi_{\boldsymbol{k}}(\tau), \Phi_{\boldsymbol{k}}(\tau)\right] \right) \tag{6.37}$$

beschrieben, die ein Funktional von komplexwertigen Feldern über die Imaginärzeit ist. Die Felder im Frequenzraum $K = (i\omega, \boldsymbol{k})$ sind nun durch Fourier-Transformation der Felder in Imaginärzeit gegeben

$$\Pi_K = \int d\tau e^{i\omega\tau} \Pi_{\boldsymbol{k}}(\tau) \tag{6.38a}$$

$$\Phi_K = \int d\tau e^{i\omega\tau} \Phi_{\boldsymbol{k}}(\tau). \tag{6.38b}$$

Die Felder ergeben sich einfach durch Substitution der Feldoperatoren $\hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}} \rightarrow \Pi_{\boldsymbol{k}}(\tau)$ und $\hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}} \rightarrow (2\pi)^D \delta(\boldsymbol{k})\phi_0 + \Phi_{\boldsymbol{k}}(\tau)$, wobei im Falle des longitudinalen Feldes der endliche Erwartungswert wie in Abbildung 26 berücksichtigt wird. Damit lässt sich die Ableitung nach der Imaginärzeit in (6.37) einfach durchführen und mit den Ersetzungen

$$\partial_\tau \Phi_{\boldsymbol{k}}(\tau) \rightarrow i\omega \Phi_K \quad , \quad \partial_\tau \Pi_K(\tau) \rightarrow i\omega \Pi_K \tag{6.39}$$

transformieren. Mit der Abkürzung $\int_K = \int \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D}$ für das statt dem Imaginärzeitintegral auftretende Frequenzintegral schreibt man sich die Wirkung

$$\boxed{S_0[\Pi, \Phi] = -\frac{1}{2} \int_K \left[\left(\Pi_{-K} \Phi_K - \Pi_K \Phi_{-K} \right) \omega + H[\Pi_K, \Phi_K] \right]} \tag{6.40}$$

auf. Ausgehend vom Hamiltonian (6.7) müssen wir nun die reelle Feldparametrisierung sowie die Fourier-Transformation in den Frequenzraum durchführen. Wie für die komplexen Felder erhält man bei spontaner Symmetriebrechung ein Feld mit endlichem Erwartungswert, so dass man

$$\Psi_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\rho_0}\, \Pi_{\boldsymbol{k}} + \frac{i}{2\sqrt{\rho_0}} \left((2\pi)^D \delta(\boldsymbol{k})\phi_0 + \Phi_{\boldsymbol{k}} \right) \tag{6.41}$$

einsetzen muss. Auch in dieser Parametrisierung ergeben sich Terme, die linear, quadratisch, kubisch und quartisch in den Operatoren sind:

$$H = \tilde{E}_0 + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 \tag{6.42a}$$

$$\tilde{E}_0 = E_0 - \frac{\mu V \phi_0^2}{4\rho_0} + \frac{U_0 V \phi_0^4}{32\rho_0^2} \tag{6.42b}$$

$$H_1 = \left(-\mu \frac{\phi_0}{2\rho_0} + \frac{U_0 \phi_0^3}{8\rho_0^2} \right) \hat{\Phi}_{\boldsymbol{0}} \tag{6.42c}$$

$$\begin{aligned} H_2 = \int_{\boldsymbol{k}} \Bigg[& \rho_0 \left(\frac{\boldsymbol{k}^2}{2m} - \mu + \frac{\phi_0^2 U_0}{4\rho_0} \right) \hat{\Pi}_{-\boldsymbol{k}} \hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}} \\ & + \frac{1}{4\rho_0} \left(\frac{\boldsymbol{k}^2}{2m} - \mu + \frac{\phi_0^2}{4\rho_0} (2U_{\boldsymbol{k}} - U_0) \right) \hat{\Phi}_{-\boldsymbol{k}} \hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}} \Bigg] + \frac{V}{2} \int_{\boldsymbol{k}} \left(\frac{\boldsymbol{k}^2}{2m} - \mu \right). \end{aligned} \tag{6.42d}$$

Das chemische Potential bestimmt wieder die Stärke der Symmetriebrechung über die Bedingung, dass H_1 verschwinden muss, so dass man aus (6.42c) sofort

$$\mu = U_0 s \rho_0 \tag{6.43}$$

folgern kann, wenn man die Dichte der kondensierten Bosonen mittels $\rho_0 = \phi_0^2$ durch den Erwartungswert des $\Phi_{\boldsymbol{k}}$-Feldes im Grundzustand ausdrückt. Dann lässt sich auch der echt quadratische Anteil vereinfachen zu:

$$\boxed{H_2 = \int_{\boldsymbol{k}} \left(\boldsymbol{k}^2 \chi_0 c_0^2 \hat{\Pi}_{-\boldsymbol{k}} \hat{\Pi}_{\boldsymbol{k}} + \chi_0^{-1} \hat{\Phi}_{-\boldsymbol{k}} \hat{\Phi}_{\boldsymbol{k}} \right).} \tag{6.44}$$

6.7 Gaußsche Wirkung des Modells

Betrachtet man nun nur den wechselwirkungsfreien Anteil des Hamiltonian, so erhält man die freie Wirkung (Gaußsche Wirkung) [24]

$$\begin{aligned} S_0\left[\Pi,\Phi\right] &= \frac{1}{2}\int_K \left[\boldsymbol{k}^2\chi_0 c_0^2 \Pi_{-K}\Pi_K + \chi_0^{-1}\Phi_{-K}\Phi_K \right. \\ &\quad \left. +\omega\left(\Pi_{-K}\Phi_K - \Phi_{-K}\Pi_K\right)\right] \\ &= \frac{1}{2}\int_K \vec{\Psi}_{-K}^T \tilde{H}_{-K,K}\vec{\Psi}_K \end{aligned} \tag{6.45}$$

mit der Definition $\vec{\Psi}_K^T = (\Pi_K, \Phi_K)$ und der Matrix

$$\tilde{H}_{K,K'} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{k}^2 c_0^2\chi_0 & \omega \\ -\omega & \chi_0^{-1} \end{pmatrix}\delta_{K,-K'}, \qquad \delta_{K,-K'} = (2\pi)^D\delta(\omega+\omega')\delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'). \tag{6.46}$$

Mittels der Funktionalintegralformulierung lassen sich nun die Korrelationsfunktionen in Gaußscher Näherung berechnen. Dazu schreiben wir als Beispiel die Definition der Korrelationsfunktion für die Π-Felder hin und ersetzen mit dem Quellentrick die Felder im Integral durch die Ableitungen nach den entsprechenden Quellen $\vec{J} = (j_1, j_2)$, wobei gleichzeitig ein Exponentialfaktor eingeführt wird. Man beachte, dass alle Größen im K-Raum definiert sind und somit gleichzeitig noch eine Impulsvariable tragen bzw. $\tilde{H}$ gemäß (6.46) eine Diagonalmatrix im K-Raum ist

$$\begin{aligned} \langle\Pi\Pi\rangle_0 &= \frac{\int\mathcal{D}\left[\Pi,\Phi\right]\Pi\Pi e^{-S_0[\Pi,\Phi]}}{\int\mathcal{D}\left[\Pi,\Phi\right]e^{-S_0[\Pi,\Phi]}} \\ &= \left.\frac{\partial_{j_1}\partial_{j_1}\int\mathcal{D}\left[\Pi,\Phi\right]e^{-S_0[\Pi,\Phi]+\int_K \vec{J}\cdot\vec{\Psi}}}{\int\mathcal{D}\left[\Pi,\Phi\right]e^{-S_0[\Pi,\Phi]}}\right|_{\vec{J}=0}. \end{aligned} \tag{6.47}$$

Das Funktionalintegral im Zähler ist nun nur ein unendliches Produkt verschobener Gaußscher Integrale, das sich mittels Variablensubstitution lösen lässt und dann zusammen mit dem Nenner als Exponentialfaktor des inversen Propagators

$$\begin{aligned} \langle\Pi\Pi\rangle_0 &= \left.\partial_{j_1}\partial_{j_1}e^{\frac{1}{2}\int_K \vec{J}^T\left(\tilde{H}\right)^{-1}\vec{J}}\right|_{\vec{J}=0} \\ &= \left.\partial_{j_1}\sum_{i=1}^{2}\frac{1}{2}\left(j_i\left(\tilde{H}\right)_{1i}^{-1} + \left(\tilde{H}\right)_{i1}^{-1}j_i\right)e^{\frac{1}{2}\int_K \vec{J}^T\left(\tilde{H}\right)^{-1}\vec{J}}\right|_{\vec{J}=0} \\ &= \left(\tilde{H}\right)_{11}^{-1} \end{aligned} \tag{6.48}$$

geschrieben werden kann [112, 113] (siehe auch: Appendix G). Beim Ausführen der 2. Ableitung gemäß Produktregel ergibt die innere Ableitung des Exponentialfaktors keine zusätzlichen Terme, da die Quellen am Ende zu Null gesetzt werden. Ebenso erhält man die Korrelationsfunktionen der anderen Felder durch Ableitungen nach Kombinationen der Quellen j_i

$$\left(\tilde{H}\right)_{K,K'}^{-1} = \begin{pmatrix} \langle\Pi_K\Pi_{K'}\rangle_0 & \langle\Pi_K\Phi_{K'}\rangle_0 \\ \langle\Phi_K\Pi_{K'}\rangle_0 & \langle\Phi_K\Phi_{K'}\rangle_0 \end{pmatrix}. \tag{6.49}$$

Die Matrix ist nur für $K = 0$ singulär, da

$$\det\tilde{H} = \boldsymbol{k}^2c_0^2 + \omega^2 \tag{6.50}$$

und somit lassen sich die Korrelationsfunktionen in Gaußscher Näherung

$$\boxed{\left(\tilde{H}\right)_{K,K'}^{-1} = \frac{1}{\boldsymbol{k}^2c_0^2+\omega^2}\begin{pmatrix} \chi_0^{-1} & -\omega \\ \omega & \boldsymbol{k}^2c_0^2\chi_0 \end{pmatrix}\delta_{K,-K'}} \tag{6.51}$$

einfach durch Matrixinversion berechnen. Mittels der Separation in longitudinale und transversale Fluktuationen erhalten wir nun das gleiche Verhalten der Korrelationsfunktionen wie in Formel 2.27 in [23]. Somit können wir deren Ergebnisse übernehmen, indem wir die physikalischen Größen mit den entsprechenden Parametern in [23] identifizieren.[32]

$$\begin{aligned} G_{tt} &\sim -\frac{c_0^2}{\omega^2 + c_0^2 \boldsymbol{k}^2} &&\leftrightarrow \langle \Pi\Pi \rangle \\ G_{lt} &\sim -\frac{\omega}{\omega^2 + c_0^2 \boldsymbol{k}^2} &&\leftrightarrow \langle \Pi\Phi \rangle \qquad [23]\ 2.27 \\ G_{ll} &\sim -\frac{\boldsymbol{k}^2}{\omega^2 + c_0^2 \boldsymbol{k}^2} &&\leftrightarrow \langle \Phi\Phi \rangle \,. \end{aligned}$$

6.8 Volle Korrelationsfunktionen

Berechnet man nun die korrekten Korrelationsfunktionen, so stellt sich heraus, dass sowohl die transversale Korrelationsfunktion $\langle \Pi_K \Pi_{K'} \rangle$ als auch die gemischten Korrelationsfunktionen $\langle \Pi_K \Phi_{K'} \rangle$ die gleiche Form wie in (6.51) haben und für den Infrarot-Bereich lediglich die Größen durch die renormierten Größen ausgedrückt werden müssen. Um die Ergebnisse aus [106] benutzen zu können, müssen wir die Felder in reeller Parametrisierung gegenüberstellen:

Castellani et al.			QAF im Magnetfeld		
Ψ	$=$	$\Psi_l + i\Psi_t$	Ψ	$=$	$\sqrt{\frac{s}{2}}\Pi + \frac{i}{\sqrt{2s}}\Phi = \tilde{\Psi}_t + i\tilde{\Psi}_l$
G_{ij}	$=$	$\langle \Psi_i \Psi_j \rangle$, $i, y \in \{l, t\}$	$\tilde{\Psi}_t$	$=$	$\sqrt{\frac{s}{2}}\Pi$, $\tilde{\Psi}_l = \frac{1}{\sqrt{2s}}\Phi$.

Der Vergleich zeigt nun, dass unsere Parametrisierung nur durch einen Phasenfaktor abweicht:

$$\Psi_t = -i\tilde{\Psi}_t \qquad \Psi_l = i\tilde{\Psi}_l. \tag{6.52}$$

Mit obigen Relationen lassen sich unsere Korrelationsfunktionen direkt durch die G_{ij} ausdrücken

$$\langle \Pi\Pi \rangle = -\frac{s}{2} G_{tt} \tag{6.53a}$$

$$\langle \Phi\Phi \rangle = -2sG_{ll} \tag{6.53b}$$

$$\langle \Pi\Phi \rangle = -2G_{lt} \tag{6.53c}$$

und somit die Ergebnisse direkt übernehmen. Wir erhalten dann die korrekten Korrelationsfunktionen ausgedrückt durch renormierte Größen c und χ

$$\langle \Pi_K \Pi_{K'} \rangle = \frac{\chi^{-1}}{\omega^2 + c^2 \boldsymbol{k}^2} \delta_{K,-K'} \tag{6.54}$$

$$\langle \Pi_K \Phi_{K'} \rangle = Z_\parallel \frac{\omega}{\omega^2 + c^2 \boldsymbol{k}^2} \delta_{K,-K'}. \tag{6.55}$$

Dabei ist c die renormierte Spinwellengeschwindigkeit, sowie

$$\chi^{-1} = \frac{2c^2 m \rho_0}{s\rho} = \frac{M_s \rho}{2smc^2 \rho_0} = \frac{\chi_0 Z_\rho}{Z_c^2} \tag{6.56}$$

die renormierte gestaffelte Suszeptibilität ausgedrückt durch die Sättigungsmagnetisierung M_s, die Dichte der kondensierten Phase ρ_0 und die Gesamtdichte ρ sowie der Z-Faktoren

$$Z_\rho = \frac{\rho}{\rho_0} \tag{6.57a}$$

$$Z_c = \frac{c}{c_0} \tag{6.57b}$$

$$Z_\parallel = \frac{mc^2}{\rho} \frac{d\rho_0}{d\mu}, \tag{6.57c}$$

[32] Das Minuszeichen ergibt sich durch eine andere Definition der Felder (Phasenfaktor), der zur Vergleichbarkeit mit dem nichtlinearen σ-Modell anders gewählt wurde (siehe Abschnitt 3.2).

die dimensionslos sind und die Größen in linearer Spinwellentheorie bzw. Gaußscher Näherung mit den korrekten Größen verbinden. Gemäß der Entwicklung in inversen Potenzen des Gesamtspins S, werden alle Renormierungsfaktoren im klassischen Grenzwert $S \to \infty$ zu Eins. Damit ist die Gaußsche Näherung in $D \leq 3$ für die oben genannten Korrelationsfunktionen qualitativ richtig, obwohl einige Feynman-Diagramme Divergenzen für kleine Impulse (Infrarot-Divergenzen) aufweisen. Jedoch behalten die Korrelationsfunktionen ihre Form durch die in Appendix G vorgestellten Ward-Identitäten, die alle Divergenzen aufheben lassen. Die exakten Ergebnisse für die Korrelationsfunktionen hängen von Renormierungsfaktoren ab, die sich als Ableitungen thermodynamischer Größen darstellen lassen. Im Experiment wird eine endliche Anzahl von Renormierungsfaktoren gemessen und so die Theorie festgelegt.
Ganz anders verhält sich die longitudinale Korrelationsfunktion: Die Ward-Identitäten ergeben keine Bedingungen, die die Form in Gaußscher Näherung beibehalten, so dass sich in $D \leq 3$ nichtanalytische Beiträge ergeben, die von der Aufsummation der am stärksten divergenten Feynman-Digaramme stammen. Unter Anwendung einer Dimensionanalyse der Felder bzw. Korrelationsfunktionen[33] erhalten wir

$$[\rho] = E^D \quad [c] = 1 \quad [\omega] = [m] = E \qquad \Rightarrow [G_{ij}] = E \ , \ i,j \in \{t,l\}. \tag{6.58}$$

Somit ergibt sich die Korrelationsfunktion (Formel 4.26 in [23]) zu[34]

$$G_{ll} = \frac{2mc^2}{8\rho_0\rho}\left(\frac{d\rho_0}{d\mu}\right)^2 \frac{\omega^2}{\omega^2 + c^2\boldsymbol{k}^2} + \begin{cases} \dfrac{4m^2c_0\rho_0}{64\pi^2\rho^2}\ln\left(\dfrac{K}{\Lambda_0}\right) & D = 3 \\ -\dfrac{4m^2c_0n_0K_{4-\epsilon}}{8\rho^2\epsilon\boldsymbol{k}^\epsilon} & 1 < D < 3. \end{cases} \tag{6.59}$$

Hierbei ist Λ_0 der in (6.5) eingeführte Cutoff und ϵ der Abstand zur oberen kritischen Dimension sowie K_D die Oberfläche der D-dimensionalen Einheitskugel [114]

$$\epsilon = 3 - D \tag{6.60}$$

$$K_D = \frac{2^{1-D}}{\pi^{D/2}\Gamma\left(D/2\right)} \tag{6.61}$$

Schreiben wir die formale Abkürzung $\ln\left(K/\Lambda_0\right) = -\frac{1}{2}\ln\left(\Lambda_0^2/(\omega^2/c^2 + \boldsymbol{k}^2)\right)$ in eine leichter zu interpretierende Form und verwenden die Definition der Z-Faktoren (6.57), so lässt sich die longitudinale Korrelationsfunktion umschreiben zu

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \Phi_K \Phi_{K'} \rangle &= \delta_{K,-K'}\ \chi\left[-Z_\parallel^2 \frac{\omega^2}{\omega^2 + c^2\boldsymbol{k}^2}\right. \\ &\left. + K_{D+1}\frac{(mc)^3}{Z_\rho^2\rho_0}\begin{cases} \ln\left(\dfrac{(mc^2)}{\omega^2/c^2 + \boldsymbol{k}^2}\right) & D = 3 \\ \dfrac{2}{3-D}\left(\dfrac{\omega^2}{c^2} + \boldsymbol{k}^2\right)^{\frac{D-3}{2}} & D < 3 \end{cases}\right]. \end{aligned}}$$

Das Vorhandensein eines nicht-analytischen Terms in der longitudinalen Korrelationsfunktion des wechselwirkenden Bose-Gases wurde zuerst in [104] und schließlich in [105] in Zusammenhang mit superfluidem Helium diskutiert. Bisher nur wenig beachtet wurde jedoch der Beitrag in $D = 3$, so dass die Gaußsche Näherung auch in diesem Fall nicht korrekt ist. Wir werden später das Ergebnis in drei Dimensionen noch relativieren (siehe Abschnitt 6.9.2). Die hier berechnete Eigenschaft der Korrelationsfunktion ist nichts anderes als eine anomale Dimension des Φ_K-Feldes, welche eine generelle Eigenschaft von Systemen mit Brechung kontinuierlicher Symmetrien ist. Wie schon in [115, 116, 117, 118, 119] diskutiert, führen Goldstone-Anregungen (ohne Energielücke) zu anomalen longitudinalen Fluktuationen. Obwohl die Korrelationsfunktion (6.62) ebenso wie die Korrelationsfunktionen (6.54) nur für kleine Kippwinkel θ berechnet wurden, bleiben sie qualitativ auch für größerer Kippwinkel korrekt, solange 3-Teilchen-Wechselwirkungen eine untergeordnete Rolle spielen (siehe Abschnitt 6.9.2).

[33] Wir bezeichnen die Skalendimension mit dem Zeichen [...].

[34] Da in [106] die Energie relativ zur Masse der Teilchen gemessen wird, muss man die Dimension der Felder bzw. Korrelationsfunktionen ausrechnen und dann Potenzen von Energie als $m = \frac{1}{2}$ einfügen, um das korrekte Verhalten zu berechnen.

6.8.1 Effektive Gaußsche Wirkung

Möchte man thermodynamische Größen z.B. die Zustandssumme $\mathcal{Z}$ in Gaußscher Näherung mit der Wirkung (6.45) berechnen, so erfordert dies die Lösung des Funktionalintegrals

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \int \mathcal{D}\left[\Pi,\Phi\right] e^{-S_0[\Pi,\Phi]} \\ &= \int \mathcal{D}\left[\Pi\right] e^{-\tilde{S}[\Pi]} \int \mathcal{D}\left[\Phi\right] e^{-\tilde{S}[\Phi]-\tilde{S}[\Pi,\Phi]}.\end{aligned} \tag{6.62}$$

Hierbei haben wir die Integrationen nach den beiden Feldsorten aufgeteilt sowie die Terme in der Wirkung auseinandergezogen und die Definitionen

$$\tilde{S}\left[\Pi\right] = \frac{1}{2}\int_K \chi_0 c_0^2 \boldsymbol{k}^2 \Pi_{-K}\Pi_K \tag{6.63a}$$

$$\tilde{S}\left[\Phi\right] = \frac{1}{2}\int_K \chi_0^{-1} \Phi_{-K}\Phi_K \tag{6.63b}$$

$$\tilde{S}\left[\Pi,\Phi\right] = \frac{1}{2}\int_K \omega\left(\Pi_{-K}\Phi_K - \Phi_{-K}\Pi_K\right) \tag{6.63c}$$

gemacht. Formal ist das 2. Funktionalintegral über die Φ-Felder lösbar, da es sich um ein verschobenes Gaußsches Integral handelt. Wir können dazu die nicht-diagonalen Terme der Wirkung umschreiben zu

$$\tilde{S}\left[\Phi\right] + \tilde{S}\left[\Pi,\Phi\right] = \frac{1}{2}\int_K \left[\left(\sqrt{\chi_0^{-1}}\Phi_K + \sqrt{\chi_0}\omega\Pi_K\right)^2 + \chi_0\omega^2\Pi_{-K}\Pi_K\right] \tag{6.64}$$

und dann die Freiheitsgrade der longitudinalen antiferromagnetischen Fluktuationen ausintegrieren, um zu einem effektiven Modell der transversalen Fluktuationen

$$\int \mathcal{D}\left[\Phi\right] e^{-\tilde{S}[\Phi]-\tilde{S}[\Pi,\Phi]} = \frac{1}{\det \tilde{S}\left[\Phi\right]} e^{-\frac{1}{2}\chi_0 \int_K \omega^2 \Pi_{-K}\Pi_K} \tag{6.65}$$

zu gelangen. Somit lässt sich (6.62) umschreiben zu

$$\mathcal{Z} = \int D\left[\Pi\right] e^{-S^{(2)}_{\text{eff}}[\Pi]} \tag{6.66}$$

$$S^{(2)}_{\text{eff}}\left[\Pi\right] = \frac{\chi_0}{2}\int_K \left[\omega^2 + c_0\boldsymbol{k}^2\right]\Pi_{-K}\Pi_K. \tag{6.67}$$

Zusammenhang mit dem Nichtlinearen σ-Modell Betrachten wir das Nichtlineare σ-Modell (siehe Abschnitt (3.2)) mit dem Einheitsvektor

$$|\boldsymbol{\Omega}| = 1 \qquad \boldsymbol{\Omega} = \Omega_m \boldsymbol{m} + \Omega_\perp \boldsymbol{e}_\perp, \tag{6.68}$$

so lässt sich dessen Komponente in Richtung der lokalen Untergittermagnetisierung als

$$\Omega_m = \sqrt{1-\Omega_\perp^2} \tag{6.69}$$

schreiben, wobei $\Omega_\perp$ gerade die Fluktuationen senkrecht zur Untergittermagnetisierung sind, die wir gemäß (6.33) durch

$$\Omega_\perp = \Pi \tag{6.70}$$

ausdrücken können. Eine Taylor-Entwicklung nach kleinen Fluktuationen[35] ergibt [73]

$$\Omega_m = \sqrt{1-\Pi^2} \approx 1 - \frac{\Pi^2}{2} \qquad \Omega_\perp = \Pi \tag{6.71}$$

[35] Für große S sind die Quantenfluktuationen klein, so dass wir eine ähnliche Näherung machen wie die ursprüngliche Herleitung des Quanten Nichtlinearen σ-Modells [69] (siehe Abschnitt 3.2).

und erzeugt damit aus (3.22) einen Gaußschen Anteil der Wirkung

$$S_0[\Pi] = \frac{\rho_0}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d^D \boldsymbol{r} \left[\sum_{i=1}^{D} (\partial_i \Pi)^2 + \frac{1}{c_0^2} (\partial\tau \Pi)^2 \right], \tag{6.72}$$

was im $K = (\boldsymbol{k}, \omega)$-Raum genau unserem effektiven Modell mit ausintegrierten Feldern entspricht. Wenn man den Bereich linearer Dispersion betrachtet und $\chi_0 c_0 = \rho_s^0$ sowie $\rho_s^0/c_0^2 = \chi_0$ (siehe (3.23)), so geht die obige Gaußsche Wirkung in (6.67) über [73, 74].
Jedoch ist dieses Vorgehen nicht korrekt, da die effektive Wirkung in unserem Fall gerade nicht durch die Gaußsche Wirkung ersetzt werden kann, denn die vollen Korrelationsfunktionen behalten nicht die Gaußsche Form (6.62). Daher scheint das Vorgehen zur Herleitung des Nichtlinearen σ-Modells für den Quantenantiferromagneten im Magnetfeld nicht korrekt zu sein [80].

