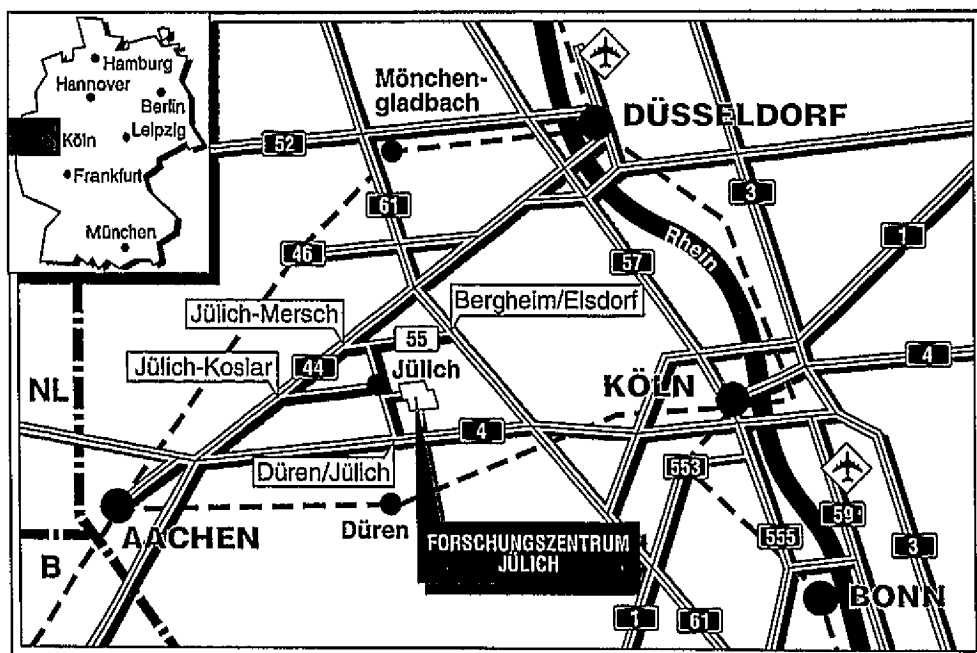


Institut für Festkörperforschung

**Entwicklung eines effizienten
Monte-Carlo-Verfahrens
zur Behandlung korrelierter
Fermionensysteme**

Martin Ulmke



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2417

ISSN 0366-0885

Institut für Festkörperforschung Jül-2417

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
Postfach 19 13 · D-5170 Jülich · Bundesrepublik Deutschland
Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

Entwicklung eines effizienten Monte-Carlo-Verfahrens zur Behandlung korrelierter Fermionensysteme

Martin Ulmke

Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung	1
1.1.	Korrelierte Fermionen	1
1.2.	Problemstellung	3
2.	Formalismus des Monte-Carlo-Verfahrens	5
2.1.	Monte-Carlo-Methoden	5
2.2.	Pfadintegral-Darstellung	6
2.3.	Funktional-Integral-Formalismus	8
2.4.	Berechnung der statistischen Gewichte	12
3.	Bestimmung der Observablen	15
3.1.	Gleichzeitige Observable	15
3.2.	Zeitabhängige Observable	18
4.	Testläufe	20
4.1.	Eindimensionale Systeme	20
4.1.1.	Abhängigkeit vom Diskretisierungsparameter	20
4.1.2.	Vergleich mit exakter Diagonalisierung	22
4.1.3.	Abhängigkeit von der Systemgröße	25
4.2.	Zweidimensionale Systeme	26
4.3.	Dreidimensionale Systeme	32
5.	Numerische Instabilitäten	35
6.	Steigerung der Effizienz	38
6.1.	Reduktion von Matrixmultiplikationen	38
6.2.	Beschleunigung der Matrixmultiplikationen	41

7.	Das eindimensionale Hubbardmodell	44
7.1.	Exakte Resultate	44
7.2.	Ergebnisse aus RG-Rechnungen	45
7.3.	Ergebnisse aus Variationsrechnungen	46
7.4.	Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen	47
7.4.1.	Definitionen und einfache Zusammenhänge	47
7.4.2.	Spin-Spin-Korrelationsfunktion	49
7.4.2.1.	Halbe Bandfüllung	49
7.4.2.2.	Viertel Bandfüllung	50
7.4.3.	Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion	57
7.4.3.1.	Halbe Bandfüllung	57
7.4.3.2.	Viertel Bandfüllung	57
7.4.4.	Loch-Loch- und Doppeltbesetzungs-KF	61
7.4.4.1.	Halbe Bandfüllung	61
7.4.4.2.	Viertel Bandfüllung	61
7.4.5.	Cooperpaar-Korrelationsfunktion	63
7.4.6.	Langreichweitiges Verhalten für verschiedene Bandfüllungen	65
7.4.7.	Impulsverteilung	68
8.	Zusammenfassung	70
	Literaturverzeichnis	73
	Programmbeschreibung	
	Fortran-Quelltext des Programms	