6.9 Dynamischer Strukturfaktor

Die anomale Dimension der longitudinalen Korrelationsfunktion $\langle \Phi_K \Phi_{K'} \rangle$ des wechselwirkenden Magnonengases (siehe (6.62)) ist experimentell durch Neutronenstreuung zugänglich, bei der die magnetischen Momente der Neutronen an die von den Magnonen erzeugten magnetischen Momente koppeln. Im Experiment wird der Streuquerschnitt pro Winkelelement (differentielle Streuquerschnitt) ermittelt, der im unmittelbaren Zusammenhang mit dem dynamischen Strukturfaktor $S_\parallel(\boldsymbol{k}, \omega)$ steht (vgl. Abschnitt 2.6). Dazu betrachten wir zunächst die gestaffelten Spinoperatoren im $\boldsymbol{k}$-Raum

$$S^{\parallel}_{\mathrm{St},\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{r}_i} \zeta_i e^{-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} S_i^y. \tag{6.73}$$

Dann ist der dynamische Strukturfaktor definiert als [38]

$$\boxed{S_\parallel(\boldsymbol{k}, \omega) = \sum_n \left| \langle \alpha_n | S^{\parallel}_{\mathrm{St},\boldsymbol{k}} | \alpha_0 \rangle \right|^2 \delta\left[\hbar\omega - (E_n - E_0)\right]} \tag{6.74}$$

mit den exakten Eigenzuständen des Hamiltonian $|\alpha_n\rangle$ zur Energie E_n

$$\hat{H} \, |\alpha_n\rangle = E_n \, |\alpha_n\rangle \, . \tag{6.75}$$

Mittels der Identität

$$\delta(x) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \to 0} \Im \left(\frac{1}{x + i\eta} \right), \tag{6.76}$$

die man leicht mit der Darstellung der δ-Distribution als Grenzwert der Lorentzkurve

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\eta \to 0} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} \tag{6.77}$$

verifiziert, erkennt man, dass der Strukturfaktor zu

$$S_\parallel(\boldsymbol{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \sum_n \frac{\langle \alpha_0 | {S^{\parallel}_{\mathrm{St},\boldsymbol{k}}}^{\dagger} | \alpha_n \rangle \langle \alpha_n | S^{\parallel}_{\mathrm{St},\boldsymbol{k}} | \alpha_0 \rangle}{\hbar\omega - (E_n - E_0) + i\eta} \tag{6.78}$$

umgeschrieben werden kann. Da es sich um Erwartungswerte des Grundzustandes handelt, können wir den Term

$$\frac{1}{\pi} \Im \sum_n \frac{\langle \alpha_0 | {S^{\parallel}_{\mathrm{St},\boldsymbol{k}}}^{\dagger} | \alpha_n \rangle \langle \alpha_n | S^{\parallel}_{\mathrm{St},\boldsymbol{k}} | \alpha_0 \rangle}{\hbar\omega + (E_n - E_0) - i\eta}$$

addieren, da er für positive Frequenzen keinen Imaginärteil hat, da $E_n > E_0$ gilt. Damit wird der dynamische Strukturfaktor zu

$$S_\parallel(\boldsymbol{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \sum_n \left| \langle \alpha_0 | S^{\parallel}_{\mathrm{St},\boldsymbol{k}} | \alpha_n \rangle \right|^2 \left(\frac{1}{\hbar\omega - (E_n - E_0) + i\eta} - \frac{1}{\hbar\omega + (E_n - E_0) - i\eta} \right). \tag{6.79}$$

Wir zeigen nun, wie dies mit der Realzeit-Korrelationsfunktion im Frequenzraum zusammenhängt. Dazu brauchen wir zunächst die Definition der Ortsraum-Korrelationsfunktion

$$i\hbar \langle \Phi_X \Phi_Y \rangle = \left\langle \alpha_0 \left| \hat{T} \left(\hat{\Phi}_X \hat{\Phi}_Y \right) \right| \alpha_0 \right\rangle \qquad X = (t_x, \boldsymbol{x}) \tag{6.80}$$

mit dem Zeitordnungsoperator

$$\hat{T} \left(\hat{\Phi}_X \hat{\Phi}_Y \right) = \hat{\Phi}_X \hat{\Phi}_Y \Theta(t_x - t_y) + \hat{\Phi}_Y \hat{\Phi}_X \Theta(t_y - t_x). \tag{6.81}$$

Die Definition der Fourier-Transformation bzw. der inversen Transformation lautet in unserem Fall

$$i\hbar \langle \Phi_X \Phi_Y \rangle = \int_{\boldsymbol{k}} \int_{\boldsymbol{k}'} \int \frac{d\omega}{2\pi} \, e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{y})} \, e^{-i\omega(t_x - t_y)} \, i\hbar \langle \Phi_{\boldsymbol{k}} \Phi_{\boldsymbol{k}'} \rangle_\omega \tag{6.82a}$$

$$i\hbar \langle \Phi_{\boldsymbol{k}} \Phi_{\boldsymbol{k}'} \rangle_\omega = \int_{\boldsymbol{x}} \int_{\boldsymbol{y}} \int dt \, e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{y})} \, e^{i\omega t} \, i\hbar \langle \Phi_X \Phi_Y \rangle . \tag{6.82b}$$

Benutzt man nun noch die Spektraldarstellung der Stufenfunktion

$$\Theta(t - t') = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + i\eta}, \tag{6.83}$$

ersetzt die zeitabhängigen Operatoren durch Operatoren im Schrödinger-Bild $\hat{\Phi}_{\boldsymbol{x},\mathrm{S}}$ mittels

$$\hat{\Phi}_X = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_x} \hat{\Phi}_{\boldsymbol{x},\mathrm{S}} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_x} \tag{6.84}$$

und fügt nun Eigenzustände $|\alpha_n\rangle$ zum vollen Hamiltonian $\hat{H}$ (6.75) ein

$$\hat{H} |\alpha_n\rangle = E_n |\alpha_n\rangle , \tag{6.85}$$

so kann man am folgenden Ausdruck nach dem Vertauschen einiger Integrationen die Fouriertransformierten der Operatoren

$$\hat{\Phi}_{\boldsymbol{k},\mathrm{S}} = \int_{\boldsymbol{x}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \hat{\Phi}_{\boldsymbol{x},\mathrm{S}} \tag{6.86}$$

ablesen. Mit der Spektraldarstellung der δ-Distribution

$$2\pi\delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \, e^{i\omega t} \tag{6.87}$$

ergibt sich nach Multiplikation mit i folgender Ausdruck:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\boldsymbol{k}} \Phi_{\boldsymbol{k}'} \rangle_\omega = \frac{1}{\hbar} \sum_n \int \frac{d\omega'}{2\pi i} \Big(& \langle \alpha_0 | \hat{\Phi}_{\boldsymbol{k},\mathrm{S}} | \alpha_n \rangle \langle \alpha_n | \hat{\Phi}_{-\boldsymbol{k}',\mathrm{S}} | \alpha_0 \rangle 2\pi\delta(\omega - \omega' + (E_0 - E_n)/\hbar) \\ & + \langle \alpha_0 | \hat{\Phi}_{-\boldsymbol{k}',\mathrm{S}} | \alpha_n \rangle \langle \alpha_n | \hat{\Phi}_{\boldsymbol{k},\mathrm{S}} | \alpha_0 \rangle 2\pi\delta(\omega + \omega' + (E_n - E_0)/\hbar) \Big) . \end{aligned} \tag{6.88}$$

Setzen wir nun $\boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k}'$, so erkennen wir mit dem Zusammenhang (6.33) die rechte Seite der Gleichung (6.79), so dass dann der dynamische Strukturfaktor durch den Imaginärteil $\Im$ der Realzeit-Korrelationsfunktion

$$S_\parallel(\boldsymbol{k}, \omega) = -\frac{M_s^2}{\pi s^2} \Im \langle \Phi_{\boldsymbol{k}} \Phi_{-\boldsymbol{k}} \rangle_\omega \tag{6.89}$$

gegeben ist (Fluktuations-Dissipations-Theorem [120, 121]). Für dessen Berechnung müssen wir nun die mittels der Renormierungsgruppe erhaltenen Imaginärzeit-Korrelationsfunktionen (6.62) durch die Ersetzung

$$i\omega \to [\omega + i\eta]$$

zur Realzeit-Korrelationsfunktion fortsetzen. In allen Dimensionen tritt gemäß (6.62) der Term aus der Berechnung der Korrelationsfunktion in Gaußscher Näherung (siehe (6.51)) auf:

$$\frac{\omega^2}{\omega^2 + c^2\boldsymbol{k}^2} = \frac{(i\omega^2)}{(i\omega)^2 - c^2\boldsymbol{k}^2} \to \Im \frac{(\omega + i\eta)^2}{(\omega + i\eta)^2 - c^2\boldsymbol{k}^2} = \frac{-2\omega\eta c^2\boldsymbol{k}^2}{(\omega^2 - \eta^2 - c^2\boldsymbol{k}^2)^2 + 4\eta^2\omega^2}. \tag{6.90}$$

Mit einer Taylor-Entwicklung nach η erhält man schließlich die Definition der Delta-Distribution (6.77) und kann somit den Grenzwert $\eta \to 0$ durchführen:

$$\lim_{\eta\to 0} \Im \frac{(\omega+i\eta)^2}{(\omega+i\eta)^2 - c^2\boldsymbol{k}^2} = -\pi \frac{\omega c^2 \boldsymbol{k}^2}{\omega^2 + c^2\boldsymbol{k}^2}\, \delta\left(\frac{\omega^2 - c^2\boldsymbol{k}^2}{\sqrt{2(\omega^2+c^2\boldsymbol{k}^2)}}\right) = -\frac{\pi\omega}{2}\delta(\omega - c\,|\boldsymbol{k}|). \tag{6.91}$$

Im letzten Schritt wurde die Regel

$$\delta\left(f(x)\right) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x - x_i) \qquad \forall x_i : f(x_i) = 0 \tag{6.92}$$

ausgenutzt sowie der Vorfaktor mit den Eigenschaften der Delta-Distribution umgeschrieben. Damit ist der dynamische Strukturfaktor (6.79) in $D = 3$

$$S_\parallel(\boldsymbol{k},\omega) = \frac{\chi s^2}{M_s^2}\left[\frac{\omega Z_\parallel^2}{2}\delta(\omega - c|\boldsymbol{k}|) + \frac{(mc)^3}{Z_\rho^2\rho_0}\Theta(\omega - c|\boldsymbol{k}|)\right]. \tag{6.93}$$

Für $1 < D < 3$ enthält die Korrelationsfunktion einen anderen analytischen Ausdruck, dessen Imaginärteil nach Wick-Rotation noch zu berechnen ist

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} + \boldsymbol{k}^2\right)^{\frac{D-3}{2}} = \left(\boldsymbol{k}^2 - \frac{(i\omega)^2}{c^2}\right)^{\frac{D-3}{2}} \to \Im\left(\boldsymbol{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\right)^{\frac{D-3}{2}} = \Im e^{\ln\left(\boldsymbol{k}^2 - \omega^2/c^2\right)\frac{D-3}{2}}. \tag{6.94}$$

Mit der Definition der Winkelfunktionen $e^{ix} = \cos x + i\sin x$ sowie $\ln(a) = \ln|a| + i\pi\Theta(-a)\ \forall a \in \mathcal{R}$ können wir den Imaginärteil

$$\Im\left(\boldsymbol{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\right)^{\frac{D-3}{2}} = \left(\boldsymbol{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\right)^{\frac{D-3}{2}} \sin\left[\pi(D-3)/2\right]\Theta(\omega - c|k|) \tag{6.95}$$

bilden. Beachtet man weiter den Grenzwert $\lim_{x\to 0}\sin(x)/x = 1$, so kann man dieses Ergebnis für $0 < \frac{\omega}{c} \lesssim k_G$ (siehe (6.116)) mit (6.93) zu

$$\boxed{S_\parallel(\boldsymbol{k},\omega) = \frac{\chi s^2}{M_s^2}\left[\frac{Z_\parallel^2}{2}c|\boldsymbol{k}|\delta(\omega - c|\boldsymbol{k}|) + C_D\frac{(mc)^3}{Z_\rho^3\rho_0}\frac{\Theta(\omega - c|\boldsymbol{k}|)}{\left(\frac{\omega^2}{c^2} - \boldsymbol{k}^2\right)^{\frac{3-D}{2}}}\right]} \tag{6.96}$$

zusammenfassen unter Verwendung der dimensionslosen Konstante

$$C_D = K_{D+1}\frac{\sin\left(\pi\frac{D-3}{2}\right)}{\pi\frac{D-3}{2}}, \tag{6.97}$$

die für die relevanten Dimensionen $C_2 = \pi^{-3}$ und $C_3 = 1/(8\pi^2)$ ist.

6.9.1 Quasiteilchenzerfall

Aufgrund des 3-er Vertex in (6.9) ist sowohl die Erzeugung eines Magnons durch Streuung von 2 anderen Magnonen möglich, als auch der Zerfall eines Magnons in 2 oder mehr Magnonen. Ist kein Magnetfeld vorhanden, so kann kein spontaner Zerfall von Magnonen des isotropen Antiferromagneten mit Untergittern stattfinden [43]. Betrachten wir den Zerfall eines Magnons mit dem Impuls $\boldsymbol{k}$ in 2 Magnonen mit Impulsen $\boldsymbol{k}_1$ und $\boldsymbol{k}_2$ (siehe Abbildung 31), so lauten die Bedingungen der Energieerhaltung und Impulserhaltung:[36]

$$E_{\boldsymbol{k}} = E_{\boldsymbol{k}_1} + E_{\boldsymbol{k}_2} \tag{6.98a}$$
$$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2. \tag{6.98b}$$

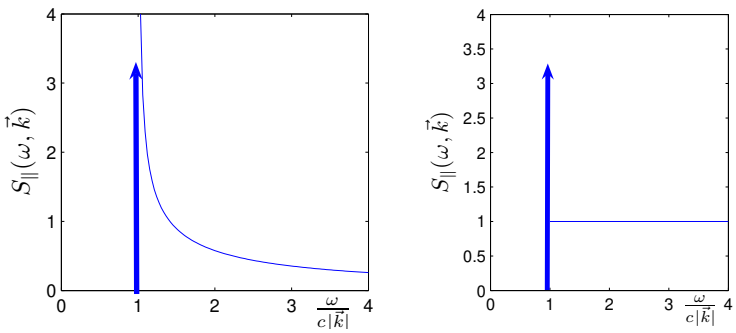

Abbildung 28: Neben dem δ-Peak an der Stelle $\omega = c|\boldsymbol{k}|$ hat der dynamische Strukturfaktor in $D = 2$ noch einen kontinuierlichen Anteil mit Wurzel-Divergenz vom zusätzlichen Beitrag der Korrelationsfunktion (6.62) (links). Dagegen hat der dynamische Strukturfaktor in $D = 3$ neben dem δ-Peak noch einen kontinuierlichen Anteil, der konstant ist (rechts).

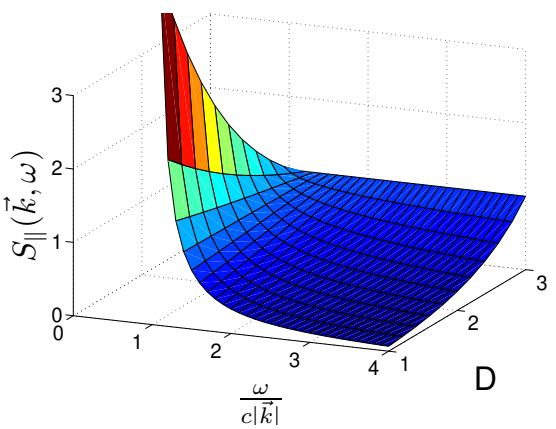

Abbildung 29: Veranschaulichung des gestaffelten Strukturfaktors für beliebige Dimensionen $1 < D \leq 3$

Ob die Gleichungen (6.98) erfüllt werden können, hängt von der Form der Dispersion ab. Für unser Bogoliubov-Spektrum der Form (6.18)

$$E_{\boldsymbol{k}} \approx c_0|\boldsymbol{k}| + \alpha|\boldsymbol{k}|^3 \tag{6.99}$$

hängt die Möglichkeit des Quasiteilchenzerfalls in $D > 1$ vom Vorzeichen des Koeffizienten α ab [122]. Für kleine Impulse sind die Impulse des zerfallenden Teilchens mit Impuls $\boldsymbol{k}$ und eines entstehenden Teilchens mit Impuls $\boldsymbol{k}_1$ nahezu kolinear, so dass sich (6.98) zu

$$1 - \cos\vartheta = \frac{3\alpha}{c_0}\,(k - k_1)^2 \tag{6.100}$$

vereinfachen lässt, wobei $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{k}_1 = kk_1 \cos\vartheta$ (siehe Abbildung 31). Somit kann spontaner Quasiteilchenzerfall nur für $\alpha > 0$ eintreten, was in unserem Fall verwirklicht ist (6.19b) und so zu einer endlichen Dämpfung der Magnonen führt [122].[37] Obwohl wir den anharmonischen Term nicht berücksichtigt haben, ist der Fall $\alpha = 0$ ausreichend, um Divergenzen der Störungstheorie der in Abbildung 27 gezeigten Diagrammen hervorzurufen, die im nächsten Abschnitt zur Abschätzung der Gültigkeit unserer Ergebnisse herangezogen werden. Gerade dieser Zerfallsprozess steht wohl in engem Zusammenhang mit den

[36] Da wir nur Anregungen mit kleinen Impulsen betrachten, spielt in der Gleichung (6.98b) der Gitterimpuls keine Rolle.
[37] Dies ist auch für das Phononenspektrum des flüssigen Helium (^{4}He) bei kleinen Impulsen der Fall.

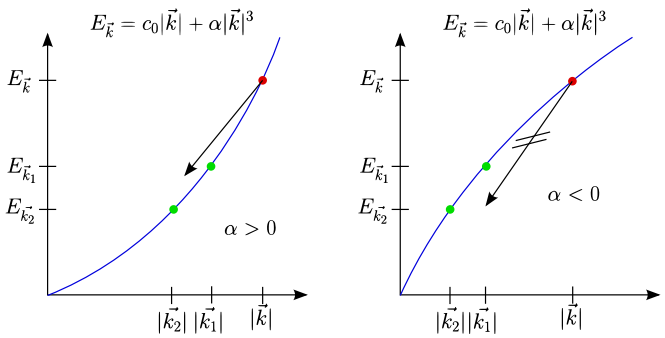

Abbildung 30: Während für $\alpha > 0$ der Quasiteilchenzerfall möglich ist und zu Divergenzen in der Störungstheorie führt (links), gibt es für $\alpha < 0$ keine Möglichkeit die Energie-Impulserhaltung (6.98) zu erfüllen und erst höhere Terme erlauben einen spontanen Zerfall (rechts).

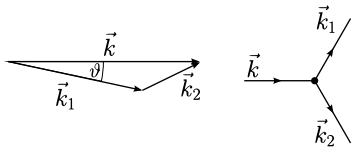

Abbildung 31: Geometrie der Impulse beim Quasiteilchenzerfall (links), Darstellung des 3-er Vertex für den Zerfall eines Quasiteilchens mit Impuls $\boldsymbol{k}$ in zwei Quasiteilchen mit Impuls $\boldsymbol{k}_1$ und $\boldsymbol{k}_2$ in diagrammatischer Sprache (rechts)

anomalen longitudinalen Fluktuationen [123] und verursacht sowohl in der Bogoliubov-Theorie des wechselwirkenden Bose-Gases [124] als auch in der konventionellen $1/S$-Entwicklung des QAF in starkem Magnetfeld konzeptionelle Schwierigkeiten [41].

6.9.2 Verallgemeinertes Ginzburg-Kriterium

Zur korrekten Interpretation des Ergebnisses (6.96) müssen wir die Bereiche der Gültigkeit der Formel abschätzen. Dazu folgen wir [23] und betrachten zunächst die Korrelationsfunktion der Felder nach Symmetriebrechung mit dem Hamiltonian (6.9).

$$G_K = -\begin{pmatrix} \langle \Delta\Psi_K \Delta\Psi_K^\dagger \rangle & \langle \Delta\Psi_{-K} \Delta\Psi_{-K} \rangle \\ \langle \Delta\Psi_K^\dagger \Delta\Psi_{-K}^\dagger \rangle & \langle \Delta\Psi_{-K} \Delta\Psi_{-K}^\dagger \rangle \end{pmatrix} = (G_K)_{ij} \qquad i,j \in \{1,2\}\,. \tag{6.101}$$

Für die Green-Funktion gilt die gewöhnliche Dyson-Gleichung in Matrix-Notation

$$G_K^{-1} = G_{0,K}^{-1} - \Sigma_K \qquad \Leftrightarrow \qquad G_K = \frac{1}{G_{0,K}^{-1} - \Sigma_K} \qquad K = (i\omega, \boldsymbol{k})\,. \tag{6.102}$$

Betrachtet man nun das wechselwirkende Bose-Gas in der Darstellung vor der Diagonalisierung mittels Bogoliubov-Transformation und setzt den freien Propagator wie im Fall ohne Symmetriebrechung als Diagonalmatrix an

$$G_{0,K} = \begin{pmatrix} G_0(K) & 0 \\ 0 & G_0(-K) \end{pmatrix} \tag{6.103}$$

mit

$$G_0(K) = \frac{1}{i\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}} + \mu} = \frac{1}{i\omega - \frac{\boldsymbol{k}^2}{2m} + \mu}, \tag{6.104}$$

so stecken alle Informationen über die Nebendiagonalelemente des vollen Propagators in der Selbstenergie Σ_K, die aus 2 Anteilen besteht:

1. Beitrag der Symmetriebrechung: Betrachtet man den nicht diagonalen Propagator (6.16) aus dem Hamiltonian mit Symmetriebrechung (6.9), so sind dessen Nebendiagonalelemente direkt proportional zur Dichte der Bosonen in der symmetriegebrochenen Phase.

2. Beiträge aus der Wechselwirkung: Durch die Symmetriebrechung erhält man neben den quartischen Wechselwirkungstermen auch kubische Terme (die linearen Terme verschwinden per Wahl des chemischen Potentials). Daraus ergeben sich ebenfalls Beiträge zu den Nebendiagonalelementen der Selbstenergie.

Beide Beiträge divergieren für kleine $\boldsymbol{k} \to 0$, aber Ward-Identitäten, die man aus der $U(1)$-Symmetrie herleiten kann (siehe Appendix G), garantieren die Wohldefiniertheit der Theorie und erhalten die Form der Gaußschen Korrelationsfunktionen $\langle \Pi\Pi \rangle$ und $\langle \Phi\Pi \rangle$. Berechnet man nun die Selbstenergie bis zur 2. Ordnung Störungstheorie, so gilt:

$$\left(\Sigma_K\right)_{12} = \left(\Sigma_K^{(0)}\right)_{12} + \left(\Sigma_K^{(1)}\right)_{12} \tag{6.105}$$

mit den oben genannten Beiträgen

$$\left(\Sigma_K^{(0)}\right)_{12} = \mu = U_0 s\rho = U_0 \left|\Psi_0\right|^2 \tag{6.106a}$$

$$\left(\Sigma_K^{(1)}\right)_{12} = A_K. \tag{6.106b}$$

Die 3-Teilchen-Wechselwirkung taucht nun bei Symmetriebrechung auf und ist proportional zu $U_0\Psi_0$. Insgesamt können wir das Diagramm aus Abbildung 27

$$A_K \sim \Gamma_3^2 \int_q^{\Lambda_0} G_q G_{k+q} \tag{6.107}$$

berechnen. Dabei ist

$$\int_q^{\Lambda_0} = \int_q \Theta(\Lambda_0 - q) \tag{6.108}$$

das regularisierende Integral mit dem Cutoff, den wir später auf eine typische Energie setzen werden. Nun benutzen wir das Ergebnis des Propagators in Bogoliubov-Näherung

$$G_q \sim \frac{1}{\tilde{q}^2}. \tag{6.109}$$

Hierbei haben wir skalierte Impulse eingesetzt $\tilde{q} = \left(\frac{\omega}{c_0}, \boldsymbol{q}\right) = (\tilde{\omega}, \boldsymbol{q})$. Weiterhin wird die Energie in Einheiten der Masse gemessen $2m = 1$. Mit der Dichte des Kondensats $\rho_0 = \left|\psi_0\right|^2$ lässt sich das Integral unter Berücksichtigung der korrekten Dimension (siehe (6.58)) abschätzen

$$A_K \sim U_0^2 \rho_0 \int \frac{d\omega'}{2\pi} \int \frac{d^D\boldsymbol{q}}{(2\pi)^D} \frac{1}{\tilde{q}^2} \frac{1}{(\tilde{k}+\tilde{q})^2}. \tag{6.110}$$

Nun nähern wir den 2. Propagator für kleine $|\tilde{k}| \ll |\tilde{q}|$ zu $(\tilde{k}+\tilde{q})^2 \approx (|\tilde{k}| + |\tilde{q}|)^2$ und erhalten einen richtungsunabhängigen Integranden, so dass sich das Integral in Polarkoordinaten lösen lässt. Mit der Substitution $d\tilde{\omega} = c_0\, d\omega'$ ergibt sich

$$A_K \sim U_0^2 \rho_0 \frac{(2m)^2}{(2\pi)^{D+1}} \int_{\tilde{q}}^{\Lambda_0} \frac{1}{\tilde{q}^2(\tilde{k}+\tilde{q})^2} = U_0^2 \rho_0 c_0 K_{D+1} (2m)^2 \int_0^{\Lambda_0} \frac{\tilde{q}^D\, d\tilde{q}}{\tilde{q}^2(\tilde{k}+\tilde{q})^2}. \tag{6.111}$$

Man beachte, dass im letzten Integral nur noch über die Beträge des Impulsübertrags $\tilde{q} = |\tilde{q}|$ integriert wird. Nun lässt sich einfach abschätzen

$$\begin{aligned} \int_0^{\Lambda_0} \frac{\tilde{q}\, d\tilde{q}}{(\tilde{k}+\tilde{q})^2} &= \ln\left(\tilde{q}+\tilde{k}\right)\Big|_0^{\Lambda_0} &&\approx \ln\Big(\frac{\Lambda_0}{\tilde{k}}\Big) && D = 3 \\ \int_0^{\Lambda_0} \frac{\tilde{q}^{D-2}\, d\tilde{q}}{(\tilde{k}+\tilde{q})^2} &\approx -\left(\tilde{k}+\tilde{q}\right)^{D-3}\Big|_0^{\Lambda_0} &&\approx \tilde{k}^{D-3} && 1 < D < 3. \end{aligned} \tag{6.112}$$

und schließlich der Einschleifen-Beitrag zum Nebendiagonalelement der Selbstenergie

$$A_K \sim U_0^2 \rho_0 c_0 (2m)^2 \begin{cases} \ln\left(\frac{\Lambda_0}{K}\right) & D = 3 \\ K^{D-3} & 1 < D < 3 \end{cases} \tag{6.113}$$

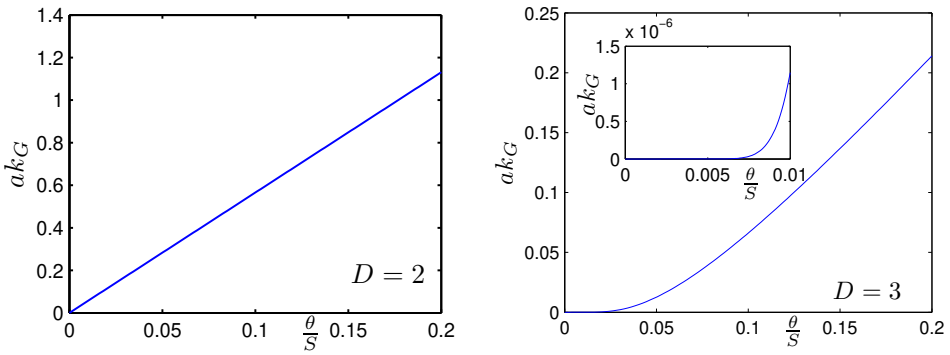

Abbildung 32: In 2 Dimensionen bleibt der Ginzburg-Impuls auch für kleine Kippwinkel θ noch endlich; die Frequenz ω der Neutronen ist in Experimenten so wählbar, dass $\omega/c \lesssim k_G$ (links). In 3 Dimensionen dagegen führt die exponentielle Abhängigkeit bei kleinen Kippwinkeln θ zu sehr kleinen Werten des Ginzburg-Impulses, so dass es experimentell schwierig wird das Ginzburg-Kriterium zu erfüllen.

berechnen. Die nicht-analytischen Korrekturen zur longitudinalen Korrelationsfunktion werden erst dann wichtig, wenn der divergente Beitrag zur Selbstenergie der Störungstheorie größer wird als der Beitrag der reinen Symmetriebrechung. Wir können daher einen Ginzburg-Impuls k_G definieren, für den beide Anteile etwa gleich groß sind. Unterhalb von k_G sind dann die nicht-analytischen Korrekturen wichtig, da auch der Beitrag der Einschleifennäherung unterhalb von k_G wegen der Infrarotdivergenzen gemäß (6.113) groß wird. Für k_G sind beide Beiträge gleich und wir erhalten mit $c_0^2 = \mu/m$:

$$1 \approx \frac{\left(\Sigma^{(1)}_{k_G}\right)_{12}}{\left(\Sigma^{(0)}_{k_G}\right)_{12}} = \sqrt{U_0^3 \rho_0 \left(2m\right)^3} \begin{cases} k_G^{D-3} & 1 < D < 3 \\ \ln\left(\frac{\Lambda_0}{k_G}\right) & D = 3. \end{cases} \tag{6.114}$$

Setzt man nun den Cutoff auf typische Impulse $\Lambda_0 \approx 2mc_0$ und drückt den kritischen Impulsübertrag durch die Dichte der kondensierten Bosonen sowie deren Masse und die Spinwellengeschwindigkeit aus, so ergibt sich mit (6.6), (6.28b) und (4.63)

$$\left[U_0^3 \rho_0 (2m)^3\right]^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \rho_0 \left(\frac{a}{\sqrt{D}\theta}\right) \approx \frac{\rho_0}{(mc)^3}, \tag{6.115}$$

wobei wir im letzten Schritt Faktoren $O(1)$ weggelassen haben, mittels (6.57) die korrekte Spinwellengeschwindigkeit eingefügt haben und mit (6.28a) $mc_0 = \sqrt{D}\theta/a$ eingesetzt haben. Schließlich können wir den Ginzburg-Impuls für beliebige Dimensionen abschätzen und somit den Bereich der Gültigkeit der Korrelationsfunktion (6.62) sowie des dynamischen Strukturfaktors (6.96) eingrenzen:

$$k_G \approx \begin{cases} mc\, e^{-\frac{\rho_0}{(mc)^3}} & D = 3 \\ mc \left(\frac{mc}{\rho_0^{1/D}}\right)^{\frac{D}{3-D}} & 1 < D < 3 \end{cases}. \tag{6.116}$$

Anhand dieser Darstellung sieht man bereits, dass der maßgebliche Impuls in 3 Dimensionen exponentiell klein wird, während in 2 Dimensionen ein Potenzgesetz gilt.

6.9.3 Spektrales Gewicht des kontinuierlichen Anteils

Für die experimentelle Messung ist weniger der dynamische Strukturfaktor allein, als das spektrale Gewicht der einzelnen Anteile wichtig, da im Experiment immer nur eine endliche Energieauflösung erreicht

wird. Vor dessen Betrachtung wollen wir zunächst den Vorfaktor L des kontinuierlichen Anteils des Strukturfaktors näher betrachten und dessen Abhängigkeit vom Neigungswinkel θ ableiten:

$$L = \frac{\chi s^2}{M_s^2} C_D \frac{(mc)^3}{Z_\rho} \rho_0 \sim \frac{c^3}{M_s^2 \rho_0} \sim \theta^{-1} \sim \frac{1}{\sqrt{h_c - h}}. \tag{6.117}$$

Mit den Relationen (6.28b) und (6.28a) findet man sofort, dass der Vorfaktor besonders groß wird, wenn der Neigungswinkel klein ist also für Magnetfelder h knapp unterhalb des kritischen Feldes h_c. Wohl wissend, dass die gesamte Ableitung nur für kleine Neigungswinkel exakt ist, ist das Ergebnis auch für nicht zu große θ gültig. Messungen des Neutronenstreuquerschnitts detektieren nun Abweichungen, die von der anomalen Dimension der longitudinalen Korrelationsfunktion herrühren um so besser, je kleiner $h_c - h$ ist, also bei Magnetfeldern nahe des kritischen Punktes. Also sind weiche Antiferromagneten mit kleiner Wechselwirkung $\tilde{J}_0$ besser geeignet, da in diesem das kritische Magnetfeld leichter experimentell zugänglich ist. Berechnen wir nun explizit die entsprechenden spektralen Gewichte der Terme in (6.96). Für den Beitrag I_δ von der δ-Funktion und den kontinuierlichen Anteil I_c erhalten wir

$$I_\delta = \int_0^{ck_G} d\omega \frac{\chi s^2 Z_\parallel^2}{2M_s^2} c|\boldsymbol{k}| \, \delta(\omega - c|\boldsymbol{k}|) = \frac{\chi s^2 Z_\parallel^2}{2M_s^2} c|\boldsymbol{k}| \qquad \text{für } |\boldsymbol{k}| < k_G \tag{6.118}$$

$$I_c = \int_0^{ck_G} d\omega C_3 \frac{\chi s^2 (mc)^3}{M_s^2 Z_\rho^3 \rho_0} \Theta(\omega - c|\boldsymbol{k}|) = C_3 \frac{\chi s^2 (mc)^3}{M_s^2 Z_\rho^3 \rho_0 c} \, (k_G - |\boldsymbol{k}|). \tag{6.119}$$

Damit der kontinuierliche Anteil messbar ist, muss dessen spektrales Gewicht vergleichbar mit dem des δ-Peaks sein, so dass wir als Kriterium deren Gleichheit fordern

$$\frac{I_c}{I_\delta} = \frac{2C_3 (mc)^3}{Z_\rho^3 \rho_0 Z_\parallel^2} \frac{k_G - |\boldsymbol{k}|}{|\boldsymbol{k}|} \sim \frac{(mc)^3}{\rho_0} \frac{k_G - |\boldsymbol{k}|}{|\boldsymbol{k}|} \approx \frac{(mc)^3}{\rho_0} \frac{k_G}{|\boldsymbol{k}|}. \tag{6.120}$$

Somit ist der Beitrag des Kontinuums für Impulse $|\boldsymbol{k}|$, die kleiner als der Ginzburg-Impuls k_G sind, größer als der Beitrag des δ-Peaks und experimentell auflösbar. Maßgeblich für k_G ist die Einstellung des chemischen Potentials μ durch das Magnetfeld (4.61) und über (6.28b) der Kippwinkel θ, der für die Anwendbarkeit der Berechnungen klein sein muss. Drückt man nun den Ginzburg-Impuls durch θ aus, so ergibt sich

$$\boxed{k_G \approx \frac{\sqrt{3}\theta}{a} e^{-\frac{S}{6\sqrt{3}\theta}}} \tag{6.121}$$

und ist somit für kleine Winkel θ sehr klein (siehe Abbildung 32). Somit dürfte es kaum möglich sein $I_c/I_\delta \approx 1$ zu erhalten und die Eigenschaften der longitudinalen Fluktuationen des MBEC sind wohl in 3 Dimensionen nicht nachmessbar.
Für 2 Dimensionen berechnet man den Beitrag des δ-Peaks wie in (6.118) und für den kontinuierlichen Anteil erhält man für $|\boldsymbol{k}| < k_G$

$$\begin{aligned} I_c &= C_2 \frac{\chi s^2 (mc)^3}{M_s^2 Z_\rho^3 \rho_0} \int_{c|\boldsymbol{k}|}^{ck_G} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega^2/c^2 - \boldsymbol{k}^2}} = C_2 \frac{\chi s^2 (mc)^3}{M_s^2 Z_\rho^3 \rho_0} \, c \ln\left(\frac{k_G + \sqrt{k_G^2 - \boldsymbol{k}^2}}{|\boldsymbol{k}|} \right) \\ &\approx C_2 \frac{\chi s^2 (mc)^3}{M_s^2 Z_\rho^3 \rho_0} \, c \ln\left(\frac{k_G}{|\boldsymbol{k}|} \right), \end{aligned} \tag{6.122}$$

somit ist das Verhältnis der beiden Anteile nun

$$\frac{I_c}{I_\delta} \sim \frac{(mc)^3}{\rho_0 |\boldsymbol{k}|} \ln\left(\frac{k_G}{|\boldsymbol{k}|} \right) = \frac{k_G}{|\boldsymbol{k}|} \ln\left(\frac{k_G}{|\boldsymbol{k}|} \right) \qquad \text{für } |\boldsymbol{k}| < k_G \tag{6.123}$$

und der Ginzburg-Impuls hängt linear mit dem Kippwinkel zusammen

$$\boxed{k_G \approx \frac{4\sqrt{2}\theta}{Sa}.} \tag{6.124}$$

Damit ist k_G für kleine Winkel θ zwar auch klein, aber für endliche Winkel $\theta < 1$ ist sicherlich $|\boldsymbol{k}| \lesssim k_G$ erreichbar und somit die anomale Dimension der longitudinalen Korrelationsfunktion über die Messung des dynamischen Strukturfaktors mittels Neutronenstreuung für zweidimensionale Systeme nachweisbar.

6.10 Zusammenfassung

Im vorangegangenen Kapitel haben wir ein nicht-triviales Ergebnis der Behandlung des wechselwirkenden Bose-Gases mittels Renormierungsgruppe benutzt: Während 2 Korrelationsfunktionen durch eine Gaußsche Wirkung beschrieben werden können, ändert sich die longitudinale Korrelationsfunktion qualitativ. Auch in $D = 3$, wo bisher die Gaußsche Näherung als hinreichend gut gilt, ergibt sich ein kontinuierlicher Anteil in der $\langle\phi\phi\rangle$-Korrelationsfunktion (6.62), der in engem Zusammenhang mit einer durch Goldstone-Bosonen bei Brechung kontinuierlicher Symmetrien induzierten anomalen Dimension der longitudinalen Felder steht. Die Übertragung dieses Ergebnisses des wechselwirkenden Bose-Gases auf die magnetischen Anregungen des Quantenantiferromagneten im Magnetfeld erlaubt es nun, bisher noch nicht zugängliche Eigenschaften des Bose-Gases nachzumessen. Die großen longitudinalen Fluktuationen der kondensierten Magnonen erzeugen nun einen Beitrag zum longitudinalen gestaffelten Strukturfaktor (6.96). Dieses Hauptergebnis des vorangegangenen Kapitels wurde bereits in [119] unter Verwendung des Nichtlinearen-σ-Modells für den zweidimensionalen Quantenantiferromagneten diskutiert. Unter Verwendung eines ähnlichen Modells wurde auch in [125] die Korrelationsfunktion der Felder im Nichtlinearen-σ-Modell hergeleitet. Unter Beschränkung auf $D = 2$ wird ein zu (6.62) analoger Ausdruck benutzt, um den dynamischen Strukturfaktor herzuleiten.[38]

Gemäß der in Abschnitt 6.9.2 diskutierten Beschränkungen ist der Effekt des kontinuierlichen Anteils in $S_{\parallel}(\boldsymbol{k}, \omega)$ sowohl in zwei als auch in drei Dimensionen groß, solange das Magnetfeld so eingestellt ist, dass $|\boldsymbol{k}|$ kleiner als der Ginzburg-Impuls (6.116) ist. Zumindest in 2 Dimensionen sollte die anomale Dimension der longitudinalen Fluktuationen mittels Neutronenstreuexperimenten beobachtbar sein. In der Vergangenheit wurden zum Beispiel an La_2CuO_4 als Realisierung des zweidimensionalen QAF bereits die Spinwellenrenormierung sowie der elastische Beitrag des dynamischen Strukturfaktors ohne Magnetfeld nachgewiesen, mangels Auflösung ist jedoch der kontinuierliche Anteil nicht beobachtet worden [126].

[38] Es werden weiterhin noch Effekte endlicher Temperaturen diskutiert, sowie die Möglichkeit von Messungen mittels NMR erwähnt.

7 Erweiterung des Modells, Korrekturen

Die im letzten Kapitel herausgestellten Ergebnisse sind zwar qualitativ auf reale Systeme übertragbar, jedoch wurden erhebliche Vereinfachungen gemacht, deren Auswirkungen auf die Ergebnisse im folgenden berechnet werden sollen. Dazu werden insbesondere die Renormierungsfaktoren (6.57) quantitativ bestimmt, da diese zum direkten Vergleich mit dem Experiment notwendige Vorfaktoren in den Messgrößen darstellen. An dieser Stelle wird eine konsequente Dichteentwicklung durchgeführt, während es auch die Möglichkeit zur Berechnung in $1/S$-Entwicklung mit konventioneller Spinwellentheorie [80, 127] gibt. Bisher gibt es nur zuverlässige Werte der Renormierungsfaktoren ohne angelegtes Magnetfeld [55, 56, 80]. Zur Überprüfung der Konsistenz der Herangehensweise werden später noch thermodynamische Größen bestimmt und mit bekannten Ergebnissen verglichen.

7.1 Entwicklung in der Bosonendichte für beliebigen Gesamtspin S

In der gewöhnlichen Spinwellentheorie wird der inverse Spin als groß angenommen, was auch im Fall von $S = 1/2$ zu respektablen Ergebnissen führt, und dann die exakte Holstein-Primakoff-Transformation (3.8) nach inversen Potenzen des Spins entwickelt. Im Wesentlichen ist diese Entwicklung auch für beliebige Spins gerechtfertigt, solange die Bosonendichte klein bleibt. Dabei wird allerdings vergessen, dass der aus der Entwicklung entstehende Hamilton-Operator nicht normalgeordnet ist und aus der Normalordnung weitere Terme in der gleichen Ordnung der Bosonendichte aber höherer Ordnung in $1/S$ entstehen. Betrachtet man anschließend den klassischen Grenzwert $S \to \infty$ so spielt das keine Rolle. Für reale Systeme ist $S \approx \mathcal{O}(1)$, so dass der wirklich kleine Parameter wohl die Bosonendichte ist. Mittels der in [101] entwickelten Methode (siehe Appendix A), gehen wir nun vom Modellsystem (4.53) aus und entwickeln wie in Abschnitt 4.2.2 um den klassischen Grundzustand im starken Magnetfeld und erhalten so einen Hamiltonian eines wechselwirkenden Bose-Gases

$$H = H^{\parallel} + H^{\perp} \tag{7.1}$$

unter der Annahme von kleiner Bosonendichte, der sich wieder aus parallelem Anteil und senkrechten Anteil zusammensetzt. Da sich die Transformation der z-Komponente des Spins nicht durch die Korrekturen zur Normalordnung ändert, hat der parallele Anteil die bekannte Form

$$H^{\parallel} = H_2^{\parallel} + H_4^{\parallel} \tag{7.2a}$$

$$H_2^{\parallel} = -\frac{S}{2}\sum_{ij} J_{ij}(b_i^\dagger b_i + b_j^\dagger b_j) + h\sum_i b_i^\dagger b_i \tag{7.2b}$$

$$H_4^{\parallel} = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j. \tag{7.2c}$$

Nur der senkrechte Anteil enthält die veränderten Leiteroperatoren

$$H^{\perp} = \frac{1}{4}\sum_{ij} J_{ij}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\right), \tag{7.3}$$

so dass dieser bis zur dritten Ordnung in der Bosonendichte die Form

$$H^{\perp} = H_2^{\perp} + H_4^{\perp} + H_6^{\perp} \tag{7.4}$$

$$
\begin{aligned}
H_2^{\perp} &= \frac{S}{2}\sum_{ij}(b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i) && \text{(7.5a)}\\
H_4^{\perp} &= \frac{K-1}{2}S\sum_{ij}J_{ij}\Big(b_i^\dagger b_j^\dagger b_j b_j \\
&\quad + b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_j + b_j^\dagger b_j^\dagger b_j b_i + b_j^\dagger b_i^\dagger b_i b_i\Big) && \text{(7.5b)}\\
H_6^{\perp} &= \frac{S}{2}\sum_{ij}J_{ij}\Big[(K-1)^2\Big(b_i^\dagger b_i^\dagger b_j^\dagger b_i b_j b_j + b_j^\dagger b_j^\dagger b_i^\dagger b_j b_i b_i\Big) \\
&\quad + \frac{1}{2}(L-2K+1)\Big(b_i^\dagger b_j^\dagger b_j^\dagger b_j b_j b_j + b_i^\dagger b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i b_j \\
&\quad + b_j^\dagger b_j^\dagger b_j^\dagger b_j b_j b_i + b_j^\dagger b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_i b_i\Big)\Big] && \text{(7.5c)}
\end{aligned}
$$

hat. Dabei sind die Konstanten aus der Normalordnung (A.4) (A.9)

$$
\begin{aligned}
K &= \sqrt{1-\frac{1}{2S}} && \text{(7.6a)}\\
L &= \sqrt{1-\frac{1}{S}} \quad , \quad S \geq 1. && \text{(7.6b)}
\end{aligned}
$$

Betrachtet man den quadratischen Anteil

$$
H_2 = H_2^{\parallel} + H_2^{\perp} = -\frac{S}{2}\sum_{ij}J_{ij}(b_i^\dagger b_i + b_j^\dagger b_j - b_i^\dagger b_j - b_i b_j^\dagger) + h\sum_i b_i^\dagger b_i, \tag{7.7}
$$

so ist dieser unverändert (siehe Abschnitt 6.4), d.h. die Korrekturen ändern die Ergebnisse der linearen Spinwellentheorie in keiner Weise. Ebenso bleibt die Definition der antiferromagnetischen Magnonen über die Bogoliubov-Transformation unverändert. Mit der Entwicklung der Funktionen K und L (A.10) sieht man, dass $H_4^{\perp}$ Terme der Ordnung $1/S$ oder höher und $H_6^{\perp}$ der Ordnung $1/S^2$ oder höher enthält.

7.1.1 Diskrete Formulierung

Wir starten mit der Formulierung des Hamiltonian gemäß (4.59) und der Dispersion (4.60) und führen direkt den endlichen Erwartungswert der Mode ohne Anregungslücke („gapless“-Mode) gemäß der spontan gebrochenen Symmetrie im Grundzustand ein:

$$
\boxed{b_{\boldsymbol{k}-} = \sqrt{Na^D}b_0\delta_{\boldsymbol{k},0} + \Delta b_{\boldsymbol{k}-}.} \tag{7.8}
$$

Berücksichtigt man nun die Wechselwirkungsterme (7.5b), so spaltet sich der Hamiltonian in Terme auf, die ein bis vier bosonische Operatoren enthalten.[39]

$$
\begin{aligned}
H_0 &= \frac{\tilde{J}_0}{N}(Na^D)^2|b_0|^4\tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0000}} && (7.9a)\\
H_1 &= \left(b^\dagger_{0-}b_0 + b_{0-}b^*_0\right)\sqrt{Na^D}\left(2\left|b_0\right|^2\tilde{J}_0a^D\tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0000}} - \mu_0\right) && (7.9b)\\
H_2 &= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\Big[f_{\boldsymbol{k}\sigma}\left(b^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}b_{\boldsymbol{k}\sigma} + b_{-\boldsymbol{k}\sigma^\dagger}b_{-\boldsymbol{k}\sigma}\right)\\
&\quad g^*_{\boldsymbol{k}\sigma}b_{-\boldsymbol{k}\sigma}b_{\boldsymbol{k}\sigma} + g_{\boldsymbol{k}\sigma}b^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}b^\dagger_{-\boldsymbol{k}\sigma}\Big] && (7.9c)\\
H_3 &= \tilde{J}_0\sqrt{\frac{a^D}{N}}\sum_{\mathbf{123}}\Big(\delta_{1,2+3}\left[i_{\mathbf{123}}b^\dagger_{\mathbf{1}-}b_{\mathbf{2}-}b_{\mathbf{3}-} + j_{\mathbf{123}}b^\dagger_{\mathbf{1}-}b_{\mathbf{2}+}b_{\mathbf{3}+} + k_{\mathbf{123}}b^\dagger_{\mathbf{1}+}b_{\mathbf{2}-}b_{\mathbf{3}+}\right] && (7.9d)\\
&\quad +\delta_{\mathbf{1+2,3}}\left[i^*_{\mathbf{321}}b^\dagger_{\mathbf{1}-}b^\dagger_{\mathbf{2}-}b_{\mathbf{3}-} + j^*_{\mathbf{3}21}b^\dagger_{\mathbf{1}+}b^\dagger_{\mathbf{2}+}b_{\mathbf{3}-} + k^*_{\mathbf{3}21}b^\dagger_{\mathbf{1}+}b^\dagger_{\mathbf{2}-}b_{\mathbf{3}+}\right]\Big)\\
H_4 &= \frac{\tilde{J}_0}{N}\sum_{\mathbf{1234}}\delta_{\mathbf{1+2,3+4}}\left(\sum_{\sigma\sigma'}\tilde{\Gamma}^{2\sigma 2\sigma'}_{\mathbf{1234}}b^\dagger_{\mathbf{1}\sigma}b^\dagger_{\mathbf{2}\sigma}b_{\mathbf{3}\sigma'}b_{\mathbf{4}\sigma'} + \tilde{\Gamma}^{-+-+}_{\mathbf{1234}}b^\dagger_{\mathbf{1}-}b^\dagger_{\mathbf{2}+}b_{\mathbf{3}-}b_{\mathbf{4}+}\right) && (7.9e)
\end{aligned}
$$

Der Operator der Mode ohne Anregungslücke $\Delta b_{\boldsymbol{k}-}$ wurde zu $b_{\boldsymbol{k}-}$ umbenannt und die übliche Abkürzung $\mathbf{1} = \boldsymbol{k}_1$ eingeführt. Die Vertexfunktion bei verschwindenden Impulsen im quadratischen und quartischen Hamiltonian hat den Wert[40]

$$\tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0000}} = 1/2 - 2(K-1)S = 1 + \mathcal{O}(1/S) \tag{7.10}$$

und die anderen Funktionen sind durch

$$
\begin{aligned}
f_{\boldsymbol{k}\sigma} &= \tilde{J}_0S(1+\sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) - \mu_0 + 2\tilde{J}_0a^D\tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0000}}(1-\sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}})\left|b_0\right|^2 && (7.11a)\\
g_{\boldsymbol{k}\sigma} &= 2\tilde{J}_0a^D\left[\frac{-\sigma}{2}\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} - (K-1)S(1-\sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}})\right]b_0^2 && (7.11b)\\
i_{123} &= b_0^*\left(\tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0123}} + \tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{1023}}\right) && (7.11c)\\
j_{123} &= b_0^*\left(\tilde{\Gamma}^{2-2+}_{\mathbf{0123}} + \tilde{\Gamma}^{2-2+}_{\mathbf{1023}}\right) && (7.11d)\\
k_{123} &= b_0^*\tilde{\Gamma}^{-+-+}_{\mathbf{0123}} && (7.11e)\\
\tilde{\Gamma}^{2\sigma 2\sigma'}_{\mathbf{1234}} &= \frac{\sigma\sigma'}{4}\left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1-3}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2-4}}\right) + \frac{1}{2}(K-1)S\left(\sigma(\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}}) + \sigma'(\tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{4}})\right) && (7.11f)\\
\tilde{\Gamma}^{-+-+}_{\mathbf{1234}} &= \frac{1}{2}\left(\tilde{\gamma}_{\mathbf{2-4}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{2-3}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{1-4}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{1-4}}\right) + 2(K-1)S\left(-\tilde{\gamma}_{\mathbf{1}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{2}} - \tilde{\gamma}_{\mathbf{3}} + \tilde{\gamma}_{\mathbf{4}}\right) && (7.11g)
\end{aligned}
$$

gegeben sind. Der quadratische Anteil (7.9c) kann wieder mittels Bogoliubov-Tranformation diagonalisiert werden, indem neue Operatoren $\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}$ durch

$$
\begin{aligned}
b_{\boldsymbol{k}\sigma} &= u_{\boldsymbol{k}\sigma}\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma} + v_{\boldsymbol{k}\sigma}\alpha^\dagger_{-\boldsymbol{k}\sigma} && (7.12a)\\
b^\dagger_{-\boldsymbol{k}\sigma} &= v_{\boldsymbol{k}\sigma}\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma} + u_{\boldsymbol{k}\sigma}\alpha^\dagger_{-\boldsymbol{k}\sigma} && (7.12b)
\end{aligned}
$$

eingeführt werden (vgl. Appendix C). Die Bogoliubov-Koeffizienten sind durch die Gleichungen

$$
\begin{aligned}
u^2_{\boldsymbol{k}\sigma} &= 1 + v^2_{\boldsymbol{k}\sigma} = \frac{1}{2}\left(\frac{f_{\boldsymbol{k}\sigma}}{E_{\boldsymbol{k}\sigma}} + 1\right) && (7.13)\\
u_{\boldsymbol{k}\sigma}v_{\boldsymbol{k}\sigma} &= -\frac{g_{\boldsymbol{k}\sigma}}{2E_{\boldsymbol{k}\sigma}} && (7.14)
\end{aligned}
$$

[39] Die Terme der Wechselwirkung (7.5c) wurden vernachlässigt, da sie dritter Ordnung in der Bosonendichte ist; sie können aber später in einer Mean-Field Behandlung noch berücksichtigt werden.

[40] Die führende 1 in der $1/S$ Entwicklung reproduziert wieder den entsprechenden Ausdruck (6.7).

definiert [111]. Dann hat unser Hamiltonian die Form

$$H_2 = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} E_{\boldsymbol{k}\sigma}(\alpha^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}) + E_0 \tag{7.15}$$

mit der Dispersion

$$\boxed{E_{\boldsymbol{k}\sigma} = \sqrt{f^2_{\boldsymbol{k}\sigma} - |g_{\boldsymbol{k}\sigma}|^2}} \tag{7.16}$$

(siehe Abbildung 33) und der zusätzlichen Nullpunktsenergie

$$E_0 = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}(E_{\boldsymbol{k}\sigma} - f_{\boldsymbol{k}\sigma}). \tag{7.17}$$

Das chemische Potential

$$\boxed{\mu_0 = 2\,|b_0|^2\,\tilde{J}_0 a^D \tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0000}},} \tag{7.18}$$

das sich aus der Bedingung $H_1 = 0$ ergibt, enthält bereits Terme der $1/S$ Entwicklung, da das Vorgehen keine konsequente Spinwellenentwicklung, sondern eine konsistente Entwicklung in der Bosonendichte ist. Das lineare Spektrum der Mode mit $\sigma = -1$ wird nicht angetastet

$$E_{\boldsymbol{k}-} = c_0\,|\boldsymbol{k}| + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^3). \tag{7.19}$$

Jedoch ändert sich bereits die Spinwellengeschwindigkeit

$$\boxed{c_0 = 2aJ\sqrt{2a^D|b_0|^2 D\tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0000}}}\sqrt{(S + a^D\,|b_0|^2\,(2\tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0000}} + 1 - 2(K-1)S)},} \tag{7.20}$$

da sie auch Korrekturen in $1/S$ durch die Normalordnung enthält. Benutzt man die Entwicklung (7.10), so erhält man wieder das bekannte Ergebnis (6.28a) aus [24] für kleine Neigungswinkel θ

$$c_0 = 2Ja\sqrt{D}\theta S(1 + \mathcal{O}(\theta^2) + \mathcal{O}(1/S)). \tag{7.21}$$

7.1.2 Korrekturen durch Mean-Field Ansatz

Für eine störungstheoretische Behandlung unseres wechselwirkenden Vielteilchensystems bietet sich eine Mean-Field-Näherung an: Hierbei wird die Wechselwirkung zwischen den Quasiteilchen (Magnonen) dadurch repräsentiert, dass man den Mittelwert der Teilchendichte bzw. die entsprechenden Erwartungswerte der Erzeuger-Vernichter-Kombinationen berechnet und diesen mit den Quasiteilchen wechselwirken lässt. Dies ist um so besser, je größer die Dimensionalität ist, da in diesem Fall einzelne Quantenfluktuationen weniger Einfluss haben. Im wesentlichen werden beim Mean-Field Ansatz die Operatoren durch ihre Mittelwerte und die Fluktuationen um den Mittelwert ersetzt und anschließend Fluktuationen höherer Ordnung (hier ab 3. Ordnung) weggelassen.

Mean-Field Erwartungswerte Zur Durchführung der eben erläuterten Rechnung benötigt man zunächst die Erwartungswerte

$$n = \frac{1}{N}\sum_i \left\langle b^\dagger_i b_i\right\rangle = \left\langle b^\dagger_i b_i\right\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\left\langle b^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} b_{\boldsymbol{k}\sigma}\right\rangle \tag{7.22a}$$

$$\delta = \frac{1}{N}\sum_i \langle b_i b_i\rangle = \langle b_i b_i\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\langle b_{\boldsymbol{k}\sigma} b_{-\boldsymbol{k}\sigma}\rangle \tag{7.22b}$$

$$m = \frac{1}{2DN}\sum_{<ij>}\left\langle b^\dagger_i b_j\right\rangle = \left\langle b^\dagger_i b_j\right\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}\left\langle b^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} b_{\boldsymbol{k}\sigma}\right\rangle \tag{7.22c}$$

$$\Delta = \frac{1}{2DN}\sum_{<ij>}\langle b_i b_j\rangle = \langle b_i b_j\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}\,\langle b_{\boldsymbol{k}\sigma} b_{-\boldsymbol{k}\sigma}\rangle\,, \tag{7.22d}$$

die unter Berücksichtigung der Translationsinvarianz analog zu [111] im Ortsraum berechnet werden. Die $T = 0$ Werte der Funktionen werden mittels der Transformation (7.8) für die Felder mit endlichem Erwartungswert im Grundzustand ($k = 0$ –Mode) sowie der Bogoliubov-Transformation (7.12a) und die elementaren Erwartungswerte

$$\left\langle \alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}\alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma} \right\rangle = \left\langle \beta_{-\boldsymbol{k}\sigma}\beta^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\sigma} \right\rangle = 1 \tag{7.23a}$$

$$\left\langle \alpha^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma}\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma} \right\rangle = \left\langle \beta^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\sigma}\beta_{-\boldsymbol{k}\sigma} \right\rangle = 0 \tag{7.23b}$$

bestimmt und ergeben

$$n = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} v^2_{\boldsymbol{k}\sigma} + a^D \left|b_0\right|^2 \tag{7.24a}$$

$$\delta = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} u_{\boldsymbol{k}\sigma}v_{\boldsymbol{k}\sigma} + a^D b_0^2 \tag{7.24b}$$

$$m = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} v^2_{\boldsymbol{k}\sigma} - a^D \left|b_0\right|^2 \tag{7.24c}$$

$$\Delta = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}\sigma}v_{\boldsymbol{k}\sigma} - a^D b_0^2. \tag{7.24d}$$

Zwei dieser Funktionen sind prinzipiell komplexwertig und erfüllen die Identitäten $\delta^* = \left\langle b^{\dagger}_i b^{\dagger}_i \right\rangle$ und $\Delta^* = \left\langle b^{\dagger}_i b^{\dagger}_j \right\rangle$. Wir werden diese später passend zur Wahl der Richtung der Symmetriebrechung reell wählen.

Mean-Field Näherung Gemäß der Mean-Field Näherung (vgl. Abschnitt (5.4)) ersetzen wir nun alle Wechselwirkungsterme der Entwicklung (7.4) im Ortsraum durch quadratische Terme, indem wir die oben hergeleiteten Mean-Field Korrelationsfunktionen (7.22) benutzen. So werden alle quartischen Terme durch jeweils 6 quadratische Terme ersetzt, zum Beispiel

$$b^{\dagger}_i b^{\dagger}_j b_j b_j \to \Delta^* b_j b_j + \delta b^{\dagger}_i b^{\dagger}_j + 2m b^{\dagger}_j b_j + 2n b^{\dagger}_j b_j. \tag{7.25}$$

Auf diese Weise ergibt sich aus $H_4^{\parallel}$ und $H_4^{\perp}$ eine Mean-Field Korrektur der Wechselwirkungen der Form

$$H_4^{MF} = \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}(A b^{\dagger}_i b_i + B b^{\dagger}_i b_j + C b^{\dagger}_i b^{\dagger}_j + D b^{\dagger}_i b^{\dagger}_i + h.c.) \tag{7.26}$$

mit den Abkürzungen

$$A = 4m(K-1)S + n \tag{7.27a}$$

$$B = 4n(K-1)S + m \tag{7.27b}$$

$$C = 2\delta(K-1)S + \Delta \tag{7.27c}$$

$$D = 2\Delta(K-1)S. \tag{7.27d}$$

Vergleicht man den entstehenden Hamiltonian mit dem der linearen Spinwellentheorie, so fallen zusätzliche Terme des H_4^{MF} auf, die nicht im bekannten quadratischen Anteil (7.7) auftreten. Trotzdem ist der gesamte Hamiltonian im Impulsraum mittels Bogoliubov-Transformation diagonalisierbar. Führen wir die Fourier-Transformation (4.56) aus, so ergibt sich mit der Mean-Field Korrektur

$$H_4^{MF} = \frac{1}{2}\tilde{J}_0 \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \left\{ (A + \sigma B\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) b^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma} b_{\boldsymbol{k}\sigma} + (\sigma C\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} + D) b^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma} b^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\sigma} + h.c. \right\}. \tag{7.28}$$

In Matrixschreibweise ergibt sich wieder

$$H_2^{MF} = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \left(b^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma}, b_{-\boldsymbol{k}\sigma} \right) \begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}\sigma} & \alpha^*_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ \alpha_{\boldsymbol{k}\sigma} & \tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ b^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\sigma} \end{pmatrix} + \tilde{E}_0 \tag{7.29}$$

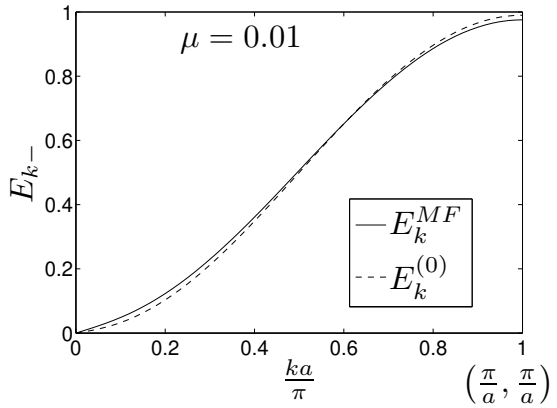

Abbildung 33: Vergleich der Energiedispersion des QAF im Magnetfeld (Goldstone-Mode) ohne Mean-Field-Korrekturen (durchgehende Kurve) mit derjenigen mit Mean-Field-Korrekturen (gestrichelte Kurve) für festes chemisches Potential und festen Gesamtspin $S = 1/2$. Der lineare Bereich nahe $\boldsymbol{k} = 0$ wird flacher (kleinere Spinwellengeschwindigkeit); für große Wellenvektoren ist der Einfluss der Wechselwirkungen auf die Magnonendisperion klein.

mit den Abkürzungen

$$\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}\sigma} = \tilde{J}_0(A + \sigma B\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) + \tilde{J}_0 S(1 + \sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) - \mu_0 \tag{7.30a}$$

$$\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma} = \tilde{J}_0(\sigma C\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} + D) \tag{7.30b}$$

und einem Beitrag zur Grundzustandsenergie[41]

$$\tilde{E}_0 = -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}\sigma}. \tag{7.31}$$

Energie-Dispersion Benutzt man die Bogoliubov-Transformation für Bosonen

$$\begin{pmatrix} b_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ b^\dagger_{-\boldsymbol{k}\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{u}_{\boldsymbol{k}\sigma} & \tilde{v}_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ \tilde{v}_{\boldsymbol{k}\sigma} & \tilde{u}_{\boldsymbol{k}\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\sigma} \end{pmatrix}, \tag{7.32}$$

so wird der Hamilton-Operator wieder diagonal

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \tilde{E}_{\boldsymbol{k}\sigma}(c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + \frac{1}{2}) + \tilde{E}_0 \tag{7.33}$$

und man erhält die Magnonendispersion

$$\boxed{\tilde{E}_{\boldsymbol{k}\sigma} = \sqrt{\tilde{\epsilon}^2_{\boldsymbol{k}\sigma} - |\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}|^2}.} \tag{7.34}$$

Die Bogoliubov-Koeffizienten sind gemäß Appendix C durch $\tilde{u}_{\boldsymbol{k}\sigma} = \sqrt{\frac{\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}\sigma} + \tilde{E}_{\boldsymbol{k}\sigma}}{2\tilde{E}_{\boldsymbol{k}\sigma}}}$ und $\tilde{v}_{\boldsymbol{k}\sigma} = -\frac{\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}}{|\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma}|}\sqrt{\frac{\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}\sigma} - \tilde{E}_{\boldsymbol{k}\sigma}}{2\tilde{E}_{\boldsymbol{k}\sigma}}}$ gegeben.