1. Einleitung

1.1. Korrelierte Fermionen

Korrelationseffekte spielen eine wichtige Rolle in fermionischen Vielteilchensystemen. Selbst ohne Wechselwirkung zwischen den Teilchen führt das Pauliprinzip zu räumlichen Korrelationen. Wechselwirkungen, insbesondere kurzreichweitige, verstärken diese Effekte. In vielen Fällen versagen daher Einteilchenmodelle, bei denen ein Teilchen im mittleren Feld vieler anderer Teilchen betrachtet wird (Hartree-Fock-Näherung). So sind z.B. für den Magnetismus in Metallen vor allem die stark lokalisierten Elektronen in den d-Bändern verantwortlich. Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen ihnen ist wegen des geringen Überlapps der Wellenfunktionen und der starken Abschirmung durch die s- und p-Elektronen ebenfalls quasi lokal, weshalb die Korrelationseffekte eine entscheidende Bedeutung erlangen. Das wohl einfachste Modell zur Beschreibung korrelierter Fermionen ist das *Hubbardmodell*¹. Bei diesem werden statt der d-Elektronen zur Vereinfachung s-Elektronen mit nur zwei Zuständen pro Orbital (Spin up ($\uparrow$) und Spin down ($\downarrow$)) betrachtet. Im Formalismus der 2. Quantisierung ist dann der Wechselwirkungsanteil des Hamiltonoperators:

$$H_W = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} V(ijkl) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} c_{k\sigma} \quad ,$$
$$V(ijkl) = e^2 \int \frac{\Phi^*(x - R_i) \Phi^*(x' - R_j) \Phi(x' - R_l) \Phi(x - R_k)}{|x - x'|} dx dx' \quad . \quad (1.1)$$

$c_{i\sigma}$ bzw. $c_{i\sigma}^\dagger$ ist der Vernichter bzw. Erzeuger des *Wannierzustands* $\Phi(x - R_i)$ mit Spinzustand σ auf dem Gitterplatz i . Wegen der starken Lokalisierung der Wechselwirkung wird als starke Einschränkung in (1.1) $V(iiii) = U$ und sonst $V(ijkl) = 0$ gesetzt, d.h. es werden nur *on-site*-Wechselwirkungen zugelassen. Damit wird der Wechselwirkungsanteil

$$H_W = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1.2)$$

mit dem "Teilchenzähler" $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$. Der Term für die kinetische Energie lautet in der Ortsdarstellung:

$$H_K = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad . \quad (1.3)$$

Meistens werden nur Übergänge zwischen Nächsten-Nachbar-Plätzen zugelassen, und der "hopping"-Parameter wird konstant zu $-t$ gewählt (*nearest-neighbor hopping*). Der Hamiltonian des Hubbardmodells ist also insgesamt:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad . \quad (1.4)$$

(Dabei steht " $\langle \rangle$ " für Paare nächster Nachbarn.) Man nimmt an, daß das Hubbardmodell und seine Erweiterungen geeignet sind, wichtige Eigenschaften von Elektronensystemen mit engen Energiebändern und daraus hervorgehende kollektive Phänomene wie Magnetisierung, Isolator-Metall-Übergang, Supraleitung u.a. zu beschreiben. Außerdem findet es Anwendung als Modell für festes und flüssiges ^3He und ist Bestandteil des Andersonmodells für schwere Fermionen.

Obwohl das Modell eine sehr einfache Form besitzt, ist nur für den eindimensionalen Fall die exakte Lösung des Grundzustandes bekannt². Der *Bethe-Ansatz* von Lieb und Wu liefert das Energiespektrum und andere Größen wie das chemische Potential und die magnetische Suszeptibilität, macht aber keine Aussagen über Korrelationsfunktionen. Lieb und Wu zeigten, daß das eindimensionale Hubbardmodell bei $U > 0$ für keinen Wert der Elektronendichte einen Metall-Isolator-Übergang aufweist. Exakte Diagonalisierungen wurden bei kleinen Systemen (bis zu 12 Gitterplätzen) sowohl für den Grundzustand als auch bei endlichen Temperaturen durchgeführt^{5,6}.

In höheren Dimensionen wurden verschiedene Näherungsmethoden zur Untersuchung des Hubbardmodells herangezogen, so z.B. Mean-Field-Theorien, Variations- und Störungsrechnungen u.a.. Die Mean-Field-Theorien liefern wegen der starken Korrelationseffekte i.a. keine guten Ergebnisse, den Störungsrechnungen fehlen außer im Grenzfall schwacher Wechselwirkung "kleine" Entwicklungsparameter. Variationsrechnungen sind sehr schwierig durchzuführen. Die exakte Auswertung der Gutzwiller-Variationswellenfunktion gelang im eindimensionalen

Fall⁷; die Korrelationsfunktionen, insbesondere die Spin-Spin-Korrelation, stehen zumindest für den Fall $\frac{t}{U} \rightarrow 0$ in sehr guter Übereinstimmung mit numerischen und exakten Ergebnissen. Die Variationsenergien weisen allerdings z.T. relativ große Abweichungen von den exakten Resultaten auf. In dem Grenzfall $\frac{t}{U} \rightarrow 0$ läßt sich (1.4) im Fall des halbgefüllten Bandes ($n \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle = 1$) in das antiferromagnetische *Heisenbergmodell* transformieren:

$$H_{AFHS} = J \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{s}_i \vec{s}_j - \frac{1}{4}) \quad (1.5)$$

Dabei ist $J = \frac{4t^2}{U}$, $\vec{s}_i$ sind Heisenbergspins.