Spinwellengeschwindigkeit Die neue Dispersionsrelation muss gemäß dem Goldstone-Theorem weiterhin gapless und linear sein

$$\tilde{E}_{\boldsymbol{k}-} = |\boldsymbol{k}|\, c + \alpha\, |\boldsymbol{k}|^3 + \mathcal{O}(|\boldsymbol{k}|^5), \tag{7.35}$$

so dass wir die renormierte Spinwellengeschwindigkeit c als Ableitung

$$\begin{aligned} c &= \sqrt{\frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 \tilde{E}^2_{\boldsymbol{k}-}}{\partial \boldsymbol{k}^2}\right|_{\boldsymbol{k}=0}} = \frac{\tilde{J}_0 a}{\sqrt{D}}\sqrt{(B+S)(A - B - \frac{\mu}{\tilde{J}_0}) - (D-C)C} \\ &= \frac{\tilde{J}_0 a}{\sqrt{D}}\sqrt{(C-D)(C-B-S)} \end{aligned} \tag{7.36}$$

[41] Es gibt allerdings noch weitere Terme zur Grundzustandsenergie in dieser Ordnung der Bosonendichte. Man berücksichtige weiterhin, dass die Spinwellentheorie keine variationelle Methode ist und somit die in Spinwellentheorie berechnete Grundzustandsenergie durchaus niedriger sein kann als die exakte Grundzustandsenergie.

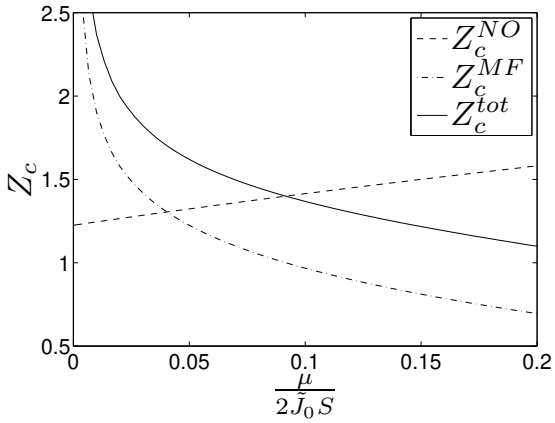

Abbildung 34: Der Renormierungsfaktor der Spinwellengeschwindigkeit Z_c^{ges} setzt sich aus den Korrekturen zur Spinwellengeschwindigkeit in [24] durch Normalordnung Z_c^{NO} und den Korrekturen durch Wechselwirkungen in Mean-Field-Näherung Z_c^{MF} zusammen (hier für $S = 1/2$).

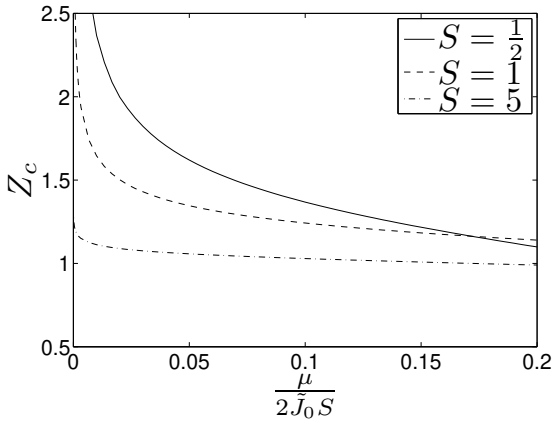

Abbildung 35: Renormierungsfaktoren der Spinwellengeschwindigkeit zu verschiedenem Gesamtspin S für kleine chemische Potentiale.

berechnen können. Der in (6.57b) eingeführte Renormierungsfaktor ergibt sich dann einfach durch Division $Z_c = c/c_0$.[42] Im letzten Ausdruck wurde das Ergebnis (7.40) für das chemische Potential benutzt.

Quasiteilchenzerfall Wie bereits in Abschnitt 6.9.1 diskutiert, ist bei negativem kubischem Koeffizient α aus (7.35) der spontane Quasiteilchenzerfall nicht verboten. Für kleine Magnetfelder bleibt der Koeffizient in konventioneller Spinwellenentwicklung auch bei Vorhandensein von Wechselwirkungen kleiner als Null [47, 43, 77, 41]. Dagegen liegt an der Stelle des kritischen Feldes h_c die ferromagnetische Dispersion (2.29) vor. Daher muss α gerade an einem Crossover-Feld h^* sein Vorzeichen wechseln. In Magnetfeldern $h > h^*$ sind dann die Magnonen instabil, so dass die konventionelle Spinwellentheorie zusammenbricht. Gerade dieser Zusammenhang steht im engen Zusammenhang mit den in [23] hergeleiteten anomalen Fluktuationen der longitudinalen Korrelationsfunktion. In der Dichteentwicklung lässt sich der kubische Koeffizient mittels Entwicklung der Dispersionsrelation zu

$$\alpha = \frac{\tilde{J}_0 a^3}{\sqrt{D}} \frac{(B - C + S)[6B + 9C - 3D + 6S + (C - D)\cos(4\phi)]}{96\sqrt{(D - C)(B - C + S)}} \tag{7.37}$$

[42] Wegen der Abweichungen zwischen reiner Spinwellengeschwindigkeit (6.28a) und der Spinwellengeschwindigkeit in 1. Ordnung Bosonendichte, gehen wir hier zunächst von (7.20) als ungestörte Spinwellengeschwindigkeit aus und betrachten Z_c als Renormierungsfaktor durch Mean-Field Korrekturen.

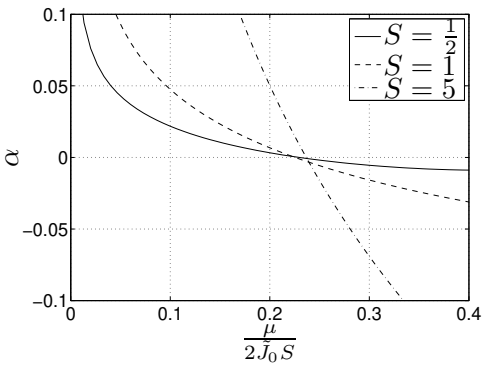

Abbildung 36: Darstellung des Koeffizienten (7.37) zur Abschätzung der Stabilität der antiferromagnetischen Magnonen im starken Magnetfeld. Für große Gesamtspins wird der Koeffizient gemäß $\alpha \sim S^{3/2}$ größer.

bestimmen.[43] Da $C > D$ wird α für $k_x = k_y$ zuerst negativ wie auch in [41] bereits durch numerische Lösung der Dyson-Gleichung berechnet. Gemäß Abbildung 36 wechselt α für diesen Fall sein Vorzeichen unabhängig vom Gesamtspin etwa an der Stelle $\mu = 0.23 \cdot 2\tilde{J}_0 S$, was einem Crossover-Feld $h^* \approx 0.77 h_c$ entspricht und somit der Wert $h^* = 2/\sqrt{7} h_c$ aus [41] reproduziert wird.

Chemisches Potential Aus der Bedingung $E_{\boldsymbol{k}-}|_{\boldsymbol{k}=0} = 0$ gemäß Goldstone-Theorem ergibt sich eine quadratische Gleichung für das chemische Potential

$$\tilde{\epsilon}^2_{\boldsymbol{k}-}\big|_{\boldsymbol{k}=0} = |\alpha_{\boldsymbol{k}-}|^2\big|_{\boldsymbol{k}=0} \tag{7.38}$$

mit den 2 Lösungen

$$\mu_1 = \tilde{J}_0(A - B - D + C) \tag{7.39a}$$
$$\mu_2 = \tilde{J}_0(A - B - C + D). \tag{7.39b}$$

Die physikalische Lösung ergibt sich einerseits aus dem Grenzwert ohne Mean-Field Korrekturen und andererseits aus der Bedingung eine physikalischen Dispersion mit einer reellen Spinwellengeschwindigkeit $0 < c^2 = \tilde{J}_0^2 a^2 / D[\mp(B+S)(C-D) + (D-C)C]$ (oberes Zeichen für μ_1, unteres Zeichen für μ_2). Durch Anwendung der Bedingung oder Vergleich mit (7.18) ist die richtige Lösung

$$\boxed{\mu = \mu_1 = \tilde{J}_0(A - B - D + C).} \tag{7.40}$$

Das Ausnutzen der Bedingung $\tilde{E}_{\boldsymbol{k}-} = 0$ zur Berechnung von μ macht die Transformation der Wechselwirkungsterme in den Impulsraum sowie der expliziten Berechnung der Terme mit Symmetriebrechung überflüssig und somit die Berücksichtigung von H_6 möglich. Die Bedingung $H_1 = 0$ ergibt das gleiche Ergebnis, wenn man die Renormierung durch H_3 mittels Mean-Field Korrekturen explizit berechnet:

$$\frac{\mu}{\tilde{J}_0} = a^D |b_0|^2 2\tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0000}} + \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\big[(1 - \sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) v^2_{\boldsymbol{k}\sigma} 2\tilde{\Gamma}^{4-}_{\mathbf{0000}} \tag{7.41}$$
$$-2(K-1)S u_{\boldsymbol{k}\sigma} v_{\boldsymbol{k}\sigma} - \sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}\sigma} v_{\boldsymbol{k}\sigma}(1 - 2(K-1)S)\big]. \tag{7.42}$$

Damit führt die Berücksichtigung von Diagrammen wie in Abbildung 37 ebenfalls zur Bedingung (7.40).

Untergittermagnetisierung Mittels der Definition der Untergittermagnetisierung senkrecht zum Magnetischen Feld [24] (vgl. (2.33))

$$M_s = \sum_i \langle \zeta_i S_i^y \rangle \tag{7.43}$$

[43] Der Winkel ϕ ist durch die Parametrisierung des Impulses $k_x = k \sin\phi\ ,\ k_y = k\cos\phi$ in Polarkoordinaten definiert (hier in $D = 2$).

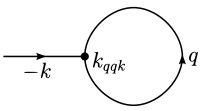

Abbildung 37: Durch die Renormierung des chemischen Potentials mittels Einschleifendiagrammen dieser Art (Die Wechselwirkung ist in (7.11) gegeben) wird die Korrektur von (7.9d) in Mean-Field-Näherung berücksichtigt, so dass die Energiedispersion gemäß des Goldstone-Theorems für $\boldsymbol{k} \to 0$ verschwindet.

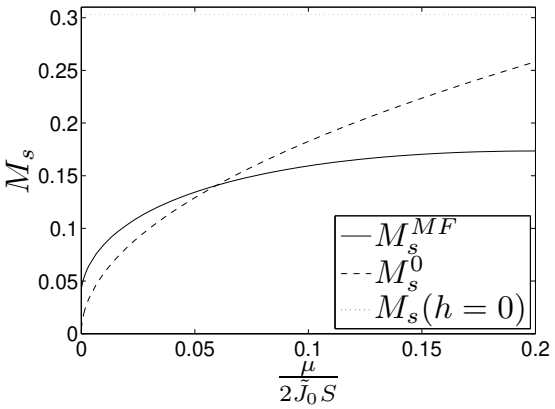

Abbildung 38: Vergleich der Untergittermagnetisierung für $S = 1/2$ ohne Wechselwirkungen M_s^0 und den aus der Mean-Field-Näherung gemäß (7.46). Beide Näherungen sind nur für kleine chemische Potentiale korrekt, da für $\mu = 2\tilde{J}_0 S$ der Wert aus [6] erreicht werden sollte (gepunktete Linie).

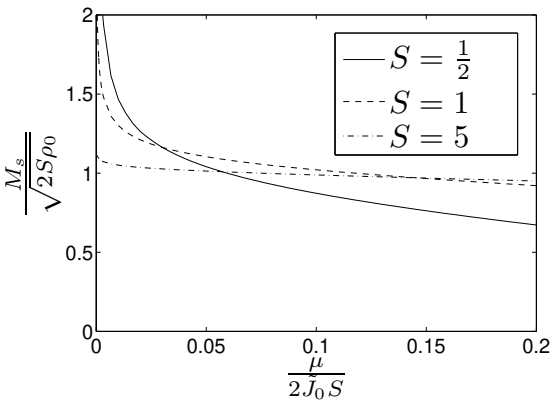

Abbildung 39: Änderung der Untergittermagnetisierung durch Korrekturen der Normalordnung sowie Einfluss der Wechselwirkung in Mean-Field-Näherung.

und der Darstellung des Spinoperators S_i^y mittels einer Holstein-Primakoff-Transformation (A.8)

$$S_i^y = \frac{1}{2i}\sqrt{2S}\left[b_i^\dagger - b_i + (K-1)(b_i^\dagger b_i^\dagger b_i - b_i^\dagger b_i b_i)\right] + \mathcal{O}(b^5) \tag{7.44}$$

können wir die Mean-Field Korrekturen zu (6.27) berechnen. Dazu wird wie in (7.25) die Ersetzung

$$b_i^\dagger b_i^\dagger b_i \to b_i \delta^* + 2n b_i^\dagger, \tag{7.45}$$

sowie analoges für den hermitesch konjugierten Term gemacht. Dann ergibt sich schließlich[44]

$$\boxed{M_s = \sqrt{2SNa^D}\,[1 + (K-1)(-\delta + 2n)]\,b_0.} \tag{7.46}$$

Wie bei den anderen Größen auch, enthält M_s aufgrund der Entwicklung in Bosonendichte Terme höherer Ordnungen in $1/S$.

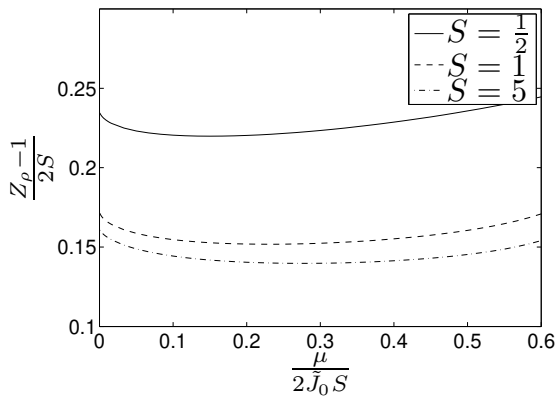

Abbildung 40: Die Renormierungsfaktoren der Dichte Z_ρ ändern sich kaum mit dem chemischen Potential; zur besseren Veranschaulichung wird die Größe $(Z_\rho - 1)/2S$, also der formale Koeffizient in 1. Ordnung Spinwellenentwicklung gezeigt.

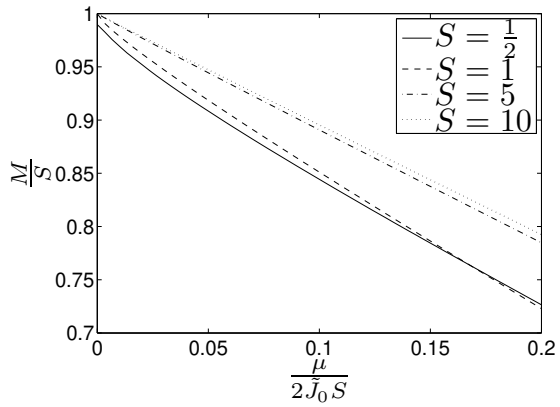

Abbildung 41: Auf die Sättigungsmagnetisierung normierte ferromagnetische Magnetisierung des QAF in starkem Magnetfeld für verschiedene Gesamtspins.

Dichte Die gesamte Bosonendichte ist durch

$$\boxed{\rho = \frac{1}{N}\sum_i \left\langle b_i^\dagger b_i \right\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}} \left\langle b_{\boldsymbol{k}}^\dagger b_{\boldsymbol{k}} \right\rangle = n} \tag{7.47}$$

gegeben, so dass der Renormierungsfaktor (6.57a) durch

$$Z_\rho = \frac{\rho}{\rho_0} = \frac{n}{|b_0|^2} \tag{7.48}$$

mit den Mean-Field Konstanten verknüpft ist.

Ferromagnetische Magnetisierung Aus Symmetriegründen ist nur die z-Komponente der ferromagnetischen Magnetisierung ungleich Null. Mit (3.8a) ergibt sich so die Rechenvorschrift

$$\boxed{M = \frac{1}{N}\sum_i \langle S_i^z \rangle = \frac{1}{N}\sum_i \left(S - \left\langle b_i^\dagger b_i \right\rangle\right) = S - n,} \tag{7.49}$$

die man auch mittels (2.31) aus der freien Energie berechnen kann, die sich für $T = 0$ trivial aus der Grundzustandsenergie ergibt.

[44] Bei der Wahl einer anderen Richtung der Symmetriebrechung im Ortsraum muss natürlich die Phase des Erwartungswerts b_0 angepasst werden.

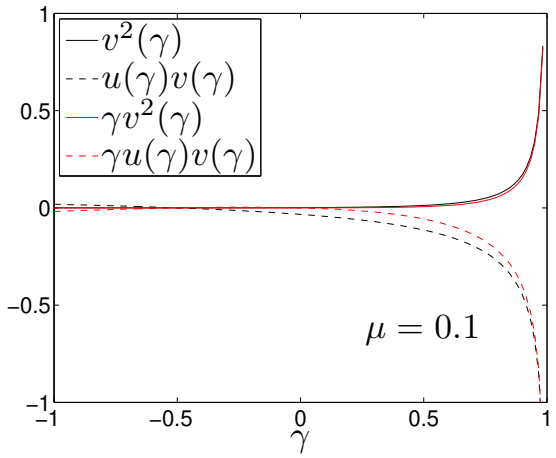

Abbildung 42: Integranden der Integrale (7.52) nach Zurückführung auf eindimensionale Integrale gemäß Appendix E

7.1.3 Numerische Auswertung

Zur Berechnung der Ausdrücke in (7.24) müssen wir den thermodynamischen Grenzwert ausführen $\frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} \to \int \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D}$ und die entsprechenden Integrale über die 1. Brillouin-Zone berechnen. Da das Hauptergebnis dieser Arbeit (6.96), welches anomale Eigenschaften der Bose-Einstein-Kondensation zeigt, am besten in zweidimensionalen Systemen nachmessbar ist [24] (siehe Abschnitt 6.9.2), beschränken wir uns hier auf den Fall $D = 2$.[45] Die zweidimensionalen Integrale über die reduzierte (antiferromagnetische) Brillouin-Zone (siehe Abbildung 11) hängen für das Quadratgitter nur vom Strukturfaktor

$$\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2}[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \tag{7.50}$$

ab. Mit der Eigenschaft (siehe (2.75))

$$\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} = -\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{Q}} \tag{7.51}$$

können wir die Summation über σ durch die Auswertung der Integrale in der vollen Brillouin-Zone berücksichtigen (siehe Abbildung 46) und erhalten

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} v^2_{\boldsymbol{k}\sigma} = a^D \int_k v^2_{\boldsymbol{k}-} \tag{7.52a}$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} u_{\boldsymbol{k}\sigma} v_{\boldsymbol{k}\sigma} = a^D \int_k u_{\boldsymbol{k}-} v_{\boldsymbol{k}-} \tag{7.52b}$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} v^2_{\boldsymbol{k}\sigma} = -a^D \int_k \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} v^2_{\boldsymbol{k}-} \tag{7.52c}$$

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \sigma\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}\sigma} v_{\boldsymbol{k}\sigma} = -a^D \int_k \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}-} v_{\boldsymbol{k}-} \tag{7.52d}$$

mit der Abkürzung $\int_k = \int \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D}$.

Einfaches Aufintegrieren Da die Bogoliubov-Koeffizienten der $\sigma = -$ Mode an der Stelle $\boldsymbol{k} = 0$ wegen der verschwindenden Dispersion E_{0-} divergieren, sind alle Integranden in (7.52) divergent. Da die Dispersion linear ist (7.19), folgt für kleine Wellenvektoren $u^2_{\boldsymbol{k}-} \sim 1/|k|$ and $v^2_{\boldsymbol{k}-} \sim 1/|k|$. In $D = 2$ ist

[45] In den letzten Jahren hat das Interesse an zweidimensionalen QAF wegen der nunmehr experimentellen Realisierung stark zugenommen [56].

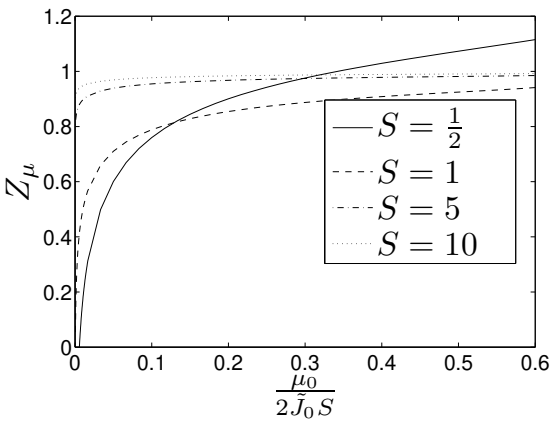

Abbildung 43: Plot des Renormierungsfaktors des chemischen Potentials, welches das chemische Potential des Systems ohne Wechselwirkungen mit dem chemischen Potential in Mean-Field-Näherung verbindet: $Z_\mu = \frac{\mu}{\mu_0}$. Gezeigt sind die Kurven zu verschiedenem Gesamtspin in 1. Ordnung Störungstheorie in der Bosonendichte, die jedoch alle Ordnungen in $1/S$ enthalten.

das Integrationsmaß in Polarkoordinaten gerade $k\ dk\ d\phi$, so dass die Divergenz für kleine $\boldsymbol{k}$ verschwindet. Im gesamten Integrationsgebiet treten keine weiteren Divergenzen auf, so dass die Integrale (7.52) existieren.[46] Wegen der C_4 Rotationssymmetrie, müssen wir nur einen Quadranten berechnen:

$$\int_{\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{k}) \approx \frac{1}{(\pi-\epsilon)^2} \int_{-\epsilon}^{\frac{\pi}{a}} d\ k_x \int_{-\epsilon}^{\frac{\pi}{a}} d\ k_y f(\boldsymbol{k}). \tag{7.53}$$

ϵ ist ein kleiner Parameter, der den Integranden über die ganze Fläche endlich hält; mit dem Vorfaktor korrigieren wir die kleinere Integrationsfläche unter der Annahme eines Beitrages, der dem Mittelwert des Integrals entspricht. Zum Vergleich der Ergebnisse können wir auch eine Integration in Polarkoordinaten auf einem Kreis um $\boldsymbol{k} = 0$ mittels

$$\int_{\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^r k\ dk \int_0^{2\pi} d\phi f(\boldsymbol{k}) + \int_{\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{k}) \Theta(|k| - r) \qquad r < \pi. \tag{7.54}$$

durchführen, was zu ähnlichen Ergebnissen (mit einer Abweichung um 0.1%) führt. Dieses Vorgehen ist für alle Dimensionen $D > 1$ möglich, wohl aber für $D = 3$ aufwendiger.

Auswertung unter Verwendung der Zustandsdichte in $D = 2$ In zwei Dimensionen können wir die Integrale wie in Appendix E beschrieben auf eindimensionale Integrale zurückführen, was wir mit der Einführung elliptischer Integrale erkaufen. Die Berechnung der Integrale (7.52) ergibt keine anderen Werte wie die obigen Methoden, ist aber deutlich schneller, so dass wir alle Berechnungen darauf aufbauen.[47]

7.1.4 Berechnung bei konstanter Dichte

Sind die Integrale für festen Spin S berechnet, so wird die vorgegebene Dichte mittels (7.40) zu einem chemischen Potential zugeordnet.[48] Der Vergleich mit dem chemischen Potential ohne Wechselwirkung (7.18) ergibt dann den Renormierungsfaktor der chemischen Potentials

$$Z_\mu = \frac{\mu}{\mu_0}, \tag{7.55}$$

der jedoch physikalisch nur das echte chemische Potential $\mu = h - h_c$ mit demjenigen ohne Wechselwirkung verknüpft. Für Vergleiche mit dem Experiment müssen die entsprechenden Größen gegen das chemische Potential aufgetragen werden. Eigentlich ist das chemische Potential durch die Wahl des Magnetfeldes

[46] Auch in $D = 3$ existieren alle Integrale nach gleichem Argument.

[47] Die Zurückführung der Integrationen auf eindimensionale Integrale ist in beliebigen Dimensionen möglich, aber in $D > 2$ ist die entsprechende Zustandsdichte analytisch unbekannt.

[48] Diese rechnerische Prozedur kann als Mean-Field-Berechnung bei festem Ordnungsparameter [97], welcher hier die Dichte des Kondensats von Magnonen ρ_0 ist, angesehen werden.

vorgegeben und die Bosonendichte ändert sich bei Berücksichtigung der Wechselwirkung. Jedoch ist die Berechnung der Änderung des Bosonendichte durch Wechselwirkungen nicht direkt möglich. In jedem Fall gibt es aber eine eindeutige Zuordnung zwischen dem chemischen Potential und der Bosonendichte sowohl ohne Wechselwirkung (7.18) als auch mit Wechselwirkung (diese kann aber nicht einfach invertiert werden). Ein großer Wert von Z_μ drückt eine starke Renormierung der Dichte des Kondensats aus. Anschließend werden alle weiteren Größen in Abhängigkeit des physikalischen chemischen Potentials berechnet, indem diese erst als Funktion des wechselwirkungsfreien chemischen Potentials ermittelt werden und dann die funktionelle Abhängigkeit mittels (7.55) auf das korrekte chemische Potential abgebildet wird.

7.2 Interpretation der Ergebnisse

Renormierung der Spinwellengeschwindigkeit Wie man anhand von Abbildung 33 sieht, ändert sich die Magnonendispersion (7.34) durch die Wechselwirkungen in Mean-Field-Näherung quantitativ nur wenig. Gezeigt ist die Dispersion der Mode ohne Anregungslücke $E_{\boldsymbol{k}-}$, die sich außerhalb der antiferromagnetischen Brillouin-Zone zu $E_{\boldsymbol{k}+}$ fortsetzt für kleines chemisches Potential und Gesamtspin $S = 1/2$. Für größeres chemisches Potential fällt die Renormierung noch kleiner aus, ebenso wie für $S \to \infty$ die Korrekturen verschwinden. Dennoch beeinflussen die Korrekturen für kleine Wellenvektoren die Eigenschaften des Systems bei tiefen Temperaturen. Anhand des Verhaltens für kleine $\boldsymbol{k}$ lässt sich eine renormierte Spinwellengeschwindigkeit und ein Renormierungsfaktor nach (6.57b) definieren. Wie oben bereits angedeutet, lassen sich insbesondere für die Spinwellenrenormierung zwei verschiedene Spinwellengeschwindigkeiten ohne Wechselwirkungen zugrunde legen. Daher entstehen Renormierungen aufgrund von 2 Effekten:

1. Normalordnung
   Aufgrund des Normalordnungsprozesses ergibt sich eine Spinwellenrenormierung, die gerade das Verhältnis zwischem dem Wert (7.20) und dem Wert in [24] (6.28a) ist.