Bis heute liegen also nicht sehr viele gesicherte Erkenntnisse über die Eigenschaften des Hubbardmodells vor. Andererseits hat das Interesse an korrelierten Fermionen vor allem durch die Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleitung⁸ stark zugenommen. Man hofft, durch das Studium des Hubbardmodells und seiner Erweiterungen (mehrere Bänder, Nächste-Nachbar-Abstoßung u.a.) Erkenntnisse über den Paarungsmechanismus von Cooper-Paaren zu erlangen.⁹

1.2. Problemstellung

Die Untersuchung endlicher Systeme ist ein wichtiger Ansatzpunkt zur Bestimmung der Eigenschaften des Hubbardmodells, da exakte Lösungen für $d > 1$ nicht bekannt sind, und andere Methoden unkontrollierte Näherungen enthalten. Exakte Diagonalisierungen des Hamiltonians stoßen insbesondere in höheren Dimensionen wegen der exponentiell wachsenden Rechenzeit schnell an die Grenzen ihrer Anwendbarkeit. Aus diesem Grund bietet sich die Methode der Monte-Carlo-Simulation an. Dazu wurden in den letzten Jahren verschiedene Verfahren entwickelt. Für eindimensionale Systeme gibt es Algorithmen, bei denen die Rechenzeit linear mit der Systemgröße wächst, und Ketten mit bis zu 40 Gitterplätzen wurden damit simuliert¹⁰. In höheren Dimensionen sind so schnelle Algorithmen nicht bekannt. In dieser Arbeit wird ausgehend von dem *Funktional-Integral Formalismus*¹¹ ein Monte-Carlo-Verfahren entwickelt. Dabei wandelt eine

diskrete Hubbard-Stratonovich Transformation das Modell in ein Einteilchenproblem mit Kopplung an ein zeitabhängiges äußeres Isingspin-Hilfsfeld um. Die Einteilchen-Greensfunktionen und daraus die statistischen Gewichte der Isingspin-Konfigurationen werden für festes Hilfsfeld exakt berechnet. Es handelt sich hierbei um ein großkanonisches Ensemble, die Teilchendichte wird über das chemische Potential gesteuert. Die Rechenzeit wächst bei diesem Algorithmus kubisch mit der Systemgröße. Seine Anwendbarkeit ist daher auf relativ kleine Systeme (Größenordnung: 100 Gitterplätze) begrenzt, was aber über die Möglichkeiten exakter Diagonalisierung weit hinausgeht und Rückschlüsse auf den thermodynamischen Limes zuläßt.

Bei der Entwicklung des Algorithmus' wurde Wert auf eine möglichst breite Anwendbarkeit gelegt, um ihn für Änderungen und Erweiterungen des Modells offen zu halten. Nach der Beschreibung des Formalismus' für die Monte-Carlo-Prozedur wird die Bestimmung der gleichzeitigen und zeitabhängigen Observablen erläutert. Das Verfahren wird zunächst auf das Hubbardmodell mit halber Bandfüllung ($n = 1$) für den ein-, zwei- und dreidimensionalen Fall mit bis zu 64 Gitterplätzen angewandt. Für Tests des Algorithmus' und des Programms können die Ergebnisse aus dem eindimensionalen Fall mit exakten Resultaten für endliche Systeme^{5,6} und dem thermodynamischen Limes^{2,4} verglichen werden. In höheren Dimensionen liegen numerische Resultate zum Vergleich vor¹⁶⁻¹⁸. Anschließend werden Verbesserungen des Verfahrens zur Erhöhung der numerischen Stabilität bei tiefen Temperaturen und zur Steigerung der Effektivität dargestellt. Eine Anwendung des Programms ist die Untersuchung von Korrelationsfunktionen, insbesondere der Spin-Spin-Korrelation für den Fall $d = 1$. Die Ergebnisse werden in Kapitel 7 vorgestellt und mit den Korrelationsfunktionen der Gutzwiller-Variationswellenfunktion bzw. mit Aussagen von Renormierungsgruppenrechnungen verglichen. Eine Beschreibung des Programms befindet sich im Anhang.

2. Formalismus des Monte-Carlo-Verfahrens

2.1. Monte-Carlo-Methoden

Monte-Carlo(MC)-Simulationen dienen der Bestimmung thermodynamischer Erwartungswerte physikalischer Größen eines Modells. Der Erwartungswert einer Größe O wird gegeben durch:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int dx O(x) P(x) \quad , \quad Z = \int dx P(x) \quad . \quad (2.1)$$

$x = (x_1 \dots x_f)$ sind die Systemvariablen, f ist die Anzahl der Freiheitsgrade, $P(x) = e^{-\beta E(x)}$ ist der Gewichtungsfaktor (Boltzmanngewicht) einer Konfiguration x mit der Energie $E(x)$. Das Integral Z ist die *Zustandssumme* bei der Temperatur $T = \frac{1}{k_B \beta}$. k_B ist die Boltzmannkonstante, im folgendem wird $k_B \equiv 1$ gesetzt. Die Monte-Carlo-Prozedur erzeugt Konfigurationen des Systems gemäß der Boltzmannverteilung. Dazu geht man von einer Startkonfiguration $x^{(1)} \equiv (x_1^{(1)} \dots x_f^{(1)})$ und erzeugt durch Änderung der Koordinaten $x_i^{(1)} \rightarrow x_i^{(2)}$ eine weitere Konfiguration $x^{(2)} \equiv (x_1^{(2)} \dots x_f^{(2)})$. Der Übergang von $x^{(1)}$ zu $x^{(2)}$ (ein *MC-Schritt*) wird dann mit einer Wahrscheinlichkeit $P(x^{(1)} \rightarrow x^{(2)})$ akzeptiert, die die *detaillierte Balance* erfüllt:

$$P(x^{(1)})P(x^{(1)} \rightarrow x^{(2)}) = P(x^{(2)})P(x^{(2)} \rightarrow x^{(1)}) \quad . \quad (2.2)$$

Dies liefert z.B. die Wahl

$$P(x^{(1)} \rightarrow x^{(2)}) = \frac{1}{\frac{P(x^{(1)})}{P(x^{(2)})} + 1} \quad \text{oder} \quad P'(x^{(1)} \rightarrow x^{(2)}) = \max\left\{\frac{P(x^{(2)})}{P(x^{(1)})}, 1\right\} \quad . \quad (2.3)$$

Aus m Konfigurationen, die auf diese Weise erzeugt wurden, wird der Mittelwert von O gebildet:

$$\bar{O}_m = \sum_{k=1}^m O(x^{(k)}) \quad . \quad (2.4)$$

Der Strich über der Summe deutet die Summation mit der beschriebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung an. Nach dem *Zentralen Grenzwertsatz* konvergiert für $m \rightarrow \infty$ die Verteilung der so gebildeten Mittelwerte gegen eine Normalverteilung um $\langle O \rangle$ mit der Standardabweichung $\sigma = [\frac{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}{m}]^{\frac{1}{2}}$, wenn die aufeinanderfolgenden Konfigurationen statistisch unabhängig sind. Dies ist die Grundlage der Monte-Carlo-Methoden. Die "zufällige" Auswahl von Systemkonfigurationen und die Akzeptanz einer neuen Konfiguration gemäß (2.3) geschieht mithilfe eines sog. *Pseudo-Zufallszahlen-Generators*, der möglichst unkorrelierte Zahlenfolgen liefert. Die statistische Unabhängigkeit der Konfigurationen wird dadurch approximiert, daß zwischen zwei Bestimmungen von $O(x^{(i)})$ eine Reihe von MC-Schritten eingeschoben wird.

2.2. Pfadintegral-Darstellung

Die Zustandssumme eines quantenmechanischen Systems schreiben wir:

$$Z = \sum_{\phi} \langle \phi | e^{-\beta H} | \phi \rangle \equiv \text{Tr}[e^{-\beta H}] \quad , \quad (2.5)$$

wobei über alle (normierten) Zustände $|\phi\rangle$ des Systems summiert wird. Die Matrixelemente des "Boltzmannoperators" $e^{-\beta H}$ in (2.5) sind schwierig zu berechnen. Ein Ausweg ist, den Hamiltonianoperator H geeignet zu zerlegen - z.B. in den Wechselwirkungsanteil H_W (1.2) und den kinetischen Anteil H_K (1.3)-, so daß die Matrixelemente $e^{-\beta H_{1(2)}}$ einfach diagonalisiert werden können. Allerdings ist zu beachten, daß $e^{-\beta H} = e^{-\beta(H_1+H_2)}$ nicht faktorisiert:

$$e^{-\beta(H_1+H_2)} = e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} (1 + O([H_1, H_2]) + \dots) \quad , \quad (2.6)$$

wie aus einer einfachen Taylorentwicklung ersichtlich ist. Dieser Korrekturterm kann durch die Anwendung der *Trotter-Suzuki-Formel*¹³ minimiert werden.

$$\begin{aligned} e^{-\beta(H_1+H_2)} &= e^{-\sum_{l=1}^L \Delta\tau(H_1+H_2)} \\ &= \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2} (1 + O(\Delta\tau^2[H_1, H_2]) + \dots) \end{aligned} \quad (2.7)$$

mit dem Diskretisierungsparameter $\Delta\tau = \beta/L$. Damit wird die Zustandssumme bis auf einen Fehler in der Ordnung $\Delta\tau^2$

$$Z \simeq \text{Tr} \prod_{l=1}^L [e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2}] \quad (2.8)$$

Dies ist die einzige Näherung, die in diesem Algorithmus gemacht wird, etwa entsprechend einer Diskretisierung bei sonst kontinuierlichen Systemen. Gl.(2.8) ist die sog. *Pfadintegraldarstellung* der Zustandssumme. Dies wird deutlich durch Einfügen von $2L - 1$ vollständigen orthonormierten Sätzen von Zustandsvektoren $\{|\phi_j\rangle\}$:

$$Z = \sum_{\phi_1 \phi_2 \dots \phi_{2L}} \langle \phi_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \phi_2 \rangle \langle \phi_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \phi_3 \rangle \dots \langle \phi_{2L} | e^{-\Delta\tau H_2} | \phi_1 \rangle \quad (2.9)$$

Der Exponentialterm zwischen dem k . und dem $k + 1$. Zustandsvektor kann als Zeitentwicklungsoperator $U(t_k \rightarrow t_{k+1})$ mit der "imaginären Zeit" $t_k = -i\hbar k\Delta\tau$ ($k = 1 \dots 2L$) betrachtet werden. Werden die Zustandsvektoren so gewählt, daß $H_{1(2)}$ in den $|\phi_j\rangle$ mit geradem (ungeradem) j diagonal ist, so folgt:

$$Z = \sum_{\phi_1 \dots \phi_{2L}} e^{-\Delta\tau(E_1(\phi_2) + E_2(\phi_3) + \dots + E_1(\phi_{2L}) + E_2(\phi_1))} \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle \langle \phi_2 | \phi_3 \rangle \dots \langle \phi_{2L} | \phi_1 \rangle \quad (2.10)$$

Dabei ist $E_{1(2)}(\phi_j)$ der Eigenwert des Eigenvektors ϕ_j von $H_{1(2)}$. In Gl.(2.10) treten keine Operatoren, sondern nur noch (i.a. komplexe) Zahlen auf; daher kann nun ein "klassisches" MC-Verfahren angewendet werden. Der Preis dafür ist die Erhöhung der Dimension um die "imaginäre Zeit-" oder *Trotter-Dimension*. MC-Simulationen nach Gl.(2.10) wurden u.a. auf das eindimensionale Hubbardmodell angewendet¹⁰. Eine sinnvolle Zerlegung von H ist die *even-odd-Zerlegung*, bei der in $H_{1(2)}$ die Summe (1.4) über alle geraden (ungeraden) Gitterplätze läuft. Da nur nearest-neighbor hopping zugelassen ist, vertauschen die einzelnen Summanden in $H_{1(2)}$, und $e^{-\Delta\tau H_{1(2)}}$ faktorisiert bis auf Hamiltonians für je zwei Gitterplätze, deren Matrixelemente leicht ausgerechnet werden können. In höheren Dimensionen sind ähnliche Zerlegungen von H möglich. Dieses Verfahren wird *word-line*-Algorithmus genannt, da in dem Pfadintegral (2.9) explizit über alle klassischen Teilchenbahnen summiert wird.