2. Mean-Field Korrekturen
   Zusätzlich ergibt sich eine Renormierung aufgrund der Mean-Field Korrekturen, die gerade das Verhältnis zwischen (7.20) und (7.36) ist.

Abbildung 35 zeigt die verschiedenen Renormierungsarten der Spinwellengeschwindigkeit: Während der Einfluss der Normalordnung bereits Korrekturen in der Bosonendichte mit sich bringt, die Z_c^{NO} mit steigendem chemischen Potential ansteigen lässt, ist der Einfluss der Wechselwirkungen bei kleinen Dichten singulär[49] und wird für größere Dichten kleiner, so dass sich insgesamt eine größere Spinwellengeschwindigkeit ergibt ($Z_c^{\mathrm{tot}} > 1$). Man beachte ebenso, dass die Renormierungsfaktoren im klassischen Grenzwert $S \to \infty$ zu 1 werden, wie man es auch von einer strikten $1/S$-Entwicklung erwartet.

Untergittermagnetisierung Die Mean-Field-Korrekturen zur Untergittermagnetisierung fallen für kleine Dichten groß aus (vgl. Abbildung 39). Die Vergrößerung von M_s bei kleinen Dichten spiegelt die Renormierung der Dichte des Kondensats selbst wieder. Für große chemische Potentiale, also für kleine Magnetfelder h sollten die Werte der Untergittermagnetisierung z.B. aus [6, 89] erreicht werden, d.h. die Wurzelfunktion (siehe Abbildung 38) sollte nach unten renormiert werden und so für $\mu = 2\tilde{J}_0 S$ den Wert ohne Magnetfeld (gepunktete Linie in Abbildung 39) erreichen, wobei gemäß der Analyse in [97] ein Maximum durchlaufen wird. In der Tat ist der Renormierungsfaktor für $\mu/(2\tilde{J}_0 S) > 0.06$ kleiner als 1, jedoch nimmt die Untergittermagnetisierung in Mean-Field-Näherung zu unphysikalischen Werten hin ab, so dass alle Ergebnisse nur für chemische Potentiale $\mu = 0.2 \cdot 2\tilde{J}_0 S$ korrekt sind. Das ebenfalls in [97] gefundene Verhalten nahe dem kritischen Feld wird quantitativ reproduziert, wobei in der genannten Arbeit der spontane Magnonenzerfall und deren Einfluss auf die Untergittermagnetisierung nicht weiter untersucht wurde. Mit unserem Ansatz der Entwicklung in der Bosonendichte, die eine streng monotone Funktion des chemischen Potentials ist, erwarten wir ohnehin die besten Ergebnisse für kleine Dichten.

[49] Das Verhalten für $\mu \to 0$ lässt sich mit den Mitteln aus Abschnitt 7.1.3 nicht bestimmen.

Dichte / Ferromagnetische Magnetisierung Da sowohl die Dichterenormierung (7.48) als auch die Magnetisierung (7.49) nur von der Mean-Field-Funktion n abhängen, gibt es nur kleine Effekte. Die funktionelle Abhängigkeit der Dichterenormierung Z_ρ von μ wird erst beim Auftragen von $(Z_\rho - 1)/2S$ sichtbar (vgl. Abbildung 40) und ist klein. Dagegen zeigt sich in der ferromagnetischen Magnetisierung ein ähnliches Verhalten bei kleinen chemischen Potentialen wie in [102, 111, 97], obwohl das Verhalten nahe des kritischen Feldes besonders im Falle $S = 1/S$ nicht aufgelöst ist (siehe Abbildung 41). Ebenso ergeben sich für $h \to 0$ die gleichen unphysikalischen Werte wie schon für die Untergittermagnetisierung, so dass die Berechnungen aller Größen nur für nicht zu große chemische Potentiale Sinn machen.

7.3 Zusammenfassung

Im vergangenen Kapitel wurde untersucht, wie sich die Eigenschaften des in Kapitel 6 betrachteten Bose-Gases ändern, wenn wir Näherungen weglassen und insbesondere Einflüsse der Wechselwirkungen berücksichtigen. Dazu wurden Werte von zuvor eingeführten Renormierungsfaktoren berechnet, die insbesondere mit Messgrößen in Experimenten verknüpft sind. Es stellt sich heraus, dass gerade der Ansatz der Entwicklung in der Bosonendichte geeignet zu sein scheint, um Eigenschaften des Quantenantiferromagneten im starken Magnetfeld oberhalb eines kritischen Feldes h^* zu beschreiben. Aufgrund von Wechselwirkungen bricht gerade in diesem Bereich die konventionelle Spinwellentheorie in $1/S$-Entwicklung zusammen, da die Magnonen nicht mehr stabil gegenüber dem spontanen Zerfall sind.

Unser Ansatz ist aber gerade in dem Bereich kleiner Dichten (kleinem chemischen Potentials $\mu = h_c - h$) gut, wie der Vergleich der Untergittermagnetisierung und der ferromagnetischen Magnetisierung mit Ergebnissen in [97, 41]. Die in [97] gefundene logarithmische Abhängigkeit der Untergittermagnetisierung nahe des kritischen Feldes konnte jedoch nicht eindeutig bestätigt werden, obwohl das Verhältnis zwischen der Untergittermagnetisierung in Mean-Field-Näherung und dem Wert ohne Wechselwirkungen (6.28b) für $\mu \to 0$ groß wird (siehe Abbildung 39).[50]

Erstaunlich gut ist auch die Übereinstimmung des Wertes $h^* \approx 0.23 h_c$ mit dem Wert in [41], so dass auch die Methode zur Berechnung der Spinwellenrenormierung geeignet ist. Diese setzt sich im Vergleich zu den Ergebnissen aus [24] insbesondere aus mehreren Beiträgen zusammen, die unterschiedliche Abhängigkeiten vom chemischen Potential haben (siehe Abbildung 34). Eine Divergenz der Spinwellengeschwindigkeit für $\mu \to 0$ ist in jedem Fall nicht ungewöhnlich, da auch der Imaginärteil der Magnonen-Selbstenergie aufgrund der Quasiteilchenzerfälle groß wird und beide mit der Kramers-Kroning-Relation [134] verknüpft sind.

Die Herangehensweise ist neben numerischen Problemen im Bereich kleiner Dichten konsistent und enthält durch die Renormierung des chemischen Potentials auch die Korrekturen aus der Renormierung des Kippwinkels [111] in konventioneller Spinwellentheorie. Zu Klären bleibt jedoch noch, inwiefern Diagramme wie in Abbildung 27 zur Spinwellenrenormierung beitragen [127].

[50] Eine logarithmische Abhängigkeit würde der Exaktheit unserer Theorie für kleine Dichten widersprechen [123].

Appendix A Verallgemeinerung der Bosonisierung für Spinoperatoren zum Gesamtspin $S \geq \frac{1}{2}$

Die übliche Holstein-Primakoff-Transformation (3.8) bzw. Dyson-Maleev-Transformation ((3.10)) ist einerseits nur für kleine Bosonendichten gültig und andererseits treten unter Berücksichtigung der Normalordnung[51] weitere Terme in der $1/S$-Entwicklung auf. Eine etwas andere Parametrisierung unter Berücksichtigung der Normalordnung in [101] geht von den Matrixelementen der Drehimpulsoperatoren aus:

$$\left(S^{+}\right)_{M,M-1} = \left(S^{-}\right)_{M-1,M} = \sqrt{(S+M)(S-M+1)} \tag{A.1a}$$

$$\left(S_z\right)_{M,M} = M. \tag{A.1b}$$

Die folgende Transformation auf Bosonen mit

$$\left[\beta, \beta^{\dagger}\right] = 1 \tag{A.2}$$

ist bei festem Gesamtspin für $M = S, S-1$ also bei kleinen Anregungen aus dem Grundzustand exakt:[52]

$$S^z = S - \beta^{\dagger}\beta \tag{A.3a}$$

$$S^{+} = \sqrt{2S}\beta^{\dagger}\left(1 + (K-1)\beta^{\dagger}\beta\right) \tag{A.3b}$$

$$S^{-} = \sqrt{2S}\left(1 + (K-1)\beta^{\dagger}\beta\right)\beta \tag{A.3c}$$

mit der Größe

$$\boxed{K = \sqrt{1 - \frac{1}{2S}}} \tag{A.4}$$

die für $S = \frac{1}{2}$ verschwindet. In diesem Fall bildet die Holstein-Primakoff-Transformation auch unter Berücksichtigung der Normalordnung auf ein Modell von Bosonen mit Hardcore-Abstoßung an gleichen Gitterplätzen ab:

$$S^{+} = \sqrt{2S}\beta^{\dagger}(1 - \beta^{\dagger}\beta). \tag{A.5}$$

Für beliebige S erhält man die Transformation aus der Holstein-Primakoff-Transformation, wenn man bis zur linearen Ordnung der Bosonendichte entwickelt und die Terme aus der Normalordnung berücksichtigt. Wir starten also mit der HP-Parametrisierung und benutzen die Entwicklung

$$\sqrt{1-x} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-3)!!}{(2n)!!} x^n \tag{A.6}$$

mit der Doppelfakultät $m!! = m(m-2)\cdots 3 \cdot 1$ und erhalten so

$$S^{+} = \sqrt{2S}\beta^{\dagger}\left[1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-3)!!}{(2n)!!}\left(\frac{\beta^{\dagger}\beta}{2S}\right)^n\right] \tag{A.7}$$

Führen wir nun die Normalordnung (bezeichnet durch $\mathcal{N}$) der auftretenden Erzeuger bzw. Vernichter aus, so ergeben sich bei Anwendung von (A.2) zusätzliche Terme, die wir bis zur linearen Ordnung berücksichtigen:

$$\left(\frac{\beta^{\dagger}\beta}{2S}\right)^n = \mathcal{N}\left(\frac{\beta^{\dagger}\beta}{2S}\right)^n + \left(\frac{1}{2S}\right)^n \beta^{\dagger}\beta + \mathcal{O}(\beta^{\dagger}\beta)^2.$$

[51] Bei der üblichen Besetzungszahldarstellung von Operatoren, auch Normalordnung genannt, stehen alle Vernichter rechts von den Erzeugern.

[52] Für den Antiferromagneten ist der Grundzustand derart, dass gerade nicht alle Spins im Zustand mit maximaler magnetischer Quantenzahl M bezüglich eines globalen Koordinatensystems sind. Jedoch haben wir an benachbarten Gitterplätzen gerade gedrehte Koordinatensysteme, und somit spielt der gestaffelte Spin die Rolle des Gesamtspins.

Also können wir den Aufsteiger umschreiben zu

$$\begin{aligned} S^+ &= \sqrt{2S}\beta^\dagger \left[1 + \left(1 - \sum_{n=1} \frac{(2n-3)!!}{(2n)!!} \left(\frac{1}{2S}\right)^n - 1\right) \beta^\dagger\beta\right] + O(\beta^5) \\ &\approx \sqrt{2S}\beta^\dagger(1 + (K-1)\beta^\dagger\beta). \end{aligned}$$

Somit ändert sich in der Entwicklung nach der Bosonendichte quantitativ der Vorfaktor des Wechselwirkungsterms, was sich aber in die renormierten Größen (z. B. c und χ) definieren lässt, die ohnehin bei realen Messungen aus dem Experiment bestimmt werden müssen. Daher erhält man auch mit der vereinfachten Parametrisierung ohne explizite Berücksichtigung von $1/S$-Korrekturen durch Normalordnung die gleichen Ergebnisse und insbesondere der kontinuierliche Anteil des dynamischen Strukturfaktors taucht ebenfalls auf.

Für den Fall $S \geq 1$ lässt sich diese Methode weiterführen, so dass wir nun die Matrixelemente zwischen den drei Zuständen zu $M = S, S-1, S-2$ exakt mittels Bosonen abbilden. Unter Berücksichtigung der Normalordnung ergibt sich die korrekte Holstein-Primakoff-Transformation bis zur 2. Ordnung in der Bosonendichte zu

$$\boxed{S^+ = \sqrt{2S}\beta^\dagger \left(1 + (K-1)\beta^\dagger\beta + \frac{1}{2}\left(L - 2K + 1\right)\beta^\dagger\beta^\dagger\beta\beta\right)} \tag{A.8}$$

mit der zusätzlichen spinabhängigen Funktion

$$\boxed{L = \sqrt{1 - \frac{1}{S}} \quad , \quad S \geq 1} \tag{A.9}$$

In der Praxis wird aber die Funktion $L(S)$ keine Rolle spielen, da sie nur die 3-Teilchen-Wechselwirkung renormiert, die dann höherer Ordnung in der Bosonendichte ist. Eine Entwicklung der Funktionen K und L nach inversen Potenzen des Spins

$$K - 1 = -\frac{1}{4S} + \mathcal{O}(\frac{1}{S^2}) \tag{A.10a}$$

$$L - 2K + 1 = -\frac{1}{16S^2} + \mathcal{O}(\frac{1}{S^3}) \tag{A.10b}$$

ergibt dann wieder das wohl bekannte Ergebnis der Spinwellentheorie.

Appendix B Strukturkonstanten bei Festkörpern

Zur Darstellung von Wechselwirkungen im Impulsraum definiert man im Falle von diskreten Austauschkonstanten mit Gittersymmetrie J_{ij} eine entsprechende Fouriertransformierte

$$\boxed{\tilde{J}_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\vec{\delta}} J_{\vec{\delta}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\vec{\delta}}} \tag{B.11}$$

wobei $\vec{\delta}$ die Summation über alle Differenzvektoren des Gitters darstellt (siehe Abbildung 44) und $J_{\vec{\delta}}$ die entsprechende Austauschkonstante für den Abstandsvektor $\vec{\delta} = \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j$. Man definiert nun die Strukturkonstante über

$$\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} = \frac{\tilde{J}_{\boldsymbol{k}}}{\tilde{J}_0}. \tag{B.12}$$

In dieser Arbeit werden nur Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen berücksichtigt (siehe Abbildung 44), so dass wir die Strukturkonstanten als

$$\boxed{\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}} \tag{B.13}$$

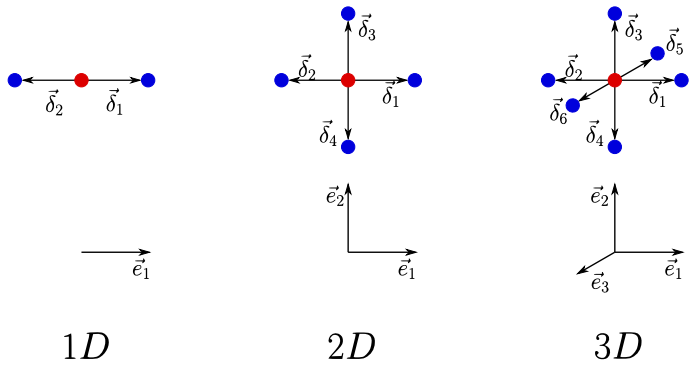

Abbildung 44: Nächste Nachbar-Wechselwirkung zwischen Spins (dargestellt als rote und blaue Punkte) entlang den Differenzvektoren δ_i für die Kette (links), das Quadratgitter (mitte) und das einfach kubische Gitter (rechts).

schreiben können, wobei die Summe nun über alle z Nächste-Nachbar-Verbindungsvektoren läuft. Der Einfachheit halber werden weiterhin nur hyperkubische Gitter mit der Gitterkonstanten a betrachtet, deren Strukturkonstante

$$\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{D}\sum_{i=1}^{D}\cos(k_i a) \qquad \boldsymbol{k} = \sum_{i=1}^{D} k_i \boldsymbol{e}_i \tag{B.14}$$

ist. Eine Taylor-Entwicklung für kleine Impulse $\boldsymbol{k}$ ergibt dann

$$\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}} = 1 - \frac{a^2\boldsymbol{k}^2}{2D} + \mathcal{O}(\boldsymbol{k}^4). \tag{B.15}$$

Andere Gittertypen mit den entsprechenden Strukturfaktoren werden zum Beispiel in [68] für $D = 2$ oder in [52, 47, 57, 89] diskutiert.
Spezielle Eigenschaft bei Summation im Impulsraum: Seien $f(\boldsymbol{k})$ und $g(\boldsymbol{k})$ beliebige Funktionen mit Gittersymmetrie, so gilt insbesondere

$$\sum_{\boldsymbol{kq}} f(\boldsymbol{k})g(\boldsymbol{k})\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} = \sum_{\boldsymbol{kq}} f(\boldsymbol{k})g(\boldsymbol{q})\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{q}} \tag{B.16}$$

wie man mittels Einfügen der Fouriertransformierten von f und g zeigen kann.

Appendix C Bogoliubov-Transformation

Ein wichtiges Diagonalisierungsverfahren für die Spinwellentheorie ist die Bogoliubov-Transformation, die mittels einer Drehung im Raum der beiden Moden des Antiferromagneten den Hamiltonian diagonalisiert. Gegeben sei dazu ein quadratischer Hamiltonian

$$H_2 = \sum_{\boldsymbol{k}} \left[f_{\boldsymbol{k}} \left(A^\dagger_{\boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}} + B^\dagger_{\boldsymbol{k}} B_{\boldsymbol{k}} \right) + g_{\boldsymbol{k}} \left(A^\dagger_{\boldsymbol{k}} B^\dagger_{-k} + A_{\boldsymbol{k}} B_{-\boldsymbol{k}} \right) \right] \tag{C.1}$$

mit entsprechend bosonischen Operatoren deren Vertauschungsrelationen (4.21) lauten. Die Funktionen $f_{\boldsymbol{k}}$ sowie $g_{\boldsymbol{k}}$ seien gerade Funktionen der Impulse $\boldsymbol{k}$

$$f_{-\boldsymbol{k}} = f_{\boldsymbol{k}} \qquad g_{-\boldsymbol{k}} = g_{\boldsymbol{k}}, \tag{C.2}$$

was bei Systemen mit Inversionssymmetrie immer erfüllt ist. Um nun (C.1) zu diagonalisieren, führen wir eine Bogoliubov-Transformation [38] durch, die folgendermaßen parametrisiert ist

$$\boxed{\begin{pmatrix} A_{\boldsymbol{k}} \\ B^\dagger_{-\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\boldsymbol{k}} & -v_{\boldsymbol{k}} \\ -v_{\boldsymbol{k}} & u_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\boldsymbol{k}} \\ \beta^\dagger_{-\boldsymbol{k}} \end{pmatrix}.} \tag{C.3}$$

Damit diese Transformation unitär ist, also eine Drehung darstellt, müssen wir fordern, dass die Operatoren $\alpha_{\boldsymbol{k}}$ und $\beta_{\boldsymbol{k}}$ wieder bosonische Vernichter sind:

$$\left[\alpha_{\boldsymbol{k}}, \alpha_{\boldsymbol{k}'}^\dagger\right] = \left[\beta_{\boldsymbol{k}}, \beta_{\boldsymbol{k}'}^\dagger\right] = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}. \tag{C.4}$$

Elementare lineare Algebra liefert nun die Rücktransformation (falls die Determinante der Transformationsmatrix nicht verschwindet, was natürlich bei der hier betrachteten unitären Transformation der Fall ist):

$$\beta_{-\boldsymbol{k}}^\dagger = \frac{1}{u_{\boldsymbol{k}}^2 - v_{\boldsymbol{k}}^2}\left(v_{\boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}} + u_{\boldsymbol{k}} B_{-\boldsymbol{k}}^\dagger\right) \tag{C.5a}$$

$$\alpha_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{u_{\boldsymbol{k}}^2 - v_{\boldsymbol{k}}^2}\left(u_{\boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} B_{-\boldsymbol{k}}^\dagger\right). \tag{C.5b}$$

Die Bedingung (C.4) liefert mit (C.5a) zusammen die Relation

$$u_{\boldsymbol{k}}^2 - v_{\boldsymbol{k}}^2 = 1, \tag{C.6}$$

die die Unitarität der Transformation garantiert. Hierbei haben wir o.B.d.A. angenommen, dass die Parameter $u_{\boldsymbol{k}}$ und $v_{\boldsymbol{k}}$ reell sind. Für komplexe Parameter ergeben sich die entsprechenden Gleichungen (C.6) mit komplexen Beträgen und die Operatoren $\alpha_{\boldsymbol{k}}$ und $\beta_{\boldsymbol{k}}$ weichen um Phasenfaktoren von den in (C.3) definierten Operatoren ab. Geht man von komplexen Koeffizienten aus, so ist das Gleichungssystem überbestimmt, d.h. die Koeffizienten können noch mit einer beliebigen Phase multipliziert werden, was die $U(1)$-Symmetrie von (C.1) widerspiegelt [14]. Wir müssen nun die Parameter in (C.3) so wählen, dass der Hamiltonian (4.24c) diagonal wird. Einfaches Einsetzen liefert unter Ausnutzung des kanonischen Kommutators zur Normalordnung der Operatoren zunächst

$$\begin{aligned} H_2 = \sum_{\boldsymbol{k}} \Big\{ &\left(\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta_{-\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{-\boldsymbol{k}} + 1\right)\left[f_{\boldsymbol{k}}\left(u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2\right) - 2 g_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}\right] \\ &+ \left(\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{-\boldsymbol{k}}^\dagger + \beta_{-\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}}\right)\left[g_{\boldsymbol{k}}\left(v_{\boldsymbol{k}}^2 + u_{\boldsymbol{k}}^2\right) - 2 f_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}\right] + f_{\boldsymbol{k}}\left(v_{\boldsymbol{k}}^2 - u_{\boldsymbol{k}}^2\right)\Big\} \end{aligned} \tag{C.7}$$

Der nicht-diagonale Anteil soll durch die Transformation eliminiert werden, was unmittelbar die Bedingung

$$0 = g_{\boldsymbol{k}}\left(v_{\boldsymbol{k}}^2 - u_{\boldsymbol{k}}^2\right) - 2 f_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \tag{C.8}$$

ergibt, die nach der Substitution $x = v_{\boldsymbol{k}}^2$ sowie unter Ausnutzung von (C.6) auf eine quadratische Gleichung in x führt:

$$4 f_{\boldsymbol{k}}^2\left(x + x^2\right) = g_{\boldsymbol{k}}\left(4x^2 + 4x + 1\right).$$

Somit sind die Lösungen

$$x_\pm = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{g_{\boldsymbol{k}}^2}{\left(g_{\boldsymbol{k}}^2 - f_{\boldsymbol{k}}^2\right)}} = \frac{1}{2}\left(-1 \pm \frac{f_{\boldsymbol{k}}}{\sqrt{f_{\boldsymbol{k}}^2 - g_{\boldsymbol{k}}^2}}\right) \tag{C.9}$$

Mit der Definition

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}}^2 = f_{\boldsymbol{k}}^2 - g_{\boldsymbol{k}}^2 \tag{C.10}$$

erhalten wir dann die Parameter $v_{\boldsymbol{k}}$ und $u_{\boldsymbol{k}}$ zu

$$v_{\boldsymbol{k}} = \frac{g_{\boldsymbol{k}}}{|g_{\boldsymbol{k}}|}\sqrt{\frac{f_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_{\boldsymbol{k}}}} \tag{C.11a}$$

$$u_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{1 + v_{\boldsymbol{k}}^2} = \sqrt{\frac{f_{\boldsymbol{k}} + \epsilon_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_{\boldsymbol{k}}}} \tag{C.11b}$$

wobei die Lösung x_- ausgeschlossen wurde, da $v_{\boldsymbol{k}} \in \mathcal{R}$ vorausgesetzt und die Unitaritätsbedingung (C.6)

ausgenutzt wurde. Weitere nützliche Relationen sind

$$u_{\boldsymbol{k}}^2 + v_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{f_{\boldsymbol{k}}}{\epsilon_{\boldsymbol{k}}} \quad \Rightarrow \quad u_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{f_{\boldsymbol{k}}}{\epsilon_{\boldsymbol{k}}} + 1\right) \tag{C.12a}$$

$$u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} = \frac{g_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_{\boldsymbol{k}}} \tag{C.12b}$$

Damit wird der Hamiltonian (C.7) diagonal und wir bekommen eine Absenkung der Grundzustandsenergie:

$$H_2 = \sum_{\boldsymbol{k}} \left[\epsilon_{\boldsymbol{k}} \left(\alpha_{\boldsymbol{k}}^\dagger \alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta_{\boldsymbol{k}}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}} + 1\right) - f_{\boldsymbol{k}}\right]. \tag{C.13}$$

Appendix D Transformation des quartischen Hamiltonian

Hier gehen wir vom Wechselwirkungsanteil des Dyson-Maleev-Hamiltonian in (4.23b) bzw. des Holstein-Primakoff-Hamiltonian in (4.23a) aus. Mit den Abkürzungen $\boldsymbol{k}_1 = 1$ für die Impulse sowie den Abkürzungen für die Operatoren

$$p_1^+ = \Phi_{\boldsymbol{k}_1 + \tau_{\boldsymbol{k}_1}} \tag{D.1a}$$

$$p_1^- = \Phi_{\boldsymbol{k}_1 - \tau_{\boldsymbol{k}_1}} \tag{D.1b}$$

$$x_1^- = \Pi_{\boldsymbol{k}_1 - \mu_{\boldsymbol{k}_1}} \tag{D.1c}$$

$$x_1^+ = \Pi_{\boldsymbol{k}_1 + \mu_{\boldsymbol{k}_1}} \tag{D.1d}$$

sieht man mit $\tau_1 \mu_1 = 1/V$, dass auch diese Operatoren kanonisch sind

$$\left[p_1^-, x_2^-\right] = \left[p_1^+, x_2^+\right] = -i\delta_{1+2,0} \tag{D.2}$$

Damit wird die Transformation (5.6a) zu:

$$A_1 = \frac{1}{2}\left(p_1^+ + i p_1^- + x_1^- - i x_1^+\right) \tag{D.3a}$$

$$B_1 = \frac{1}{2}\left(p_1^+ - i p_1^- - x_1^- - i x_1^+\right). \tag{D.3b}$$

Im $H_4^{\parallel}$ (4.24d) taucht der Dichteoperator auf, den wir hier allgemein berechnen, wobei f_{1+2}, g_{3+4} beliebige, impulsabhängige Funktionen sind

$$\begin{aligned}\sum_{12} \delta_{1+2+3+4,0} f_{1+2} A_1^\dagger A_{-2} = \sum_{12} \delta_{1+2+3+4,0} f_{1+2} \big[&p_1^+ p_2^+ + p_1^- p_2^- + x_1^- x_2^- + x_1^+ x_2^+ \\ &+2\left(p_1^+ x_2^- - p_1^- x_2^+\right)\big] - N\delta_{3+4,0} f_0\end{aligned} \tag{D.4a}$$

$$\begin{aligned}\sum_{34} \delta_{1+2+3+4,0} g_{3+4} B_3^\dagger B_{-4} = \sum_{34} \delta_{1+2+3+4,0} g_{3+4} \big[&p_3^+ p_4^+ + p_3^- p_4^- + x_3^- x_4^- + x_3^+ x_4^+ \\ &2\left(p_3^+ x_4^+ - p_3^+ x_4^-\right)\big] - N\delta_{1+2,0} g_0.\end{aligned} \tag{D.4b}$$

Beim Ausmultiplizieren ergeben sich nun auch Terme von nicht kommutierenden Operatoren, die wir in einer symmetrisierten Form schreiben müssen [88]. Dazu betrachte man den Term

$$4p_1^+ x_2^- p_3^- x_4^+ = \left\{p_3^-, x_2^-\right\}\left\{x_4^+, p_1^+\right\} + 2i\left(p_1^+ x_4^+ \delta_{2+3,0} - x_2^- p_3^- \delta_{1+4,0}\right) + \delta_{2+3,0}\delta_{1+4,0}. \tag{D.5}$$

In unserem Fall sind die Funktionen in (D.4) $f_{1+2} = (1+\lambda)\tilde{\gamma}_{1+2}$ sowie $g_{3+4} = 1$, so dass wir den parallelen Hamiltonian in symmetrisierter Form mit quartischen Terme sowie quadratische Korrekturen

und Grundzustandsenergie schreiben können als:

$$
\begin{aligned}
H_4^{\parallel} &= -\frac{1}{8N}\tilde{J}_0 \sum_{1234} \delta_{1+2+3+4,0}(1+\lambda) \qquad \text{(D.6)}\\
&\times \Big[\big(p_1^+p_2^+p_3^+p_4^+ + p_1^-p_2^-p_3^-p_4^- + x_1^-x_2^-x_3^-x_4^- + x_1^+x_2^+x_3^+x_4^+\big)\frac{1}{2}\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}\right)\\
&\quad + \big(p_1^+p_2^+p_3^-p_4^- + x_1^+x_2^+x_3^-x_4^-\big)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}\right)\\
&\quad + \big(p_1^+p_2^+x_3^-x_4^- + x_1^+x_2^+p_3^-p_4^-\big)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}-2\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\gamma_{2+4}\right)\right)\\
&\quad + \big(\{p_1^+p_2^+, x_3^+x_4^+\} + \{p_1^-p_2^-, x_3^-x_4^-\}\big)\frac{1}{2}\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}\right)\\
&\quad + \{p_1^+, x_2^+\}\{x_3^-, p_4^-\}\left(\tilde{\gamma}_{1+3}+\tilde{\gamma}_{2+4}\right)\Big]\\
&+ \frac{1}{4}\tilde{J}_0\sum_1(1+\lambda)\left(p_{-1}^+p_1^+ + p_{-1}^-p_1^- + x_{-1}^-x_1^- + x_{-1}^+x_1^+\right)\\
&- \frac{5N}{16}\tilde{J}_0(1+\lambda).
\end{aligned}
$$