Für $d > 1$ kann allerdings durch die Antivertauschungsrelationen für Fermionen (siehe (2.19)) derselbe Zustand mit verschiedenem Vorzeichen auftreten, was zu negativen statistischen Gewichten P führt. Diese Überkreuzung von Weltlinien passiert um so häufiger, je länger sie sind, d.h. je größer die inverse Temperatur β ist, und je mehr Fermionen zur Vertauschung zur Verfügung stehen. In solchen Fällen schreibt man den Erwartungswert eines Operators O wie folgt:

$$\begin{aligned} \langle O \rangle_P &= \frac{\text{Tr}[P \cdot O]}{\text{Tr}[P]} = \frac{\text{Tr}[|P| \sigma O]}{\text{Tr}[|P| \sigma]} \\ &= \frac{\frac{\text{Tr}[|P| \sigma O]}{\text{Tr}[|P|]}}{\frac{\text{Tr}[|P| \sigma]}{\text{Tr}[|P|]}} = \frac{\langle O \sigma \rangle_{|P|}}{\langle \sigma \rangle_{|P|}} . \end{aligned} \quad (2.12)$$

σ ist das Vorzeichen des Gewichtungsfaktors P . Der Erwartungswert von O bezüglich $|P|$ wird durch den Mittelwert des Vorzeichens von P dividiert. Sowohl der Zähler als auch der Nenner in Gl.(2.12) können abhängig von den Systemparametern sehr klein werden, wobei die einzelnen Summanden betragsmäßig relativ groß sein können. Dies führt insbesondere bei tiefen Temperaturen zu großen statistischen Fluktuationen, durch die der word-line-Algorithmus für $d > 1$ unpraktikabel wird.

2.3. Funktional-Integral-Formalismus

Eine weitere Möglichkeit, das Pfadintegral (2.8) zu bestimmen (bzw. die dazugehörigen Erwartungswerte), besteht darin, den Hamiltonian (1.4) auf einen effektiven Einteilchenhamiltonian zu transformieren. In der großkanonischen Gesamtheit lautet der Hubbardhamiltonian:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \left(\mu + \frac{U}{2} \right) \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad . \quad (2.13)$$

Dabei ist das chemische Potential μ so normiert, daß im Fall des halbgefüllten Bandes ($n = 1$) $\mu = 0$ gilt; Energien werden von nun an in Einheiten von t

gemessen ($t \equiv 1$). Der Hamiltonian (2.13) läßt sich zerlegen in einen Anteil, der quadratisch ist in den Erzeugern und Vernichtern, und einen quartischen Anteil.
quadratischer Anteil:

$$K = - \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \sigma}} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \equiv \sum_{i,j,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger k_{ij} c_{j\sigma} \quad (2.14)$$

quartischer Anteil:

$$V = U \sum_i [n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})] \quad (2.15)$$

Der quadratische Anteil bereitet keine Probleme. Durch eine kanonische Transformation (ohne Spinindizes)

$$c_j^\dagger = \sum_\nu \langle \nu | j \rangle a_\nu^\dagger, \quad c_i = \sum_\nu \langle i | \nu \rangle a_\nu \quad (2.16)$$

wird K mit Eigenwerten d_ν diagonalisiert.

(Dies geschieht in diesem Fall durch eine Fouriertransformation; für $d = 1$ mit $\langle \nu | j \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp(i2\pi j\nu/N)$, $d_\nu = -2\cos(2\pi\nu/N) - \mu$, $\nu = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1$ (N : Zahl der Gitterplätze)). Damit wird

$$\sum_{ij} c_i^\dagger k_{ij} c_j = \sum_\nu a_\nu^\dagger d_\nu a_\nu \quad (2.17)$$

und

$$\begin{aligned} \text{Tr} e^{-\sum_{ij} c_i^\dagger k_{ij} c_j} &= \text{Tr} e^{-\sum_\nu a_\nu^\dagger d_\nu a_\nu} \\ &= \prod_\nu \sum_{n_\nu=0,1} \langle n_\nu | 1 + e^{-d_\nu \hat{n}_\nu} | n_\nu \rangle \\ &= \prod_\nu (1 + e^{-d_\nu}) = \det(I + e^{-K}) \end{aligned} \quad (2.18)$$

(Der Hut auf n_ν dient der Unterscheidung zw. Operator und Besetzungszahlen, I ist die Einheitsmatrix.) Das letzte Gleichheitszeichen folgt aus der Tatsache, daß sich die Determinante durch die kanonische Transformation nicht ändert. Es ist somit wünschenswert, den quartischen Anteil ebenfalls auf einen Hamiltonian

mit nur Einteilchenoperatoren zu transformieren. Dazu nutzen wir die Antivertauschungsrelationen für fermionische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (ohne Gitterplatzindex)

$$[c_{\sigma}^{\dagger}, c_{\sigma'}]_{+} = \delta_{\sigma\sigma'} \quad , \quad [c_{\sigma}, c_{\sigma'}]_{+} = [c_{\sigma}^{\dagger}, c_{\sigma'}^{\dagger}]_{+} = 0 \quad , \quad (2.19)$$

aus denen mit $n_{\sigma} = c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma}$ folgt:

$$-\frac{1}{2}(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2 = n_{\uparrow} n_{\downarrow} - \frac{1}{2}(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})$$

und

$$(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^{2k} = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2 \quad , \quad k = 1, 2, \dots \quad . \quad (2.20)$$

Damit wird

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau U[(n_{\uparrow} n_{\downarrow}) - \frac{1}{2}(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})]} &= e^{-\frac{\Delta\tau}{2} U (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\Delta\tau U}{2}\right)^k (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^{2k} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} (\Delta\tau \lambda)^{2k} (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^{2k} \\ &= \cosh[\Delta\tau(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})] = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{-\Delta\tau s \lambda (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})} \end{aligned} \quad (2.21)$$

mit $\cosh(\Delta\tau \lambda) = \exp(\Delta\tau U/2)$.

Diese *diskrete Hubbard-Stratonovich(HS)-Transformation* von J.E.Hirsch¹⁴ entspricht im wesentlichen einer Gaußtransformation. Da die Besetzungszahlen für Fermionen nur die Werte 0 oder 1 annehmen können, genügt hier ein zweiwertiges Feld, um die Zweiteilchen-Operatoren zu eliminieren. MC-Verfahren mit kontinuierlichen HS-Transformationen benötigen nicht nur mehr Zeit für einen MC-Sweep, sondern erfordern wegen langer Autokorrelationszeiten wesentlich längere Programmläufe für die gleiche statistische Genauigkeit¹⁵.

Die HS-Transformation ist für jeden Gitterplatz und jeden Trotter-Schritt l ($l = 1, \dots, L$) in Gl.(2.8) durchzuführen. Auf diese Weise wird die Elektron-Elektron Wechselwirkung auf eine Wechselwirkung mit dem äußeren Isingspin-Hilfsfeld

$\{s_{i,l}\}$ reduziert, wodurch nur noch Einteilchen-Operatoren auftreten. Es verbleiben natürlich die Freiheitsgrade des elektronischen Spins σ , wobei σ eine skalare zweiwertige Größe ist. Die Zustandssumme schreibt sich dann gemäß Gl.(2.8)

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Tr} \prod_{l=1}^L [e^{-\Delta\tau K} e^{-\Delta\tau V}] \\
&= \text{Tr} \prod_{l=1}^L [e^{-\Delta\tau K} \text{Tr}_{\{s_{i,l}\}} e^{-\Delta\tau \sum_i s_{i,l}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})}] \\
&= \text{Tr}_{\{s\}} \text{Tr}_{\{ferm.\}} \prod_{l=1}^L D^\uparrow(l) D^\downarrow(l)
\end{aligned} \tag{2.22}$$

mit

$$D^\sigma(l) = e^{-\Delta\tau c_{i\sigma}^\dagger k_{ij} c_{j\sigma}} \cdot e^{-\sigma \lambda \Delta\tau c_{i\sigma}^\dagger v(l)_{ij} c_{i\sigma}} \quad , \tag{2.23}$$

$\sigma = 1, -1 = \uparrow, \downarrow$. Die Indizes i, j der Matrizen gehen jeweils über das ganze Gitter im Ortsraum. k_{ij} sind die Einträge der Matrix k aus Gl.(2.14), $v(l)$ ist eine Diagonalmatrix mit den Elementen $v(l)_{ij} = \delta_{ij} s_{i,l}$.

Die Spur über die fermionischen Freiheitsgrade läßt sich nun explizit ausführen. Dies geschieht analog zur Spurbildung in (2.18), nur daß es sich hier um ein Produkt von L Exponentialoperatoren handelt, oder durch Integration mit *Graßmann-Variablen*^{11,12}.

$$Z = \text{Tr}_{\{s\}} \det O^\uparrow \cdot \det O^\downarrow \tag{2.24}$$

mit

$$O^\sigma = I + B^\sigma(L) B^\sigma(L-1) \cdots B^\sigma(1) \quad , \tag{2.25}$$

$$B^\sigma(l) = e^{-\Delta\tau k} e^{-\sigma \Delta\tau \lambda v(l)} \quad . \tag{2.26}$$

(I ist die Einheitsmatrix.) Es verbleibt die Summe über die (klassischen) Isingspins $s_{i,l} = \pm 1$. Diese wird durch die Monte-Carlo-Simulation ausgeführt. Das Produkt der Determinanten O^σ aus Gl. (2.24) dient dabei als statistisches Gewicht (Boltzmanngewicht) P , um Spinkonfigurationen $\{s_{i,l}\}$ gemäß einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $Z^{-1} \det O_\uparrow \det O_\downarrow$ zu erhalten.

Für den Fall des halbgefüllten Bandes (hier: $\mu = 0$) unterscheiden sich die Determinanten nur um einen Faktor $e^{\Delta\tau\lambda\sum_{i,l}s_{i,l}}$. Das statistische Gewicht P ist daher positiv definit. Dies ist für andere Bandfüllungen nicht notwendig der Fall, so daß auch hier numerische Probleme, insbesondere bei tiefen Temperaturen, auftreten. Durch das Ausintegrieren der fermionischen Freiheitsgrade ist das Vorzeichenproblem nicht so extrem wie beim world-line Verfahren. Da der Mittelwert des Vorzeichens mit der inversen Temperatur β exponentiell abfällt, ist allerdings die praktische Anwendbarkeit auch dieses Verfahrens bei bestimmten Bandfüllungen (insbesondere bei schwacher Dotierung) auf relative hohe Temperaturen beschränkt.