Die Vorgehensweise für den senkrechten Anteil (4.24e) bzw. (4.24f) ist analog: Dazu multipliziert man zunächst die 3 im Impuls symmetrischen Operatoren und erhält so

$$
\begin{aligned}
\sum_{123}\delta_{1+2+3+4,0}\, B_1^\dagger B_2^\dagger B_{-3} &= \sum_{123}\delta_{1+2+3+4,0}\,\frac{1}{2^3}\big[p_1^+p_2^+p_3^+ + ip_1^-p_2^-p_3^- - x_1^-x_2^-x_3^- + ix_1^+x_2^+x_3^+\\
&\quad + p_1^+p_2^-p_3^- + 3p_1^+x_2^-x_3^- + p_1^+x_2^+x_3^+ + ip_1^-p_2^+p_3^+ + ip_1^-x_2^-x_3^- + 3ip_1^-x_2^+x_3^+\\
&\quad - 3x_1^-p_2^+p_3^+ - x_1^-p_2^-p_3^- - x_1^-x_2^+x_3^+ + ix_1^+p_2^+p_3^+ + 3ix_1^+p_2^-p_3^- + ix_1^+x_2^-x_3^-\\
&\quad + 2\left\{\left(p_1^+p_2^-x_3^+ - ip_1^-p_2^+x_3^- + x_1^-p_2^-x_3^+ + ix_1^+p_2^+x_3^-\right)\right]\\
&\quad - \frac{N}{2^3}\left(p_{-3}^+ + ip_{-3}^- + ix_{-3}^+\right). \qquad \text{(D.7)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\sum_{234} A_2^\dagger A_{-3}A_{-4}\,\delta_{1+2+3+4,0} &= \sum_{234}\delta_{1+2+3+4,0}\,\frac{1}{2^3}\big[p_2^+p_3^+p_4^+ + ip_2^-p_3^-p_4^- + x_2^-x_3^-x_4^- - ix_2^+x_3^+x_4^+\\
&\quad + ip_2^+p_3^+p_4^- + 3p_2^+p_3^+x_4^- - ip_2^+p_3^+x_4^+ + p_2^-p_3^-p_4^+ + p_2^-p_3^-x_4^-\\
&\quad + 3x_2^-x_3^-p_4^+ + ix_2^-x_3^-p_4^- + ix_2^-x_3^-x_4^+ + x_2^+x_3^+p_4^+ + 3ix_2^+x_3^+p_4^- + x_2^+x_3^+x_4^-\\
&\quad + 2\left(ip_2^+x_3^-p_4^- - ip_2^+x_3^-x_4^+ + p_2^-x_3^+p_4^+ - p_2^-x_3^+p_4^-\right)\big]\\
&\quad - \frac{N}{2^3}\left(p_{-4}^+ + ip_{-4}^- + x_{-4}^- + ix_{-4}^+\right)
\end{aligned} \qquad \text{(D.8)}
$$

Nun muss noch der 4. Operator eingesetzt werden und ausmultipliziert sowie zusammengefasst werden. Nun teilen wir den Hamiltonian in einen explizit hermiteschen und antihermiteschen Anteil auf:

$$
H_4^{\perp\mathrm{DM}} = H_4^{\mathrm{DM,H}} + H_4^{\mathrm{DM,AH}} + H_4^{\mathrm{DM}\perp(2)} \qquad \text{(D.9)}
$$

mit dem hermiteschen Anteil

$$
\begin{aligned}
H_4^{\mathrm{DM,H}} &= -\frac{\tilde{J}_0}{8N}\sum_{1234}\delta_{1+2+3+4,0}\,\tilde{\gamma}_4\left\{p_1^+p_2^+p_3^+p_4^+ + p_1^-p_2^-p_3^-p_4^- - x_1^-x_2^-x_3^-x_4^- - x_1^+x_2^+x_3^+x_4^+\right.\\
&\quad + p_1^+p_2^-p_3^-p_4^+ + 3p_1^+x_2^-x_3^-p_4^+ + p_1^+x_2^+x_3^+p_4^+ + p_1^-p_2^+p_3^+p_4^- + p_1^-x_2^-x_3^-p_4^- + p_1^-x_2^+x_3^+p_4^-\\
&\quad - 3x_1^-p_2^+p_3^+x_4^- - x_1^-p_2^-p_3^-x_4^- - x_1^-x_2^+x_2^+x_4^- - x_1^+p_2^+p_3^+x_4^+ - 3x_1^+p_2^-p_3^-x_4^+ - x_1^+x_2^-x_3^-x_4^+\\
&\quad \left.2\left(p_1^+p_2^-x_3^+x_4^- + p_1^-p_2^+x_3^-x_4^+ - x_1^-p_2^-x_3^+p_1^+ - x_1^+p_2^+x_3^-p_4^-\right)\right\} \qquad \text{(D.10)}
\end{aligned}
$$

sowie den antihermiteschen Anteil

$$\begin{aligned}
H_4^{\mathrm{DM,AH}} &= -i\frac{\tilde{J}_0}{8N}\sum_{1234}\delta_{1+2+3+4,0}\,\tilde{\gamma}_4\left[-p_1^+p_2^+p_3^+p_4^- + p_1^-p_2^-p_3^-p_4^+ + x_1^-x_2^-x_3^-x_4^+ + x_1^+x_1^+x_3^+x_4^-\right.\\
&\quad +p_1^+p_2^-p_3^-p_4^- + 3p_1^+x_2^-x_3^-p_4^- - p_1^+x_1^+x_3^+p_4^- + p_1^-p_2^+p_3^+p_4^+ + p_1^-x_2^-x_3^-p_4^+ + 3p_1^-x_2^+x_3^+p_4^+\\
&\quad -3x_1^-p_2^+p_3^+x_3^+ - x_1^-p_2^-p_3^-x_4^+ - x_1^-x_2^+x_3^+x_4^+ + x_1^+p_1^+p_3^+x_4^- + 3x_1^+p_2^-p_3^-x_4^- + x_1^+x_2^-x_3^-x_4^-\\
&\quad \left.+\,2\left(p_1^+p_2^-x_3^+x_4^+ - p_1^-p_2^+x_3^-x_4^- - x_1^-p_2^-x_3^+p_4^- - x_1^+p_2^+x_3^-p_4^+\right)\right] \qquad \text{(D.11)}
\end{aligned}$$

und die Korrektur zum quadratischen Term

$$H_4^{\mathrm{DM}\perp(2)} = \frac{\tilde{J}_0}{2}\sum_1\tilde{\gamma}_1\left(p_1^+p_{-1}^+ + p_1^-p_{-1}^- - x_1^-x_{-1}^- - x_1^+x_{-1}^+\right). \qquad \text{(D.12)}$$

Zur Berechnung der Vertexfunktionen müssen wir die Strukturfaktoren in den Impulsen symmetrisieren sowie nicht vertauschende Operatoren als Antikommutator schreiben:

$$\begin{aligned}
\sum_{1234}\delta_{1+2+3+4,0}\,\tilde{\gamma}_4\left(p_1^+x_2^+x_3^+p_4^+ - x_1^+p_2^+p_3^+x_4^+\right) &= \frac{1}{4}\sum_{1234}\delta_{1+2+3+4,0}\left\{p_1^+p_2^+, x_3^+x_4^+\right\}(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4)\\
&\quad +2i\left(\sum_1 p_{-1}^+x_1^+\sum_3\tilde{\gamma}_3 - \frac{N}{2}\sum_1\tilde{\gamma}_1p_{-1}^+p_1^+\right). \qquad \text{(D.13)}
\end{aligned}$$

(Analog der Term mit Großbuchstaben) Die gemischten Terme werden wie in (D.5) symmetrisiert, so dass der senkrechte Wechselwirkungsanteil ohne quadratische Korrekturen nun folgendermaßen lautet

$$\begin{aligned}
H_4^{\mathrm{DM,H}} &= -\frac{\tilde{J}_0}{8N}\sum_{1234}\delta_{1+2+3+4,0}\\
&\quad\times\left[\left(p_1^+p_2^+p_3^+p_4^+ + p_1^-p_2^-p_3^-p_4^- + x_1^-x_2^-x_3^-x_4^- - x_1^+x_3^+x_3^+x_4^+\right)\frac{1}{4}(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2+\tilde{\gamma}_3+\tilde{\gamma}_4)\right.\\
&\quad +\left(p_1^+p_2^+p_3^-p_4^- - x_1^-x_2^-x_3^+x_4^+\right)\frac{1}{2}(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2+\tilde{\gamma}_3+\tilde{\gamma}_4)\\
&\quad +\left(p_1^+p_2^+x_3^-x_4^- + p_1^-p_2^-x_3^+x_4^+\right)\frac{1}{2}3(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4)\\
&\quad +\left(\left\{p_1^+p_2^+, x_3^+x_4^+\right\} + \left\{p_1^-p_2^-, x_3^-x_4^-\right\}\right)\frac{1}{4}(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4)\\
&\quad \left.+\left\{p_1^-, x_2^-\right\}\left\{x_3^+, p_4^+\right\}\frac{1}{2}(-\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2+\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4)\right]. \qquad \text{(D.14)}
\end{aligned}$$

Auch der antihermitesche Anteil wird symmetrisiert und nicht vertauschende Operatoren als Antikommutator geschrieben, da diese Darstellung für die Störungstheorie einfacher zu handhaben ist und sich der Holstein-Primakoff-Hamiltonian einfach ablesen lässt. Dazu brauchen wir die einzelnen Terme, z.B.:

$$\begin{aligned}
\sum_{1234}\delta_{1+2+3+4,0}\,\tilde{\gamma}_4\left(p_1^-x_2^-x_3^-p_4^+ - 3p_1^+x_2^-x_3^-p_4^-\right) &= \frac{1}{2}\sum_{1234}\delta_{1+2+3+4,0}\left\{p_1^-, x_2^-x_3^-\right\}p_4^+(\tilde{\gamma}_4-3\tilde{\gamma}_1)\\
&\quad - \frac{iN}{2}\sum_1\tilde{\gamma}_1x_{-1}^-p_1^+ - 3i\sum_1x_{-1}^-p_1^+\sum_2\tilde{\gamma}_2.
\end{aligned}$$

Damit wird der antihermitesche Wechselwirkungsterm zu

$$\begin{aligned}
H_4^{\mathrm{DM,AH}} &= -i\frac{\tilde{J}_0}{8N}\sum_{1234}\delta_{1+2+3+4,0} \qquad \text{(D.15)}\\
&\quad\times\left[\left(p_1^+p_2^+p_3^+p_4^- - p_1^-p_2^-p_3^-p_4^+ - x_1^+x_2^+x_3^+x_4^- + x_1^-x_2^-x_3^-x_4^+\right)(\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4)\right.\\
&\quad \left(\left\{p_1^-, x_1^-x_3^-\right\}p_4^+ - \left\{p_1^+, x_2^+x_3^+\right\}p_4^- - \left\{x_1^-, p_2^-p_3^-\right\}x_4^+ + \left\{x_1^+, p_2^+p_3^+\right\}x_4^-\right)\\
&\quad \left.\times\frac{1}{2}(-3\tilde{\gamma}_1-\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3+\tilde{\gamma}_4)\right].
\end{aligned}$$

Kombinieren wir nun alle Wechselwirkungsterme aus (D.6) und (D.14), so erhalten wir den gesamten hermiteschen Wechselwirkunganteil zu

$$
\begin{aligned}
H_4^{\mathrm{DM}} &= -\frac{\tilde{J}_0}{8N}\sum_{1234}\delta_{1+2+3+4,0} \qquad\qquad (D.16)\\
&\times \Big[\left(p_1^+p_2^+p_3^+p_4^+ + p_1^-p_2^-p_3^-p_4^-\right)\frac{1}{4}\left(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2+\tilde{\gamma}_3+\tilde{\gamma}_4+2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}\right)\right)\\
&\quad+\left(x_1^-x_2^-x_3^-x_4^- + x_1^+x_2^+x_3^+x_4^+\right)\frac{1}{4}\left(-\tilde{\gamma}_1-\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4+2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}\right)\right)\\
&\quad+p_1^+p_2^+p_3^-p_4^-\frac{1}{2}\left(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2+\tilde{\gamma}_3+\tilde{\gamma}_4+2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}\right)\right)\\
&\quad+x_1^+x_2^+x_3^-x_4^-\frac{1}{2}\left(-\tilde{\gamma}_1-\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4+2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}\right)\right)\\
&\quad+p_1^+p_2^+x_3^-x_4^-\frac{1}{2}\left(3\left(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4\right)+2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}-2\left(\tilde{\gamma}_{1+3}+\tilde{\gamma}_{2+4}\right)\right)\right)\\
&\quad+p_1^-p_2^-x_3^+x_4^+\frac{1}{2}\left(3\left(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4\right)+2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}-2\left(\tilde{\gamma}_{1+3}+\tilde{\gamma}_{2+4}\right)\right)\right)\\
&\quad+\left\{p_1^+p_2^+,x_3^+x_4^+\right\}\frac{1}{4}\left(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4+2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}\right)\right)\\
&\quad+\left\{p_1^-p_2^-,x_3^-x_4^-\right\}\frac{1}{4}\left(\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2-\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4+2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{1+2}+\tilde{\gamma}_{3+4}\right)\right)\\
&\quad+\left\{p_1^+,x_2^+\right\}\left\{x_3^-,p_4^-\right\}\frac{1}{2}\left(-\tilde{\gamma}_1+\tilde{\gamma}_2+\tilde{\gamma}_3-\tilde{\gamma}_4+2(1+\lambda)\left(\tilde{\gamma}_{1+3}+\tilde{\gamma}_{2+4}\right)\right)\Big].
\end{aligned}
$$

Aus der symmetrischen Darstellung ergibt sich ebenfalls eine quadratische Korrektur $H_4^{\mathrm{DM}(2)}$ sowie $\tilde{H}_2^{\mathrm{DM,AH}}$und ein Beitrag zur Grundzustandsenergie $H_4^{(0)}$

$$
\begin{aligned}
H_2^{\mathrm{DM}} &= \frac{\tilde{J}_0}{2}\sum_1\left[\left(\tilde{\gamma}_1+1+\lambda\right)\left(p_{-1}^+p_1^+ + p_{-1}^-p_1^-\right)\right. \qquad (D.17a)\\
&\quad\left.+\left(-\tilde{\gamma}_1+1+\lambda\right)\left(x_{-1}^-x_1^- + x_{-1}^+x_1^+\right)\right]\\
\tilde{H}_4^{\mathrm{DM,AH}(2)} &= i\frac{\tilde{J}_0}{2}\sum_1\tilde{\gamma}_1\left(\left\{p_{-1}^+x_1^+\right\}+\left\{p_{-1}^-,x_1^-\right\}\right)\\
H_4^{(0)} &= \frac{1}{2}\tilde{J}_0\sum_1\tilde{\gamma}_1-\frac{5N}{16}\tilde{J}_0(1+\lambda). \qquad (D.17b)
\end{aligned}
$$

Durch die Symmetrisierung sowie die Darstellung nicht-vertauschender Operatoren als Antikommutator $\{A,B\} = AB + BA$ ergibt sich der Wechselwirkungsterm in der Holstein-Primakoff-Darstellung ganz leicht. Die Relationen

$$
\left(H_4^{\mathrm{DM,AH}}\right)^\dagger = -H_4^{\mathrm{DM,AH}} \qquad \left(\tilde{H}_4^{\mathrm{DM,AH}(2)}\right)^\dagger = -\tilde{H}_4^{\mathrm{DM,AH}(2)}
$$

folgen aus der Eigenschaft $\{A,B\}^\dagger = \left\{A^\dagger,B^\dagger\right\}$ sowie der Symmetrie der Vertexfuntionen unter Punktspiegelung am Ursprung und ergeben sofort die Gleichheit der wichtigen Wechselwirkungsterme in beiden Darstellungen

$$
H_4^{\mathrm{HP}} = H_4^{\mathrm{DM,H}} \qquad H_4^{\mathrm{HP}(2)} = H_4^{\mathrm{DM}(2)}. \qquad (D.18)
$$

Unter Beachtung aller Abkürzungen können wir die relevanten Wechselwirkungsterme dann auch mit Vertexfunktionen aufschreiben (siehe (5.12)) und weiterrechnen.

Appendix E Berechnung von Integralen im Impulsraum

In der Störungstheorie des QAF ist es notwendig, Summen über die volle, bzw. reduzierte Brillouin-Zone (siehe Abbildung 11) auszuführen, die neben Parametern den Strukturfaktor (B.13) als einzige

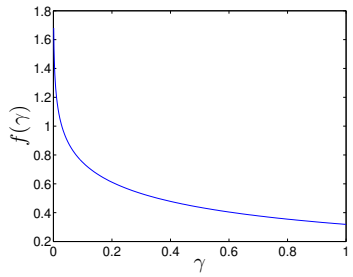

Abbildung 45: Zustandsdichte der Tight-Binding Dispersion (E.2) für positive γ.
Es gilt die Relation $f(-\gamma) = f(\gamma)$

Impulsabhängigkeit aufweisen, d.h. der Form

$$A = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\in 1.\text{ BZ}} F(\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) = a^D \int_{1.\text{ BZ}} \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D} F(\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) \tag{E.1a}$$

$$B = \frac{2}{N}\sum_{\boldsymbol{k}\in \text{red. BZ}} F(\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) = a^D \int_{\text{red. BZ}} \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D} F(\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) \tag{E.1b}$$

sind. Insbesondere in $D = 2$ lassen sich die zweidimensionalen Integrale auf eindimensionale Integrale zurückführen, indem man die Zustandsdichte der Tight-Binding Dispersion

$$f(\gamma) = \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi} d\ k_x \int_{-\pi}^{\pi} d\ k_y\ \delta(\gamma - \tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}) = \frac{2}{\pi} K_e(1-\gamma^2) \tag{E.2}$$

einführt [51, 128], wobei das vollständige Elliptische Integral erster Art als

$$K_e(m) = \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}\sqrt{1-mx^2}} \tag{E.3}$$

definiert ist und das asymptotische Verhalten

$$K_e(m) = \begin{cases} \Theta(m)\left[\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{8}m + \mathcal{O}(m^2)\right] & m \ll 1 \\ \frac{1}{2}\ln\left(\frac{16}{1-m}\right) & |1-m| \ll 1 \end{cases} \tag{E.4}$$

hat. Somit folgt für die Zustandsdichte das asymptotische Verhalten

$$f(\gamma) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} - \frac{\gamma-1}{2\pi} + \frac{5(\gamma-1)^2}{16\pi} + \mathcal{O}(\gamma-1)^2 \\ \frac{2}{\pi^2}\left(4\ln 2 - \ln 4 - \ln\gamma\right) + \mathcal{O}(\gamma) \end{cases} . \tag{E.5}$$

Die Integrale (E.1) lassen sich zu

$$A = \int_0^1 d\gamma\ f(\gamma)\left[F(\gamma) + F(-\gamma)\right] \tag{E.6a}$$

$$B = 2\int_0^1 d\gamma\ f(\gamma)F(\gamma) \tag{E.6b}$$

umschreiben. Man beachte, dass $\gamma \geq 0$ in der reduzierten Brillouin-Zone, während in der vollen Brillouin-Zone $-1 \leq \gamma \leq 1$ gilt (siehe Abbildungen 46 und 11).

Appendix F Pfadintegral im Phasenraum

Gemäß der Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik lässt sich der Zeitentwicklungsoperator zwischen den (Orts-)Zuständen eines Teilchens $|\boldsymbol{x}_f(t_f)\rangle$ und $|\boldsymbol{x}_i(t_i)\rangle$ mit dem Hamilton-Operator

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \tag{F.1}$$

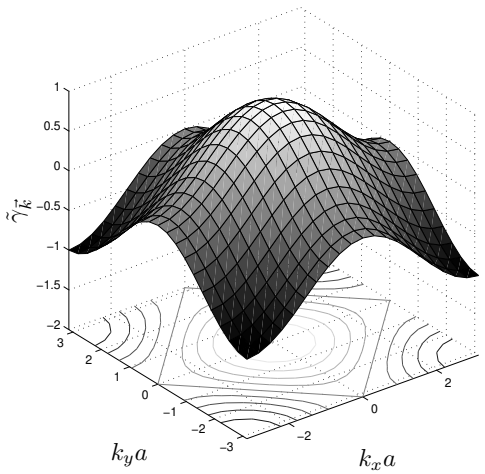

Abbildung 46: Strukturfaktor des Quadratgitters: In der reduzierten Brillouin-Zone ist $\tilde{\gamma}_{\boldsymbol{k}}$ positiv. Die Höhenlinie mit $\gamma = 0$ entspricht gerade dem Rand der ersten Brillouin-Zone aus Abbildung 11.

schreiben als [112, 113, 132]

$$\begin{aligned} U(t_f, \boldsymbol{x}_f; t_i, \boldsymbol{x}_i) &= \lim_{N\to\infty} \int d^D\boldsymbol{x}_1 \cdots \int d^D\boldsymbol{x}_{N-1} \int \frac{d^D\boldsymbol{p}_1}{(2\pi\hbar)^D} \cdots \int \frac{d^D\boldsymbol{p}_N}{(2\pi\hbar)^D} \\ &\quad \times \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \left[\boldsymbol{p}_{j+1} \cdot (\boldsymbol{x}_{j+1} - \boldsymbol{x}_j) - \frac{1}{N} \frac{\boldsymbol{p}_{j+1}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x}_j) \right] \right\} \qquad \text{(F.2)} \\ &= \int_{\boldsymbol{x}(t_i)=\boldsymbol{x}_i}^{\boldsymbol{x}(t_f)=\boldsymbol{x}_f} D[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}] e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} [\boldsymbol{p}\cdot\partial_t \boldsymbol{x} - H[\boldsymbol{p},\boldsymbol{x}]]}. \end{aligned}$$

Die Imaginärzeit-Version des Zeitentwicklungsoperators hängt unmittelbar mit der Zustandssumme zusammen und ergibt sich durch die Ersetzung

$$\tau = it \qquad \to \partial_\tau = -i\partial_t. \qquad \text{(F.3)}$$

Der Imaginärzeitentwicklungsoperator ist nun ein Funktionalintegral

$$U(\boldsymbol{x}_f, \tau; \boldsymbol{x}_i, \tau') = \int_{\boldsymbol{x}(\tau')=\boldsymbol{x}_i}^{\boldsymbol{x}(\tau)=\boldsymbol{x}_f} \mathcal{D}[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}] e^{-S[\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}]} \qquad \text{(F.4)}$$

mit der Euklidschen Wirkung in symmetrischer Form[53]

$$\boxed{S[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}] = \int_{\tau'}^{\tau} d\tau'' \left(\frac{1}{2}(i\boldsymbol{p} \cdot \partial_{\tau''}\boldsymbol{x} - i(\partial_{\tau''}\boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{x}) + H[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}] \right).} \qquad \text{(F.5)}$$

Die Zustandssumme lässt sich nun als

$$\begin{aligned} Z &= \mathrm{tr} e^{-\beta\hat{H}} \\ &= \int_{\boldsymbol{x}(\beta\hbar)=\boldsymbol{x}(0)} \mathcal{D}[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}] e^{-S[\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}]} \qquad \text{(F.6)} \end{aligned}$$

schreiben.[54] Die Verallgemeinerung auf Vielteilchensysteme ergibt dann eine Integration über die Koordinaten und Impulse aller Teilchen sowie die Wirkung (F.5), die sich nun additiv aus den Wirkungen

[53] Sobald der Hamilton-Operator derart symmetrisiert ist, dass nicht-vertauschende Operatoren als Antikommutator auftreten, nimmt die Euklidsche Wirkung die Form (F.5) und die Pfadintegralformulierung ist konsistent [88].

[54] Für den angegebenen Hamiltonian (F.1) lässt sich das N-fache Gauß-Integral trivial lösen und das Funktionalintegral nur über die Ortskoordinaten definieren; die Formel (F.6) bleibt aber für beliebige Hamilton-Operatoren gültig.

aller Teilchen zusammensetzt. Eine allgemeine Formulierung des Pfadintegrals ist auch mit komplexen Variablen möglich [112], wenn man sowohl Zeitentwicklungsoperator als auch Zustandssumme in der Basis der kohärenten Zustände berechnet sowie den Hamilton-Operator mittels Erzeugern und Vernichtern darstellt (siehe auch Abschnitt Appendix G).

Funktionalintegral-Mittelwerte von Operatoren α und β sind durch

$$\begin{aligned} G(\alpha,\tau;\beta,\tau') &= -\left\langle \hat{T}(\hat{\alpha}(\tau)\beta^\dagger(\tau'))\right\rangle \\ &= -\frac{\int \mathcal{D}[\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}] e^{-S[\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}]}\alpha(\tau)\beta^\dagger(\tau')}{\int \mathcal{D}[\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}] e^{-S[\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}]}} \end{aligned} \tag{F.7}$$

gegeben, wobei $\langle\ldots\rangle$ ein thermischer Mittelwert und $\hat{T}(\ldots)$ der Wick-Zeitordnungsoperator [38] ist. Für zeitunabhängige Systeme hängt die Korrelationsfunktion (F.7) nur noch von der Imaginärzeitdifferenz ab, so dass wir

$$G_{\alpha\beta}(\tau-\tau') = \begin{cases} G(\alpha,\tau-\tau';\beta,0) & \tau>\tau' \\ G(\alpha,0;\beta,\tau'-\tau) & \tau<\tau' \end{cases} \tag{F.8}$$

definieren und für endliche Temperaturen $\beta = 1/k_BT$ die Kubo-Martin-Schwinger Randbedingung für Bosonen

$$G_{\alpha\beta}(\tau-\hbar\beta) = G_{\alpha\beta}(\tau) \tag{F.9}$$

herleiten können [129]. Dann lassen sich alle Größen auch im Frequenzraum ausdrücken, indem wir die Korrelationsfunktionen wie auch die Felder fouriertransformieren:

$$G_{\alpha\beta}(\tau) = \begin{cases} \dfrac{1}{\hbar\beta}\displaystyle\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n\tau}G_{\alpha\beta}(i\omega_n) & T>0 \\ \displaystyle\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau}G_{\alpha\beta}(\omega) & T=0 \end{cases} \tag{F.10}$$

$$\Leftrightarrow \quad \begin{aligned} G_{\alpha\beta}(i\omega_n) &= \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega_n\tau}G_{\alpha\beta}(\tau) && T>0 \\ G_{\alpha\beta}(\omega) &= \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau}G_{\alpha\beta}(\tau) && T=0 \end{aligned} \tag{F.11}$$

$$\boldsymbol{x}(\tau) = \begin{cases} \dfrac{1}{\hbar\beta}\displaystyle\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n\tau}\boldsymbol{x}(i\omega_n) & T>0 \\ \displaystyle\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\tau}\boldsymbol{x}(\tau) & T=0. \end{cases} \tag{F.12}$$

ebenso der Impuls $\boldsymbol{p}(\tau)$. $\omega_n = \frac{2\pi n}{\hbar\beta}$ bezeichnet hier die bosonischen Matsubara-Frequenzen. Die Funktionalintegrale behalten dann noch ihre alte Form, jedoch wird nun über Felder mit Frequenzlabel integriert und in der Euklidschen Wirkung können wir die Ableitungen nach der Imaginärzeit explizit ausführen.

Appendix G Funktionalintegralformulierung, Ward-Identitäten des wechselwirkenden Bose-Gases

Die Ward-Identitäten, die aus der Symmetrie der Wirkung unter $U(1)$-Transformationen resultieren, spielen eine zentrale Rolle bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen (6.53a) der hermiteschen Felder. Daher soll hier die Formulierung in [23] mit bereits bekannten Formulierungen aus [130, 40] verglichen werden. Während in [23] eine Quelle A_μ in der Wirkung auftritt, wird sich zeigen, dass ein zusätzliches Hubbard-Stratonovitch-Feld, welches an die Felder koppelt, eine Umformulierung des Modells ist. Wir starten dazu mit dem effektiven Hamiltonian (6.7) der „-“ Felder bei niedrigen Energien

$$\boxed{H = \int \frac{d^Dk}{(2\pi)^D}\epsilon_{\boldsymbol{k}}\Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}}\Psi_{\boldsymbol{k}} + \frac{1}{2}\int \frac{d^Dq}{(2\pi)^D}U_{\boldsymbol{q}}\rho(-\boldsymbol{q})\rho(\boldsymbol{q})} \tag{G.1}$$

mit der Dispersionsrelation $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \tilde{J}_0 S(1-\gamma_{\boldsymbol{k}}) + (2\tilde{J}_0 S - h) \approx \boldsymbol{k}^2/2m - \mu$, $(2m)^{-1} = JSa$, dem chemischen Potential $\mu = 2\tilde{J}_0 S - h$, der konstanten, bei verschwindendem Impulsübertrag endlichen Wechselwirkung $U_{\boldsymbol{q}} = \Theta(\Lambda - |\epsilon_{\boldsymbol{k}}|)\chi_0^{-1}$ sowie der Fouriertransformierten der Dichte $\rho(\boldsymbol{q}) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \Psi^\dagger_{\boldsymbol{k}} \Psi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}$.

G.1 Funktionalintegraldarstellung eines Systems wechselwirkender Bosonen

Während in [23] die Ward-Identitäten in hermitescher Parametrisierung (transversales/longitudinales Feld) hergeleitet werden, wollen wir hier zunächst den Weg von [130] einschlagen und starten von der Funktionalintegraldarstellung mittels kohärenter Zustände und Euklidscher Wirkung, wie sie zum Beispiel in [112] hergeleitet wird. Mit obigem Hamiltonian erhalten wir folgende Wirkung im Impuls-Imaginärzeitraum ausgedrückt durch die komplexen Felder Ψ_K und $\bar{\Psi}_K$

$$S[\bar{\Psi}, \Psi] = S_0[\bar{\Psi}, \Psi] + S_{\text{int}}[\bar{\Psi}, \Psi] \tag{G.2a}$$

$$S_0[\bar{\Psi}, \Psi] = \int_K \bar{\Psi}_K(-i\omega + \epsilon_{\boldsymbol{k}})\Psi_K \tag{G.2b}$$

$$S_{\text{int}}[\bar{\Psi}, \Psi] = \frac{1}{2}\int_{\bar{K}} U_{\bar{\boldsymbol{k}}} \bar{\rho}_{\bar{K}} \rho_{\bar{K}}. \tag{G.2c}$$

Hierbei ist $K = (i\omega, \boldsymbol{k})$ ein 4-Vektor, der aus (Matsubara-) Frequenz sowie Wellenvektor besteht. Man beachte, dass die Dispersionsrelation $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ alle Energien relativ zum chemischen Potential misst und $U_{\boldsymbol{k}}$ eine (im allgemeinen impulsabhängige) Dichte-Dichte Wechselwirkung ist. Das Integralzeichen $\int_K = (\beta V)^{-1} \sum_{\omega \boldsymbol{k}}$ ist eine Abkürzung für die Summe im $\boldsymbol{k}$-Raum und das Frequenzintegral für $T = 0$. Die Dichte im K-Raum ist gegeben durch das Integral $\rho_{\bar{K}} = \int_K \bar{\Psi}_K \Psi_{K+\bar{K}}$.

G.1.1 Entkopplung: Hubbard-Stratonovitch-Transformation

Da die Wechselwirkung bilinear in der Dichte ist, kann sie mittels einer Hubbard-Stratonovitch-Transformation entkoppelt werden [131]. Dabei wird die Identität in Form eines Funktionalintegrals über neue bosonische Felder in die Wirkung eingefügt und anschließend ein verschobenes Gauß-Funktionalintegral gelöst, was dann zur inversen Wechselwirkung (siehe [112]) in der euklischen Wirkung führt. Nun haben wir auf folgende Theorie mit 3 Feldern $\Phi = (\Psi, \bar{\Psi}, \varphi)$ und der euklischen Wirkung

$$S[\bar{\Psi}, \Psi, \varphi] = S_0[\bar{\Psi}, \Psi] + S_0[\Phi] + S_1[\bar{\Psi}, \Psi, \varphi] \tag{G.3}$$

$$S_0[\varphi] = \frac{1}{2}\int_K [U_{\boldsymbol{k}}]^{-1} \varphi^*_K \varphi_K \tag{G.4}$$

$$S_1[\bar{\Psi}, \Psi, \varphi] = i\int_K \int_{\bar{K}} \bar{\Psi}_{K+\bar{K}} \Psi_K \varphi_{\bar{K}} \tag{G.5}$$

abgebildet. Das Hubbard-Stratonowich-Feld ist im Ortsraum reell, d.h. die Fourierkomponenten sind hermitesch und erfüllen

$$\varphi^*_K = \varphi_K. \tag{G.6}$$

G.2 Erzeugende Funktionale

G.2.1 Erzeugendes Funktional der Green-Funktionen (Korrelationsfunktionen)

Wir führen nun 3 verschiedene Quellenfelder $J = (\bar{j}, j, J^*)$ ein, die im folgenden mit der gleichen Vektornotation verwendet werden wie die Felder $\Phi = (\Psi, \bar{\Psi}, \varphi)$. Mit dem Skalarprodukt

$$(J, \Phi) = \int_K \left(\bar{j}_K \Psi_K + \bar{\Psi}_K j_K + J^*_K \varphi_K\right) \tag{G.7}$$

und der Identität

$$\Phi e^{(J,\Phi)} = \frac{\delta}{\delta J} e^{(J,\Phi)} \tag{G.8}$$

sieht man leicht, dass

$$\boxed{G\left[J\right] = \frac{1}{Z_0}\int \mathcal{D}\left[\Phi\right] e^{-S[\Phi]+(J,\Phi)}} \tag{G.9}$$

das erzeugende Funktional der Green-Funktionen ist, da diese als Funktionalintegralmittelwerte definiert sind. Hierbei bezeichnet

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\left[\Phi\right] e^{-S_0[\Phi]} \tag{G.10}$$

die großkanonische Zustandssumme des nicht-wechselwirkenden Systems. Die einfachen Green-Funktionen ergeben sich durch (mehrfache) Funktionalableitung von $G[J]$ nach den Quellenfeldern und Nullsetzen der Quellen gemäß der Taylor-Entwicklung

$$G\left[J\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{K_1} \cdots \int_{K_n} G^{(n)}_{K_1 \cdots K_n} J_{K_1} \cdots J_{K_n} \tag{G.11}$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten $G^{(n)}_{K_1 \cdots K_n}$ die einfachen Green-Funktionen n-ter Ordnung bezeichnen.

G.2.2 Erzeugendes Funktional der zusammenhängenden Green-Funktionen

Nicht zusammenhängende n-Punkt Green-Funktionen werden mittels der Definition des erzeugenden Funktionals

$$G\left[J\right] = e^{G_c[J]} \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{G_c\left[J\right] = lnG\left[J\right]} \tag{G.12}$$

eliminiert. Analog zu den einfachen Green-Funktionen hat auch $G_c\left[J\right]$ folgende Funktional-Taylorentwicklung

$$G_c\left[J\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{K_1} \cdots \int_{K_n} G^{(n)}_{c\, K_1 \cdots K_n} J_{K_1} \cdots J_{K_n}. \tag{G.13}$$

Damit können wir auch die zusammenhängenden Green-Funktionen durch Funktionalableitungen nach den Quellenfeldern gemäß

$$G^{(n)}_{c\, K_1 \cdots K_n} = \frac{\delta^{(n)} G_c}{\delta j_{K_n} \cdots \delta j_{K_1}} \tag{G.14}$$

erhalten.

G.2.3 Erzeugendes Funktional der irreduziblen Vertizes

Im Formalismus der exakten Renormierungsgruppe werden Integrodiffentialgleichungen abgeleitet, die das Verhalten der irreduziblen Vertexfunktionen unter Skalentransformationen beschreiben. Um die betreffenden Vertexfunktionen im Funktionalintegralformalismus zu erhalten, müssen wir eine (Funktional-) Legendretransformation des erzeugenden Funktionals $G_c[J]$ bezüglich der Quellenfelder durchführen, also eine Funktion definieren, die als Variable die Ableitung von $G_c[J]$ nach den Quellen

$$\boxed{\Phi = \frac{\delta G_c[J]}{\delta J}} \tag{G.15}$$

hat. Für jedes gegebene $G_c[J]$ lässt sich (G.15) zum Funktional $J = J[\Phi]$ invertieren und wir können so die Legendretransformation zu einem nur von Φ abhängigen Funktional explizit ausführen

$$\boxed{\begin{array}{rcl} L\left[\Phi\right] & = & (J,\Phi) - G_c[J] \\ & = & (J[\Phi],\Phi) - G_c\left[J[\Phi]\right]. \end{array}} \tag{G.16}$$

Nach Definition erhalten wir nun die Quellenfelder durch Funktionalableitung nach den Feldern

$$J = \frac{\delta L}{\delta \Phi}. \tag{G.17}$$

$L[\Phi]$ ist schon fast das gesuchte Funktional, aber wir müssen noch die freie Wirkung abziehen, damit die zweite Funktionalableitung nur die Selbstenergie ergibt. Um dies explizit zu sehen, bilden wir zunächst die 2. Funktionalableitung von $L[\Phi]$ indem wir zunächst die Kettenregel wie folgt aufschreiben und (G.17) benutzen

$$\begin{aligned}\frac{\delta}{\delta\Phi} &= \frac{\delta J}{\delta\Phi}\frac{\delta}{\delta J} = \frac{\delta}{\delta\Phi}\frac{\delta L[\Phi]}{\delta\Phi}\frac{\delta}{\delta J} \\ &= \frac{\delta^{(2)}L[\Phi]}{\delta\Phi\delta\Phi}\frac{\delta}{\delta J}. \end{aligned} \tag{G.18}$$

Bilden der Ableitung von (G.15) liefert

$$1 = \frac{\delta\Phi}{\delta\Phi} = \frac{\delta^{(2)}L[\Phi]}{\delta\Phi\delta\Phi}\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta J\delta J}. \tag{G.19}$$

Setzen wir nun die Felder gleich Null, was auch $J = 0$ impliziert, und identifizieren die 2. Ableitung von G_c als 2-Punkt Green-Funktion

$$G^{-1} = -\left.\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta J\delta J}\right|_{J=0}, \tag{G.20}$$

so folgt

$$1 = -\left.\frac{\delta^{(2)}L}{\delta\Phi\delta\Phi}\right|_{\Phi=0} G \quad \Leftrightarrow \quad G^{-1} = -\left.\frac{\delta^{(2)}L}{\delta\Phi\delta\Phi}\right|_{\Phi=0}. \tag{G.21}$$

Mittels der Dyson-Gleichung [91]

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma \tag{G.22}$$

bringen wir den freien Propagator $G_0^{-1} = -i\omega + \epsilon_{\boldsymbol{k}}$ mit der Selbstenergie Σ in Verbindung und konstruieren nun ein erzeugendes Funktional, dessen 2. Funktionalableitung bei verschwindenden Feldern gerade die Selbstenergie als irreduziblen Vertex 2. Ordnung ergibt. Mit der Subtraktion der freien Wirkung $S_0[\Phi]$ für die offensichtlich

$$\frac{\delta^{(2)}S_0[\Phi]}{\delta\Phi\delta\Phi} = -i\omega + \epsilon_{\boldsymbol{k}} = G_0^{-1} \tag{G.23}$$

gilt, erhalten wir das gesuchte erzeugende Funktional $\Gamma[\Phi]$ als

$$\boxed{\Gamma[\Phi] = L[\Phi] - S_0[\Phi]} \tag{G.24}$$

da die 2. Ableitung offensichtlich die Selbstenergie ist

$$\left.\frac{\delta^{(2)}\Gamma[\Phi]}{\delta\Phi\delta\Phi}\right|_{\Phi=0} = \left.\frac{\delta^{(2)}L[\Phi]}{\delta\Phi\delta\Phi}\right|_{\Phi=0} - \left.\frac{\delta^{(2)}S_0[\Phi]}{\delta\Phi\delta\Phi}\right|_{\Phi=0} \tag{G.25}$$

$$= -G^{-1} - G_0^{-1} = \Sigma. \tag{G.26}$$

Über die Taylor-Entwicklung, deren Koeffizienten die irreduziblen Vertexfunktionen sind, können wir nun

$$\Gamma[\Phi] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int_{K_1}\cdots\int_{K_n}\Gamma^{(n)}_{K_1\cdots K_n}\Phi_{K_1}\cdots\Phi_{K_n} \tag{G.27}$$

als erzeugendes Funktional erkennen. Insbesondere ist die Selbstenergie $\Sigma_{K\,K'} = \Gamma^{(2)}_{K\,K'}$ der 2. Koeffizient der Entwicklung.

G.3 Dyson-Schwinger Bewegungsgleichungen

Für die folgende Herleitung der Dyson-Schwinger-Bewegungsgleichungen für bosonische Felder folgen wir [133]. Zunächst stellen wir fest, dass das Integral über eine totale Funktionalableitung verschwindet.

Da physikalisch relevante Felder nur eine endliche Ausdehnung haben, verschwindet der Integrand am Rand der Integration und wir erhalten mit dem Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung:

$$0 = \int \mathcal{D}[\Phi] \frac{\delta}{\delta \Phi} e^{-S[\Phi]+(J,\Phi)} = \int \mathcal{D}[\Phi] \left(J - \frac{\delta S(\Phi)}{\delta \Phi} \right) e^{-S[\Phi]+(J,\Phi)}. \tag{G.28}$$

Nach dem Ausführen der Produktregel stellen wir fest, dass die Ableitung der Wirkung nach den Feldern eine Funktion der Felder selbst ist. Somit kann der Quellentrick wieder verwendet werden und wir erhalten nach dem Vorziehen der Ableitung vor das Funktionalintegral

$$\left(J - \frac{\delta S}{\delta \Phi} \left(\frac{\delta}{\delta J} \right) \right) \int \mathcal{D}[\Phi] e^{-S[\Phi]+(J,\Phi)} = 0. \tag{G.29}$$

Da die Zustandssumme des freien Systems nicht von den Quellen abhängt, können wir einfach mit $1/Z_0$ multiplizieren und erhalten dann gerade das erzeugende Funktional der Korrelationsfunktionen (G.9)

$$\boxed{\left(J - \frac{\delta S}{\delta \Phi} \left(\frac{\delta}{\delta J} \right) \right) G[J] = 0.} \quad \text{Dyson-Schwinger-Gleichung} \tag{G.30}$$

Für unseren Fall müssen wir nun explizit die Ableitung der Wirkung nach den Feldern durchführen. Mit (G.3) folgen dann 3 Dyson-Schwinger-Gleichungen für die 3 auftretenden Felder

$$\left(j_K + (i\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}}) \frac{\delta}{\delta \bar{j}_K} - i \int_Q \frac{\delta}{\delta \bar{j}_{K+Q}} \frac{\delta}{\delta j_Q} \right) G[J] = 0 \tag{G.31a}$$

$$\left(\bar{j}_K + (i\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}}) \frac{\delta}{\delta j_K} - i \int_Q \frac{\delta}{\delta j_{K+Q}} \frac{\delta}{\delta j_Q} \right) G[J] = 0 \tag{G.31b}$$

$$\left(j^*_K - [U_{\boldsymbol{k}}]^{-1} \frac{\delta}{\delta J_{-K}} - i \int_Q \frac{\delta}{\delta j_{Q+K}} \frac{\delta}{\delta \bar{j}_Q} \right) G[J] = 0. \tag{G.31c}$$

Mit (G.8) erhalten wir die folgenden Identitäten für die Ableitungen von $G_c[J]$ nach den Quellenfeldern, wobei es sich auf der rechten Seite um Erwartungswerte handelt.

$$\frac{\delta G_c}{\delta J_K} = \varphi_K \tag{G.32a}$$

$$\frac{\delta G_c}{\delta \bar{j}_K} = \Psi_K \tag{G.32b}$$

$$\frac{\delta G_c}{\delta j_K} = \bar{\Psi}_K. \tag{G.32c}$$

Die Definition des erzeugenden Funktionals $G_c[J]$ erlaubt es die ersten Ableitungen in (G.31) mittels

$$\frac{\delta G[J]}{\delta J} = \frac{\delta G_c[J]}{\delta J} e^{G_c[J]} \tag{G.33}$$

umzuformen, sowie die zweiten Ableitungen nach gleichem Schema durch Ableitungen des Funktionals $G_c[J]$ mit

$$\frac{\delta^{(2)} G[J]}{\delta J \delta J'} = \left(\frac{\delta^{(2)} G_c[J]}{\delta J \delta J'} + \frac{\delta G_c[J]}{\delta J} \frac{\delta G_c[J]}{\delta J'} \right) e^{G_c[J]} \tag{G.34}$$

darzustellen. Man beachte, dass J und J' Quellen zu den 3 Feldern in Φ zu beliebigen, aber festen Impulsen sind. Mit der Definition der Quellen als Ableitungen der Lagrangedichte (G.17) können wir insbesondere folgende Ableitungen des erzeugenden Funktionals der irreduziblen Vertizes berechnen.

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta \varphi_K} = \frac{\delta L}{\delta \varphi_K} - \frac{\delta S_0[J]}{\delta \varphi_K} = J^*_K - \varphi_K [U_K]^{-1} \tag{G.35a}$$

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta \Psi_K} = \bar{j}_K - (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - i\omega) \bar{\Psi}_K \tag{G.35b}$$

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta \bar{\Psi}_K} = j_K - (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - i\omega) \Psi_K. \tag{G.35c}$$

Unter Benutzen von (G.32) können wir die Ableitungen des erzeugenden Funktionals irreduzibler Green-Funktionen einsetzen und die Terme in (G.31) wiederfinden und erhalten schließlich

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{\Psi}_K} - i\int_Q \left(\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta\bar{j}_{K+Q}\delta J_Q} + \Psi_{K+Q}\varphi_Q\right) = 0 \tag{G.36a}$$

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta\Psi_K} - i\int_Q \left(\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta j_{K+Q}}\delta J_Q + \Psi_{K+Q}\varphi_Q\right) = 0 \tag{G.36b}$$

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta\varphi_K} - i\int_Q \left(\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta j_{Q+K}\delta\bar{j}_Q} + \bar{\Psi}_{Q+K}\Psi_Q\right) = 0. \tag{G.36c}$$

Die Dyson-Schwinger-Bewegungsgleichungen enthalten nur noch Ableitungen der erzeugenden Funktionale $\Gamma[J]$ und $G_c[J]$.

G.4 Invarianz der Korrelationsfunktion unter $U(1)$-Transformation

Die Ward-Identitäten verbinden Korrelationsfunktionen verschiedener Ordnungen und Felder miteinander. Ihre Herleitung beruht darauf, dass die Korrelationsfunktionen die gleichen Symmetrien wie das Modellsystem aufweisen müssen. In der Formulierung mittels erzeugender Funktionale sind die Korrelationsfunktionen beliebiger Ordnungen durch Bilden der Funktionalableitungen der erzeugenden Funktionale zu berechnen. Also müssen auch die erzeugenden Funktionale als solche invariant unter der entsprechenden Symmetrietransformation (hier $U(1)$) sein.
Schreiben wir zunächst die lokale $U(1)$-Eichtransformation für unsere Felder im Ortsraum auf, die einfach die Fouriertransformierten der Felder aus der Wirkung (G.3) bezüglich $K = (i\omega, \boldsymbol{k})$ sind [40]:

$$\Psi(X) \to \Psi'(X) = e^{i\alpha(X)}\Psi(X) \tag{G.37a}$$

$$\bar{\Psi}(X) \to \bar{\Psi}'(X) = e^{-i\alpha(X)}\bar{\Psi}(X). \tag{G.37b}$$

$X = (\boldsymbol{r}, \tau)$ ist eine Abkürzung für die Koordinaten im Imaginärzeit-Ortsraum $\alpha(X)$ eine beliebige Funktion. Das Hubbard-Stratonovitch-Feld sei invariant unter dieser Transformation:

$$\varphi(X) \to \varphi(X). \tag{G.38}$$

Bei der Durchführung der Eichtransformation stellt man fest, dass der Wechselwirkungsteil der Euklidschen Wirkung

$$S_1[\Phi] = i\int dX\,\bar{\Psi}(X)\Psi(X)\varphi(X). \tag{G.39}$$

invariant ist. Dagegen ergibt die Entwicklung des Phasenfaktors bis zur linearen Ordnung in $\alpha(X)$ einen Zusatzterm in der Gaußschen Wirkung

$$S_0[\bar{\Psi}', \Psi'] = S_0[\bar{\Psi}, \Psi] + i\int dX\,\bar{\Psi}(X)(\partial_\tau\alpha(X))\Psi(X) + i\int dX\int d^D\boldsymbol{r}'\,\bar{\Psi}(X)(\alpha(X') - \alpha(X))\epsilon(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\Psi(X'). \tag{G.40}$$

Hierbei ist $\epsilon(\boldsymbol{r}) = \int \frac{d^D\boldsymbol{k}}{(2\pi)^D}\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ die Fouriertransformierte der Dispersion. Man beachte die Notation $\int dX = \int d\tau \int d^D\boldsymbol{r}$ für ein komplettes Integral über alle Ortskoordinaten $X = (\tau, \boldsymbol{r})$ und die Benennung der Variablen $X' = (\tau, \boldsymbol{r}')$ die die gleiche Imaginärzeitkoordinate wie X hat. Setzen wir dies in das erzeugende Funktional (G.9) ein, entwickeln konsequent bis zur ersten Ordnung in $\alpha(X)$ und fordern die Invarianz, so ergibt sich

$$\begin{aligned} 0 = \frac{1}{Z_0}\int \mathcal{D}[\Phi]\, e^{S[\Phi]+(J,\Phi)} \Big[& i\int dX\,\bar{\Psi}(X)(\partial\tau\alpha(X))\Psi(X) \\ & + i\int dX\int d^D\boldsymbol{r}'\,\bar{\Psi}(X)(\alpha(X') - \alpha(X))\epsilon(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\Psi(X') + (\bar{J}, \Phi) - (\bar{\Psi}i\alpha, J)\Big]. \end{aligned} \tag{G.41}$$

Des weiteren wird diese Gleichung nun im $(i\omega, \boldsymbol{k})$-Raum dargestellt, was bei Fourier-Transformation im Wesentlichen die Ersetzungen $\int dX \to \int_K$, $\partial_\tau \to -i\omega$ sowie die entsprechenden Funktionen im K-Raum ergibt. Da $\alpha(X)$ eine beliebige Funktion ist, ist auch die entsprechende Fouriertransformierte $\alpha(Q)$

beliebig. Um diese Funktion zu eliminieren, führen wir eine Funktionalableitung nach $\alpha(Q)$ durch und benutzen den Quellentrick, indem wir Felder vor dem Exponentialfaktor $e^{(J,\Phi)}$ durch die Ableitungen nach den konjugierten Quellen ersetzen

$$\bar{\Psi} \to \frac{\delta}{\delta j} \qquad \Psi \to \frac{\delta}{\delta \bar{j}}, \tag{G.42}$$

was der Identität (G.8) entspricht. Weiterhin können wir die Funktionalableitungen nach den Quellen aus dem Funktionalintegral ziehen und erhalten mit der Definition (G.9) die Master-Ward-Identität

$$0 = \int_K \left\{ \frac{\delta^{(2)} G}{\delta \bar{j}_K \delta j_{K+Q}} (i\bar{\omega} - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + \epsilon_{\boldsymbol{k}}) + \bar{j}_{K+Q} \frac{\delta G}{\delta \bar{j}_K} - j_K \frac{\delta G}{\delta j_{K+Q}} \right\}. \tag{G.43}$$

Da Ableitungen des erzeugenden Funktionals $G[J]$ auftreten, kann man sich nun Integralgleichungen herleiten, die beliebige Green-Funktionen (n+2)-ter Ordnung mit solchen n-ter Ordnung verknüpfen, indem man n-fache Funktionalableitungen nach den Quellenfeldern ausführt und anschließend $J = 0$ setzt. Zur weiteren Vereinfachung von (G.43) formen wir die Gleichungen (G.35) nach den Quellenfeldern um, ersetzen diese in (G.43) zu

$$0 = \int_K \left\{ (i\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + \epsilon_{\boldsymbol{k}}) \frac{\delta^{(2)} G_c}{\delta \bar{j}_K \delta j_{K+Q}} + \frac{\delta \Gamma}{\delta \Psi_{K+Q}} \Psi_K - \frac{\delta \Gamma}{\delta \bar{\Psi}_K} \bar{\Psi}_{K+Q} \right\} \tag{G.44}$$

vereinfachen. Mit der Dyson-Schwinger-Gleichung (G.36c) können wir nun eine Funktionalableitung von $G_c[J]$ mit dem Frequenzfaktor $\bar{\omega}$ eliminieren und erhalten für unsere Master-Ward-Identität

$$0 = i\bar{\omega} \left(\frac{\delta \Gamma}{\delta \varphi_K} - i \int_K \bar{\Psi}_{K+Q} \Psi_K \right) + i \int_K (\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}}) \frac{\delta^{(2)} G_c}{\delta \bar{j}_K \delta J_{K+Q}} + i \int_K \left(\Psi_K \frac{\delta \Gamma}{\delta \Psi_{K+Q}} - \bar{\Psi} \frac{\delta \Gamma}{\delta \bar{\Psi}_K} \right). \tag{G.45}$$

G.4.1 Äquivalente Formulierung ohne Hubbard-Stratonovitch Feld

Im folgenden werden wir zeigen, dass diese Ward-Identität äquivalent zu den Ward-Identitäten in [23] ist, die ja verhindern, dass die Korrelationsfunktionen mit transversalen Feldern in Gaußscher Näherung (6.51) anomale Dimensionen erhalten. (Lediglich für die Korrelationsfunktion der longitudinalen Fluktuationen (6.62) gibt es keine weiteren Ward-Identitäten, die Auftreten von Singularitäten verhindern würden.)
Dazu starten wir von der Formulierung in [23], die etwas von unserer Vorgehensweise abweicht. Ohne Hubbard-Stratonovitch Transformation wurden die entsprechenden Freiheitsgrade durch ein Quellenfeld $\mu(\boldsymbol{r}, \tau) = -i \langle \phi(\boldsymbol{r}, \tau) \rangle$ sowie durch Einführung eines zusätzlichen Vektorfeldes gemäß Substitution des Impulses mit dem kanonischen Impuls ($\nabla \to i(-i\nabla - \boldsymbol{A})$) eingeführt (analog zur Formulierung der Wirkung des Modells geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld). Die funktionale Ward-Identität hat dadurch eine etwas andere Form, aber enthält nur Ableitungen eines erzeugenden Funktionals $\tilde{\Gamma}[\bar{\psi}, \psi, A_\nu]$, das von 3 verschiedenen Feldern abhängt ($A_\nu = (\mu, \boldsymbol{A})$) und durch folgende Gleichung mit unserem Funktional in Verbindung gebracht werden kann:

$$\bar{\omega} \frac{\delta \tilde{\Gamma}}{\delta \mu} = i\bar{\omega} \frac{\delta \tilde{\Gamma}}{\delta \phi^*_Q} = i\bar{\omega} \left(\frac{\delta \Gamma}{\delta \phi^*_K} - i \int_K \bar{\psi}_{K+Q} \psi_K \right). \tag{G.46}$$

Dagegen wird die Ward-Identität bei Castellani et al. im Ortsraum ($x = (\boldsymbol{r}, \tau)$) berechnet:

$$\tilde{\Gamma}_i(x) \sigma_{ij} \psi_{j0}(x) + \partial_\nu \tilde{\Gamma}_{;\nu} = 0. \qquad (3.5)$$

Hierbei bedeuten die Symbole $\tilde{\Gamma}_i(x) = \frac{\delta \tilde{\Gamma}}{\delta \psi_i(x)}$, $\tilde{\Gamma}_{;\nu}(x) = \frac{\delta \tilde{\Gamma}}{\delta A_\nu(x)}$ sowie $\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Weiterhin ist zu beachten, dass die Felder schon in longitudinalen und transversalen Anteil aufgespalten sind mit $\psi = \psi_l + i\psi_t$ und die Indizes $i, j \in \{l, t\}$. Nach der Fourier-Transformation erhalten wir mit $k_\nu = (i\omega, \boldsymbol{k})$

$$\int_K \left(\frac{\delta \tilde{\Gamma}}{\delta \psi_{t\ K+Q}} \psi_{l\ K} + \frac{\delta \tilde{\Gamma}}{\delta \psi_{l\ K}} \right) + i k_\nu \frac{\delta \tilde{\Gamma}}{\delta A_\nu} = 0. \tag{G.47}$$

Nun bringen wir die transversalen und longitudinalen Anteile der Felder mit Hilfe der Wirtinger-Ableitungen

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} - i\frac{\partial f}{\partial y}\right) \tag{G.48a}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \bar{z}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + i\frac{\partial f}{\partial y}\right) \tag{G.48b}$$

in Verbindung. Gewöhnlich sind die Ableitungen einer komplexen Funktion $f : \mathcal{C} \to \mathcal{C}$ mit der Aufspaltung der Variable in Realteil und Imaginärteil $z = x + iy$ definiert. Einfache Linearkombination ergibt die Relation

$$z\frac{\partial f}{\partial z} - \bar{z}\frac{\partial f}{\partial \bar{z}} = i\left(x\frac{\partial f}{\partial y} - y\frac{\partial f}{\partial x}\right), \tag{G.49}$$

die die Wirtinger-Ableitungen mit Ableitungen nach Real- und Imaginärteil verbindet. Mit den entsprechenden Relationen für die Funktionalableitungen lässt sich die Ward-Identität im K-Raum (G.47) umformulieren zu

$$i\int_K \left(\frac{\delta\Gamma}{\delta\psi_{K+Q}}\psi_K - \frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{\psi}_K}\bar{\psi}_{K+Q}\right) + i\bar{\omega}\frac{\delta\Gamma}{\delta\mu_Q} + \boldsymbol{q}\frac{\delta\Gamma}{\delta\boldsymbol{A}_Q} = 0. \tag{G.50}$$