2.4. Berechnung der statistischen Gewichte

Ein *MC-Sweep* besteht nun darin, für jeden Trotter-Schritt l N -mal einen Ising-Spin $s_{i,l}$ umzuklappen (N : Zahl der Gitterplätze) und diese Änderung gemäß den relativen statistischen Gewichten der alten und der neuen Konfiguration zu akzeptieren oder abzulehnen. Die Übergangswahrscheinlichkeit P beim Umklappen eines Ising-Spins $s_{i,l}$ ist durch das Verhältnis der Determinantenprodukte der O -Matrizen aus Gl.(2.25) bestimmt. Es wäre jedoch hoffnungslos langwierig, für jeden Orts- und Zeitpunkt (i,l) zwei Determinanten von $N \times N$ -Matrizen zu berechnen, wenn N über die Möglichkeiten exakter Diagonalisierungen ($N \simeq 10$) hinausgehen soll. Diese Berechnung ist zum Glück auch nicht notwendig, wie wir sehen werden. Die Determinante von O^σ aus Gl.(2.25)

$$\det O^\sigma = \det[I + B^\sigma(L)B^\sigma(L-1) \dots B^\sigma(1)]$$

ändert sich nicht bei zyklischer Vertauschung der B -Matrizen, wovon man sich durch Multiplikation von $B^\sigma(1)$ von links und $B^\sigma(1)^{-1}$ von rechts leicht überzeugen kann. Deshalb können wir mit

$$A^\sigma(l) = B^\sigma(l)B^\sigma(l-1) \dots B^\sigma(1)B^\sigma(L) \dots B^\sigma(l+1) \quad (2.27)$$

$$\det O^\sigma = \det[I + A^\sigma(l)] \quad (2.28)$$

schreiben. Nach dem Umklappen des Spins $s_{i,l} \rightarrow s'_{i,l} = -s_{i,l}$ wird

$$\begin{aligned} A^\sigma(l) &\rightarrow A^{\sigma'}(l) = B^{\sigma'}(l)B^\sigma(l)^{-1}A^\sigma(l) \\ &= [I + \Delta^\sigma(i, l)]A^\sigma(l) \end{aligned} \quad (2.29)$$

mit

$$\Delta^\sigma(i, l)_{jk} = \delta_{ji}\delta_{ki}[e^{2\sigma\Delta\tau\lambda s_{i,l}} - 1] \quad , \quad (2.30)$$

($\Delta^\sigma(i, l)$ hat also nur ein nichtverschwindendes Element). Die neuen Determinanten sind

$$\begin{aligned} \det O^{\sigma'} &= \det[I + (I + \Delta^\sigma(i, l))A^\sigma(l)] \\ &= \det O^\sigma \det[I + (I + A^\sigma(l))^{-1}\Delta^\sigma(i, l)A^\sigma(l)] \quad . \end{aligned}$$

Damit beträgt das Verhältnis der Determinanten nach und vor dem Umklappen:

$$\begin{aligned} R^\sigma &\equiv R_i^\sigma(l) = \frac{\det O^{\sigma'}}{\det O^\sigma} = \det[I + G^\sigma(l)\Delta^\sigma(i, l)A^\sigma(l)] \\ &= 1 + [1 - G^\sigma(l)_{ii}]\Delta^\sigma(i, l)_{ii} \quad . \end{aligned} \quad (2.31)$$

Dabei ist

$$G^\sigma(l) \equiv [I + A^\sigma(l)]^{-1} \quad . \quad (2.32)$$

Wie wir in Kapitel 3. sehen werden, sind die Einträge von $G^\sigma(l)$ die *Einteilchen-equal-time-Greensfunktionen* zwischen den Gitterplätzen j und k zur (Trotter-)Zeit $\Delta\tau l$:

$$G^\sigma(l)_{jk} = \langle c_{j\sigma}(l\Delta\tau)c_{k\sigma}^\dagger(l\Delta\tau) \rangle \quad . \quad (2.33)$$

Die equal-time Greensfunktion $G^\sigma(l)$ wird zu Beginn nach Gleichung (2.27) und (2.32) berechnet, was $L * N^3$ Operationen erfordert. Nach jedem Umklappen eines Isingspins kann sie besser folgendermaßen ermittelt werden:

$$\begin{aligned} G^\sigma(l)^{-1} &= I + A^\sigma(l)' = I + A^\sigma(l) + \Delta^\sigma(i, l)A^\sigma(l) \\ &= G^\sigma(l)^{-1} + \Delta^\sigma(i, l)A^\sigma(l) \quad . \end{aligned}$$

Nach Multiplikation mit $G^\sigma(l)$ von rechts und $G^\sigma(l)'$ von links und Umstellen folgt:

$$G^\sigma(l)' = G^\sigma(l) \cdot [I + G^\sigma(l)\Delta^\sigma(i,l)A^\sigma(l)]^{-1} .$$

Dies ergibt nach Einsetzen von $\Delta^\sigma(i,l)$ aus (2.30) für die Komponenten:

$$G^\sigma(l)'_{jk} = G^\sigma(l)_{jk} - \frac{1}{R^\sigma} G^\sigma(l)_{ji} [e^{2\sigma\Delta\tau\lambda_{i,l}} - 1] [\delta_{ik} - G^\sigma(l)_{ik}] . \quad (2.34)$$

In (2.34) treten keine Summationen mehr auf, es genügen also N^2 Operationen zur Neuberechnung der Greensfunktion. Das Umlappen des Isingspins wird dann z.B. mit der Wahrscheinlichkeit

$$P = \frac{R^\uparrow R^\downarrow}{1 + R^\uparrow R^\downarrow} \quad (2.35)$$

(bzw. $|P|$) akzeptiert, so daß die detaillierte Balance erfüllt ist.