In unserer Ward-Identität (G.45) treten Ableitungen von G_c nach den Quellenfeldern auf, die es nun durch Ableitungen des Funktionals $\tilde{\Gamma}$ zu ersetzen gilt. Unter Beachtung der Euklidschen Wirkung in der Formulierung von [23]

$$\begin{aligned} S\left[\bar{\psi},\psi;A_\nu\right] &= S_0\left[\bar{\psi},\psi,A_\nu\right] + S_{\text{int}}\left[\bar{\psi},\psi\right] \qquad (G.51)\\ S_0\left[\bar{\psi},\psi\right] &= \int_0^\beta d\tau \int d^D\boldsymbol{r}\left\{\bar{\psi}(\boldsymbol{r},\tau)(\partial_\tau - \mu(\boldsymbol{r},\tau))\psi(\boldsymbol{r},\tau) + \bar{\psi}(\boldsymbol{r},\tau)\frac{(-i\nabla - \boldsymbol{A})^2}{2m}\psi(\boldsymbol{r},\tau)\right\}, \end{aligned}$$

in der das zusätzliche Feld A_ν nur in der Gaußschen Wirkung vorkommt, erhalten wir mit (G.12) durch Legendretransformation das entsprechende erzeugende Funktional der irreduziblen Vertexfunktionen (vgl. (G.24))

$$\tilde{\Gamma}\left[\bar{\psi},\psi,A_\nu\right] = (J,\Phi) + G_c[J,A_\nu] - S_0[\bar{\psi},\psi,A_\nu]. \tag{G.52}$$

Wie man anhand der Wirkung (G.51) sieht, erhält man die Korrelationsfunktion durch Ableitung des erzeugenden Funktionals $\delta G_c/\delta\mu = \langle\bar{\psi}\psi\rangle$, aber man muss beachten, dass die betrachteten Felder wegen der Symmetriebrechung in unserem Modell einen endlichen Erwartungswert haben. Dieser taucht in der Euklidschen Wirkung nicht auf und muss somit dazu addiert werden, damit wir die korrekten zusammenhängenden Korrelationsfunktionen erhalten. Also gilt für die Funktionalableitung des erzeugenden Funktionals irreduzibler Vertexfunktionen

$$\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta A_0} = -\langle\bar{\psi}\psi\rangle + \bar{\psi}_0\psi_0 = -\langle\bar{\psi}\psi\rangle_{\text{connected}}. \tag{G.53}$$

Wir betrachten nun die Terme in der Master-Ward-Identität (G.45), die die kinetische Energie enthalten und benutzen

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{q}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{k}+\frac{\boldsymbol{q}}{2}}{m}\right), \tag{G.54}$$

um den Wellenvektor $\boldsymbol{q}$ aus dem Integral herauszuziehen. Vergleicht man (G.50) nun mit (G.45), so stellt man fest, dass beide identisch sind, falls

$$\left.\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\boldsymbol{A}_K}\right|_{A=0} = -\int_K \left(\frac{\boldsymbol{k}+\frac{\boldsymbol{q}}{2}}{m}\right)\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta\bar{j}_K\delta j_{K+Q}} \tag{G.55}$$

gilt. Für den Beweis von (G.55) müssen wir lediglich die Funktionalableitung an allen Termen auf der rechten Seite von (G.52) ausführen. Dazu schreiben wir zunächst die Gaußsche Wirkung im Impulsraum

auf, die man durch Fourier-Transformation ($\psi(\boldsymbol{r},\tau) = \int_K e^{i(\boldsymbol{k}\cdot r-\omega\tau)}\psi_K \quad , \mu(\boldsymbol{r},\tau) = \int_K e^{i(\boldsymbol{k}\cdot r-\omega\tau)}\mu_K$, $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\tau) = \int_K e^{i(\boldsymbol{k}\cdot r-\omega\tau)}\boldsymbol{A}_K$) erhält:

$$S_0[\bar{\psi},\psi] = \int_K\int_Q \bar{\psi}_{K+Q}\tilde{S}_{K,Q}\psi_K \tag{G.56}$$

$$\tilde{S}_{K,Q} = \delta(Q)(-i\omega+\frac{\boldsymbol{k}^2}{2m}) - \mu_Q + \frac{(\boldsymbol{A}^2)_Q}{2m} - \frac{\boldsymbol{q}}{2m}\cdot\boldsymbol{A}_K - \frac{\boldsymbol{A}_Q}{m}\cdot\boldsymbol{k} \tag{G.57}$$

mit den Abkürzungen $(\boldsymbol{A}^2)_Q = \int_{Q'}\boldsymbol{A}_{Q-Q'}\cdot\boldsymbol{A}_{Q'}$ für die Quellenfelddichte und $\rho_Q = \int_K \bar{\psi}_{K-Q}\psi_K$ für die Felddichte. Nach Definition ist die Funktionalableitung der Gaußschen Wirkung bis auf ein Vorzeichen gerade das entsprechende konjugierte Feld

$$\frac{\delta S_0}{\delta \boldsymbol{A}_Q} = -\int_K\left(\frac{\boldsymbol{k}+\frac{\boldsymbol{q}}{2}}{m}\right)\bar{\psi}_{K+Q}\psi_K + \frac{1}{m}\int_K \rho_K\boldsymbol{A}_{-Q-K} = -\boldsymbol{J}_{-Q}. \tag{G.58}$$

Einschieben einer zusätzlichen Integration mittels $f(0,Q) = \int_{K'}\delta(K')f(K',Q)$ und Verschieben der Integrationsvariablen liefert dann

$$\frac{\delta S_0}{\delta \boldsymbol{A}_Q} = -\frac{1}{m}\int_K\int_{K'}[\delta(K-K')\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{A}_{K-K'}]\,\bar{\psi}_{K'+\frac{Q}{2}}\psi_{K-\frac{Q}{2}}. \tag{G.59}$$

Damit hebt nun die rechte Seite von (G.59) gerade die nicht-zusammenhängenden Terme der Korrelationsfunktion weg und wir erhalten die volle zusammenhängende Korrelationsfunktion, die ja gerade die Funktionalableitung von G_c ist

$$\begin{aligned}\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\boldsymbol{A}_Q} &= -\frac{1}{m}\int_K\int_{K'}[\delta(K-K')\boldsymbol{k} - A_{K-K'}]\left\langle\bar{\psi}_{K'+\frac{Q}{2}}\psi_{K-\frac{Q}{2}}\right\rangle_{\text{connected}} \\ &= -\frac{1}{m}\int_K\int_{K'}[\delta(K-K')\boldsymbol{k} - A_{K-K'}]\,\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta\bar{j}_{K-\frac{Q}{2}}\delta j_{K'+\frac{Q}{2}}}.\end{aligned} \tag{G.60}$$

Für verschwindendes $\boldsymbol{A}_K = 0$ erhalten wir (G.55), können dies in (G.45) ersetzen und erhalten damit gerade die Ward-Identität in der Formulierung (G.50). Mit den Abkürzungen

$$\left.\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\mu_Q}\right|_{\mu=0} = \Gamma^0_Q[\bar{\psi},\psi] = -\int_K\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta\bar{j}_{K-\frac{Q}{2}}\delta j_{K+\frac{Q}{2}}} \tag{G.61}$$

$$\left.\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\boldsymbol{A}_Q}\right|_{\boldsymbol{A}=0} = \boldsymbol{\Gamma}_Q[\bar{\psi},\psi] = -\int_K\frac{\boldsymbol{k}}{m}\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta\bar{j}_{K-\frac{Q}{2}}\delta j_{K+\frac{Q}{2}}} \tag{G.62}$$

für die Vertexfunktionen schreiben wir die Ward-Identität zu

$$\boxed{0 = i\bar{\omega}\Gamma^0_Q[\bar{\psi},\psi] - \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\Gamma}_Q[\bar{\psi},\psi] - \int_K\left(\psi_k\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\psi_{K+Q}} - \bar{\psi}_{K+Q}\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\bar{\psi}_K}\right)} \tag{G.63}$$

um.

G.4.2 Formulierung mittels hermiteschen Feldern

Die physikalisch relevanten Freiheitsgrade des wechselwirkenden Magnonengases werden am besten durch die in (6.30) eingeführte Zerlegung des bosonischen Feldoperators in 2 hermitesche Felder beschrieben. Daher ist es nun sinnvoll auch unsere Ward-Identität durch reelle Felder darzustellen. Anders als in (6.30) legen wir hier der Einfachheit halber keinen Wert auf sinnvolle Vorfaktoren und zerlegen einfach in 2 hermitesche Felder ψ_{iK} mittels

$$\psi_K = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1K} + i\psi_{2K}) \tag{G.64a}$$

$$\bar{\psi}_K = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1-K} - i\psi_{2-K})\,. \tag{G.64b}$$

Da es sich im Ortsraum um reelle Felder handelt, folgt sofort $\bar{\psi}_{iK} = \psi_{i-K}$. Man beachte, dass $\psi_{1K} \sim \Pi_K$ das transversale Feld darstellt, während $\psi_{2K} \sim \Phi_K$ das longitudinale Feld repräsentiert (siehe Zerlegung in (6.30)). Auch für die Quellenfelder müssen wir eine entsprechende Zerlegung

$$j_K = \frac{1}{\sqrt{2}}(j_{1K} + i\, j_{2K}) \tag{G.65a}$$

$$\bar{j}_K = \frac{1}{\sqrt{2}}(j_{1-K} - i\, j_{2-K}) \tag{G.65b}$$

definieren, womit dann unser Skalarprodukt

$$(\Phi, J) = \int_{K,i} j_{i-K}\psi_{iK} \tag{G.66}$$

lautet mit den Abkürzungen $\Phi = (\psi_{1K}, \psi_{2K})$, $J = (j_{1K}, j_{2K})$. Die Definition der erzeugenden Funktionale $G[J]$, $G_c[J]$ sowie $\tilde{\Gamma}[\Phi]$ bleibt gleich, wenn man von den anderen Variablenbezeichnungen absieht. Die explizite Form der Euklidschen Wirkung ist nun nicht mehr diagonal in den hermiteschen Feldern, was analog zu (6.45)

$$S_0[\psi_1, \psi_2] = \frac{1}{2}\int_K (\epsilon_{\boldsymbol{k}}(\psi_{1-K}\psi_{1K} + \psi_{2-K}\psi_{2K}) + \omega(\psi_{1-K}\psi_{2K} - \psi_{2-K}\psi_{1K})) \tag{G.67}$$

lautet. Einfache Ableitung ergibt

$$\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\psi_{1K}} = j_{1-K} - \epsilon_{\boldsymbol{k}}\psi_{1-K} + \omega\psi_{2-K} \tag{G.68}$$

und die entsprechende Relation mit Ersetzung $1 \leftrightarrow 2$. Mit den Ableitungen nach den komplexen Feldern bringt man die Ableitungen des erzeugenden Funktionals irreduzibler Vertexfunktionen unter Verwendung von (G.65) und (G.68) in Verbindung.

$$\left.\begin{array}{c} \dfrac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\psi_K} \\ \dfrac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\bar{\psi}_K} \end{array}\right\} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\psi_{1K}} \mp i\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\psi_{2K}}\right). \tag{G.69}$$

Damit können wir (G.63) auf reelle Felder übertragen und erhalten

$$\int_K \left(\psi_{1K-\frac{Q}{2}}\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\psi_{1K+\frac{Q}{2}}} - \psi_{2K-\frac{Q}{2}}\frac{\delta\tilde{\Gamma}}{\delta\psi_{1K+\frac{Q}{2}}}\right) + \bar{\omega}\Gamma^0_Q[\psi_1, \psi_2] - \frac{1}{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\Gamma}_Q[\psi_1, \psi_2] = 0 \tag{G.70}$$

mit den Vertizes Γ^ν_Q, die wir auch durch Integrale über zusammenhängende Korrelationsfunktionen der hermiteschen Felder darstellen können.

$$\Gamma^0_Q[\psi_1, \psi_2] = -\frac{1}{2}\int_K \left(\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta j_{1-K+\frac{Q}{2}}\delta j_{1K+\frac{Q}{2}}} + \frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta j_{2-K+\frac{Q}{2}}\delta j_{2K+\frac{Q}{2}}}\right) \tag{G.71a}$$

$$\boldsymbol{\Gamma}_Q = -\frac{1}{i}\int_K \frac{\boldsymbol{k}}{m}\frac{\delta^{(2)}G_c}{\delta j_{1-K+\frac{Q}{2}}\delta j_{2K+\frac{Q}{2}}}. \tag{G.71b}$$

Man beachte, dass sich in die Frequenzkomponente (G.71a) nur normale Korrelationsfunktionen eingehen und sich Imaginärteile wegheben, während der Impulsanteil (G.71b) rein imaginär ist und nur Korrelationsfunktionen zwischen longitudinalen und transversalen Feldern eingehen. Insgesamt enthält dann (G.70) nur reele Terme.

Literatur

[1] W. Gilbert, *De Magnete*, Transl. by P. F. Mottelay (Dover, New York (1958))

[2] E. Ising, Z. Physik **31**, 253 (1925)

[3] H. Bethe, Z. Physik **71**, 205 (1931)

[4] J. G. Bednorz, K. A. Müller, Z. Physik B **64**, 189 (1986)

[5] S. Chakravarty, *Magnetic Properties of* La_2CuO_4, (Addison-Weseley, Redwood City, Calif. (1990))

[6] E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991)

[7] P. Horsch, W. von der Linden, Z. Phys. — Condensed Matter **72**, 181 (1988)

[8] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Festkörperphysik* (Oldenbourg Verlag, München (2001))

[9] P. Kopietz, *Einführung in die Festkörpertheorie II* (Vorlesung, Frankfurt (Main), SS 2007)

[10] H. C. Krahl, C. Wetterich, cond-mat/0608667v1

[11] S. Chakravarty, B. I. Halperin, D. Nelson, Phys. Rev. Lett. **60**, 1057 (1988)

[12] D. P. Arovas, A. Auerbach, Phys. Rev. B **38** (1988)

[13] P. Kopietz, *Low Dimensional Quantum Magnetism and Applications to High-Temperature Superconductors* (PhD thesis, University of California Los Angeles (1990))

[14] P. Kopietz, Phys. Rev. B, **41**, 9228 (1990)

[15] M. Kulic, *Magnetic Superconductors* (Vorlesung, Universität Frankfurt (Main), SS 2005)

[16] A. Buzdin, M. Kulic, *Magnetic Superconductors* (John Wiley & Sons Inc. (2007))

[17] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen VanDau, F. Petroff, Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988)

[18] S. S. Parkin, G. G. Li, D. J. Smith, Appl. Phys. Lett **58**, 2710 (1991)

[19] `http://www.hitachigst.com/hdd/research/recording_head/pr/index.html`
`http://de.wikipedia.org/wiki/Perpendicular_Recording`

R. Wood, IEEE Transactions on Magnetics **36**,36 (2000), K. Nakamoto et al. IEEE Transactions on Magnetics **40**, 290 (2004)

[20] R. Scheuerlein et al. Solid-State Circuits Conference 2000, Digest of Technical Papers, ISCC, 2000 IEEE International, 128 (2000). W. Reohr et al., IEE Circuits and Devices Magazine **218**, 17 (2002). Y. Lu et al., United States Patent No.: US 6975555 B2 (2005)

[21] S. V. Maleyev, Phys. Rev. Lett. **85**, 3281 (2000)

[22] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle, Phys. Rev. Lett., **75**, 3969 (1995)

[23] C. Castellani, C. Di Castro, F. Pistolesi, G. C. Strinati, Phys. Rev. Lett. **78**, 1612 (1997)

[24] A. Kreisel, N. Hasselmann, P. Kopietz, Phys. Rev. Lett. **98**, 067203 (2007)

[25] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen* (Springer, Berlin (2002))

[26] Daniel C. Mattis, *The Theory of Magnetism made simple: An Introduction to Physical Concepts and to Some Usefull Mathematical Methods* (World Scientific, Singapore (2006))

[27] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (Oldenbourg, München (2006))

[28] P. W. Anderson, Phys. Rev. **79**, 350 (1950)

[29] P. W. Anderson, Phys. Rev. **115**, 2 (1959)

[30] V. J. Emery, Phys. Rev. B **14**, 2989 (1976)

[31] A. P. Ramirez, J. Phys.: Cond. Mat. **9**, 8171 (1997)

[32] G. L. Trigg, *Encyclopedia of Applied Physics, Volume 21* (Wiley-VCH, Weinheim (2004))

[33] S. Jin et. al., Science **264**, 413 (1994)

[34] D. Kumar, R. Kalyanaramman, J. Narayen, D. K. Christen, *Giant Magnetoresistance Phenomenon in Laser Ablated La-Y-Ga-Mn-O Thin Films* in R. Singh et. al. (Editors) *Advances Laser Processing of Materials-Fundamentals ans Applications*, MRS Symposium Proceedings Vol 397, Materials Research Society, Pittsburgh (1996)

[35] S. Blundell, *Magnetism in condensed Matter* (Oxford University Press, Oxford (2001))

[36] G. L. Trigg, *Encyclopedia of Applied Physics, Volume 15* (Wiley-VCH, Weinheim (2004))

[37] S. A. Solin, T. Thio, D. R. Hines, J. J. Heremans, Science **289**, 1530 (2000)

[38] A. L. Fetter, J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York (1971))

[39] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik* (Springer, Berlin (2004))

[40] F. Schütz, *Aspects of strong correlations in low dimensions*, (Dissertation, Universität Frankfurt (Main) (2005))

[41] M. E. Zhitomirsky, A. L. Chernyshev, Phys. Rev. Lett. **82**, 4536 (1999)

[42] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217 (1956)

[43] A. B. Harris, D. Kumar, B. I. Halperin, P. C. Hohenberg, Phys. Rev. B, **3**, 961 (1971)

[44] P. W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952)

[45] H. Barentzen, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 669 (1998)

[46] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1230 (1956)

[47] T. Oguchi, Phys. Rev. **117**, 117 (1960)

[48] N. D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966)

[49] P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967)

[50] D. Ioffe, S. Shlosman, Y. Velenik, Commun. Math. Phys. **226**, 433 (2002)

[51] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer, New York (1994))

[52] R. Kubo, Phys. Rev **87**, 568 (1952)

[53] G. E. Castilla, S. Chakravarty, Phys. Rev. B **43**, 13687 (1991)

[54] J.-I. Igarashi, A. Watabe, Phys. Rev. B **43**, 13456 (1991)

[55] J.-I. Igarashi, Phys. Rev. B **46**, 10763 (1992)

[56] J.-I. Igarashi, T. Nagoao, Phys. Rev. B **72**, 014403 (2005)

[57] I. Spremo, *Spin-Wave Calculations for Low-Dimensional Magnets* (Dissertation, Universität Frankfurt (Main) (2006))

[58] P. M. Chaikin, T.C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge University Press,Cambridge (1995)

[59] W. Petry, J. Neuhaus, Physik Journal **6** Nr. 7 , 31 (2007)

[60] S. W. Lovesey, *Theory of neutron scattering from condensed matter*, Volume 2, (Oxford Science Publications, Oxford (1984))

[61] W. Marshall, S. W. Lovesey, *Theory of Thermal Neutron Scattering, The Use of Neutrons for the Investigation of Condensed Matter*, (Oxford Universty Press, Oxford (1971))

[62] P. Kopietz, *Quantentheorie des Magnetismus* (Vorlesung, Göttingen, WS 1998/1999)

[63] B. Kleine, *Magnetische Ordnung auf frustrierten Gittern* (Cuviller Verlag, Göttingen (1995))

[64] R. H. Parmenter, Phys. Rev. B **32**, 317 (1985)

[65] T. Holstein, H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940)

[66] S. V. Maleev, Zh. Eksp. Thero. fiz. **30**, 1010 (1957) [Sov. Phys. JETP **64** 654 (1958)]

[67] T. Villain, J. de Phys. **35**, 27 (1975)

[68] U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop (Editors), *Lecture Notes in Physics: Quantum Magnetism* (Springer, Berlin, Heidelberg (2004))

[69] F. D. M. Haldane, Phys. Lett **93A**, 464 (1983); F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett **50**, 1153 (1983)

[70] E. Fradkin, M. Stone, Phys. Rev. B **38**, 7215 (1988)

[71] V. I. Berlinicher, J. da Providência, Annals of Physics **298**, 186 (2002)

[72] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge Univ. Press, Cambridge (2001))

[73] N. Hasselmann, P. Kopietz, Europhys. Lett. **74**, 1067 (2006)

[74] E. Brézin, J. Zinn-Justin, Phys. Rev. Lett. **36**, 691 (1976)

[75] A. V. Syromyatnikov, S. V. Maleyev, Phys. Rev. B, **65**, 012401 (2001)

[76] A. S. Ivanov, P. Bourges, D. Petitgrand, Physica A **259-261**, 879 (1999)

[77] C. M. Canali, S. M. Girvin, M. Wallin, Phys. Rev. B **45**, 10131 (1992)

[78] B. Bourges, H. Casalta, A. S. Ivanov, D. Petitgrand, Phys. Rev. Lett. **79**, 4906 (1997)

[79] C. P. Hofmann, Phys. Rev. B **60**, 388 (1999)

[80] N. Hasselmann, F. Schütz, I. Spremo, P. Kopietz, C.R. Chimie **10**, 60 (2007)

[81] D. Petitgrand, S. V. Maleyev, P. Bourges, A. S. Ivanov, Phys. Rev. B **59**, 1079 (1999)

[82] S. T. Belyaev, Sov. Phys. JETP **7**, 289 (1958); **7**, 299 (1958)

[83] R. P. Singth, Phys. Rev. B, **39**, 9760 (1989)

[84] Z. Weihong, J. Otima, C. J. Hamer, Phys. Rev. B **43**, 8321 (1991)

[85] S. R. Chinn, R. W. Davies, H. J. Zeiger, Phys. Rev. B **4**, 4017 (1971)

[86] B. Kleine, G. S. Uhrig, E. Mülle-Hartmann, Europhys. Lett. **31**, 37 (1995)

[87] A. I. Akhiezer, V. G. Baryakhtar, S. V. Peletminskii, *Spin Waves* (North-Holland, Amsterdam (1968))

[88] T. Gollisch, C. Wetterich, Phys. Rev. Lett., **86**, 1 (2001)

[89] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism* (World Scientific Publication, Singapore (2003))

[90] W. Fischer, I. Lieb, *Funktionentheorie* (Friedrich Vieweg & Sohn, Braunschweig, Wiesbaden (1988))

[91] R. D. Mattuck, *A guide to Feynman diagramms in the many-body problem* (McGraw-Hill, London (1967))

[92] R. M. Ziff, G. E. Uhlenbeck, M. Kac, *The ideal Bose-Einstein gas, revisited*, Phys. Reports **32**, 169 (North-Holland, Amsterdam (1977))

[93] T. Nikuni, M. Oshikawa, A. Oosawa, H. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **84**, 5868 (2000); R. Coldea, D. A. Tennant, K. Habicht, P. Smeibidl, C. Woltzers, Z. Tylczynski, Phys. Rev. Lett. **88**, 137203 (2002); M. Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. **89**, 077203 (2002); T. M. Rice, Science **298**, 760 (2002); Ch. Rüegg, N. Cavadini, A. Furrer, H. U. Güdel, K. Krämer, H. Mutka, A. Wildes, K. Habicht, P. Vorderwisch, Nature **423**, 62 (2003); V. S. Zapf, D. Zocco, B. R. Hansen, M. Jaime, N. Harrison, C. D. Batista, M. Kenzelmann, C. Niedermayer, A. Lacerda, A. Paduan-Filho, Phys. Rev. Lett. **96**, 077204 (2006)

[94] T. Radu, H. Wilhelm, V. Yushankhai, D. Kovrizhin, R. Coldea, Z. Tylczynski, T. Lühmann, F. Steglich, Phys. Rev. Lett. **95**, 127202 (2005)

[95] S. O. Demokritov *et al.*, Nature **443**, 430 (2006)

[96] P. R. Hammar, D. C. Dender, D. H. Reich, A. S. Albrecht, C. P. Landee, J. Appl. Phys. **81**, 4615 (1997)

[97] I. Spremo, F. Schütz, P. Kopietz, V. Pashchenko, B. Wolf, M. Lang, J. W. Bats, C. Hu, M. U. Schmidt, Phys. Rev. B **72**, 174429 (2005)

[98] A. Sinner, F. Schütz, P. Kopietz, Phys. Rev. A **74**, 023608 (2006)

[99] T. Matsubara, H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. **16**, 569 (1956)

[100] E. G. Batyev, L. S. Braginskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **87**, 1361 (1984) [Sov. Phys. JETP **60**, 781 (1984)]

[101] E. G. Batyev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **89**, 308 (1985) [Sov. Phys. JETP **62**, 173 (1985)]

[102] S. Gluzman, Z. Phys. B **90**, 313 (1993)

[103] I. Affleck, Phys. Rev. B **41**, 6697 (1990); *ibid.* **43**, 3215 (1991)

[104] P. B. Weichman, Phys. Rev. B **38**, 8739 (1988)

[105] S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari, Phys. Rev. B **46**, 6374 (1992)

[106] F. Pistolesi, C. Castellani, C. Di Castro, G. C. Strinati, Phys. Rev. B **69**, 024513 (2004)

[107] N. Dupuis, K. Sengupta, cont-mat/0707.0362v1

[108] C. Wetterich, cond-mat/0707.1661v1

[109] S. Chakravarty, B. I. Halperin, D. Nelson, Phys. Rev. B **39**, 2344 (1989)

[110] V. N. Popov, *Functional Integrals and Collective Excitations* (Cambridge University Press, Cambridge (1987))

[111] M. E. Zhitomirsky, T. Nikuni, Phys. Rev. B **57**, 5013 (1998)

[112] J. W. Negele, H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley, Redwood City, California (1987))

[113] P. Kopietz, *Theorie der der quantenmechanischen Vielteilchensysteme II* (Vorlesung, Frankfurt (Main), SS 2004)

[114] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products* (Academic Press, San Diego (1994))

[115] A. Z. Patashinskii, V. L. Pokrovskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **64**, 1445 (1973) [Sov. Phys. JETP **37**, 733 (1973)]

[116] S. Chakravarty, Phys. Rev. Lett. **66**, 481 (1991)

[117] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, Phys. Rev. Lett. **80**, 5040 (1999)

[118] S. Sachdev, Phys. Rev. B **59**, 14054 (1999)

[119] W. Zwerger, Phys. Rev. Lett. **92**, 027203 (2004)

[120] R. Kubo, *The Fluctuation-Dissipation Theorem*, Rep. Prog. Phys. **29**, 255 (1966)

[121] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, *Stastistical Physics II, Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Springer, Berlin (1991))

[122] E. M. Lifschitz, L. P. Pitajewski, *Lehrbuch der theoretischen Physik: Band IX, Statistische Physik Teil 2* (Akademie-Verlag, Berlin (1980))

[123] N. Hasselmann, private Kommunikation

[124] V. I. Yukalov, H. Kleinert, Phys. Rev. A, **73**, 063612 (2006)

[125] Z. Nazario, D. I. Santiago, cond-mat/0611266v2, Z. Nazario, D. I. Santiago, cond-mat/0611383v1, Z. Nazario, D. I. Santiago, cond-mat/0606386v2

[126] G. Aeppli *et al.*, Phys. Rev. Lett. **62**, 2052 (1989)

[127] F. Sauli, in Vorbereitung.

[128] M Takahashi, Prog. Theo. Phys. Supp. **87** (1986)

[129] P. Kopietz, *Theorie der der quantenmechanischen Vielteilchensysteme I* (Vorlesung, Frankfurt (Main), WS 2003/2004)

[130] F. Schütz, L. Bartosch, P. Kopietz, Phys. Rev. B, **72**, 035107 (2005)

[131] P. Kopietz, *Bosonization of Interacting Fermions in Arbitrary Dimensions* (Springer, Berlin (1997))

[132] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York (1996))

[133] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford (2003))

[134] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie* (Springer, Berlin (2005))

Erklärung

Ich versichere hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst, keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet und sämtliche Stellen, die benutzten Werken in Wortlaut oder dem Sinne nach entnommen sind, mit Quellen- bzw. Herkunftsangaben kenntlich gemacht habe.

Frankfurt, den 17.09.2007

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde zwar von mir selbst angefertigt, wie es auch die Prüfungsordnung verlangt, aber sie wäre ohne das Zutun vieler anderer Personen nicht in dieser Form entstanden. Daher möchte ich mich bei allen bedanken, die direkt oder indirekt daran mitgewirkt haben:

Zunächst sei einmal meinem Betreuer Prof. Peter Kopietz für die Einführung in das Thema sowie der zahlreichen Hilfestellungen bei Problemen gedankt. Mit seiner physikalischen Intuition sorgt er stets dafür, dass die Ergebnisse auf das Wesentliche reduziert werden und sich die Physik nicht hinter komplizierten Formeln versteckt.

Bedanken möchte ich mich auch bei Dr. Nils Hasselmann, der neben Herrn Kopietz als Mitautor an der gemeinsamen Veröffentlichung mitgewirkt hat. Er hat immer ein offenes Ohr für kleine oder größere Fragen und nimmt sich stets Zeit für Diskussionen.

Dank gebührt auch Francesca Sauli für die Zusammenarbeit bei den Berechnungen zum Antiferromagneten im Magnetfeld sowie für das Korrekturlesen samt wertvoller Verbesserungsvorschlägen.

Ebenso bedanke ich mich bei meinem Zimmernachbarn Nils Lerch, der mich mein ganzes Studium begleitete und oft zur Lösung von Problemen beigetragen hat. Die häufigen oft auch privaten Diskussionen habe ich stets genossen.

Besonderen Dank bringe ich auch den Administratoren am ITP David Roosen, Gregor Kaczor, Nils Lerch und Francesca Sauli entgegen. Die Aufgabenverteilung war stets kollegial und besonders in den letzten Monaten vor Abgabe dieser Arbeit wurde ich stark entlastet.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meinen Eltern und meiner Familie bedanken, die mir das Studium ermöglichten, mich stets unterstützen und mit Rat und Tat zur Seite stehen.