Nachdem ein Sweep durchs Gitter für einen Trotter-Schritt l durchgeführt wurde, berechnen wir die Greensfunktion für den nächsten Trotter-Schritt:

$$G^\sigma(l+1) = B^\sigma(l+1)G^\sigma(l)B^\sigma(l+1)^{-1} . \quad (2.36)$$

Dies ist keine lokale Operation wie in Gleichung (2.34), da die Matrix A^σ sich gemäß (2.27) vollständig ändert. Es zeigt sich, daß dieses Fortschreiten der Greensfunktion von einem Trotter-Schritt zum nächsten nach (2.36) zu einer Propagation von Rundungsfehlern führt. Daher muß $G^\sigma(l)$ von Zeit zu Zeit neu aus dem Isingspin-Feld nach Gl.(2.32) und (2.27) berechnet werden; wie oft hängt von β, U und der gewünschten Genauigkeit ab. Die Matrizen $A^\sigma(l)$, die dafür zu berechnen sind, besitzen Eigenwerte der Größe $\sim \exp[\pm 4t\beta]$. Das Aufmultiplizieren nach Gl.(2.27) und die Inversion (2.32) führt bei tiefen Temperaturen (etwa für $\beta > 4$) zu numerischen Instabilitäten, die in Kapitel 5 behandelt werden. Die Fehler bei der Anpassung der Greensfunktionen bei einem Gittersweep (l fest) nach (2.34) sind dagegen vernachlässigbar klein.

3. Bestimmung der Observablen

3.1. Gleichzeitige Observable

Der Erwartungswert eines Operators O wird gegeben durch:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}[O e^{-\beta H}] \quad (3.1)$$

Der Monte-Carlo-Algorithmus erzeugt Konfigurationen des Isingspin-Hilfsfeldes mit der geforderten Wahrscheinlichkeitsverteilung. Aus diesen Konfigurationen werden nun die Werte von physikalischen Observablen bestimmt, aufsummiert und gemittelt. Die folgenden Erwartungswerte $\langle \dots \rangle$ beziehen sich nur auf die Summation über die fermionischen Freiheitsgrade, d.h. für festgehaltenes Isingspin-Feld $\{s_{i,l}\}$. Bei den gleichzeitigen Observablen beschränken wir uns wegen der Translationsinvarianz in Trotter-Richtung o.B.d.A auf den Fall $l = L$.

Wie wird nun der Erwartungswert eines einfachen Einteilchen-Operators $c_i c_j^\dagger$ (Spinindizes weggelassen) bestimmt? Mit den D -Operatoren aus Gl.(2.23) gilt

$$\langle c_i c_j^\dagger \rangle = \frac{\text{Tr} c_i c_j^\dagger D(L) \dots D(1)}{\text{Tr} D(L) \dots D(1)} \quad (3.2)$$

Hätten wir nun eine neue Einteilchenbasis $\{|\nu\rangle\}$ mit Erzeugern $a_\nu^\dagger = \sum_j \langle j | \nu \rangle c_j^\dagger$, in der das Produkt $D(L) \dots D(1)$ diagonal ist mit Eigenwerten $e^{-l_L} \dots e^{-l_1}$, dann wäre

$$\begin{aligned} \langle a_\mu a_\nu^\dagger \rangle &= \frac{\text{Tr} a_\mu a_\nu^\dagger D(L) \dots D(1)}{\text{Tr} D(L) \dots D(1)} = \frac{\text{Tr} a_\mu a_\nu^\dagger \prod_\gamma e^{-a_\gamma^\dagger l_\gamma a_\gamma}}{\text{Tr} \prod_\gamma e^{-a_\gamma^\dagger l_\gamma a_\gamma}} \\ &= \frac{\delta_{\mu\nu} \prod_{\gamma \neq \mu} (1 + e^{-l_\gamma}) \sum_{n_\mu}^{0,1} (1 - n_\mu) e^{-n_\mu l_\mu}}{\prod_\gamma (1 + e^{-l_\gamma})} \\ &= \delta_{\mu\nu} (1 + e^{-l_\mu})^{-1} \quad (3.3) \end{aligned}$$

Die Rücktransformation zu den "alten" Zuständen $\{|j\rangle\}$ liefert gem. (2.16)

$$\begin{aligned}\langle c_i c_j^\dagger \rangle &= \sum_{\mu\nu} \langle i | \mu \rangle \langle \nu | j \rangle \langle a_\mu a_\nu^\dagger \rangle = \sum_{\mu} \langle i | \mu \rangle \langle \mu | j \rangle (1 + e^{-l_\mu})^{-1} \\ &= [I + B(L)B(L-1)\dots B(1)]_{ij}^{-1} .\end{aligned}\quad (3.4)$$

Dies ist aber die Definition von $G^\sigma(L)_{ij}$ aus Gl.(2.32), d.h. $G^\sigma(L)_{ij}$ ist tatsächlich die Einteilchen-Greensfunktion für Elektronen auf den Gitterplätzen i und j zur Zeit $L\Delta\tau$. Mit den Vertauschungsrelationen (2.19) folgt

$$\langle c_i^\dagger c_j \rangle = \delta_{ij} - \langle c_j c_i^\dagger \rangle = [I - G(L)]_{ji} . \quad (3.5)$$

Insbesondere:

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = 1 - G^\sigma(L)_{ii} . \quad (3.6)$$

Für Zweiteilchen-Operatoren ist es wiederum durch Entwicklung in Eigenzustände leicht zu zeigen, daß gilt:

$$\langle c_i^\dagger c_j c_k^\dagger c_l \rangle = \langle c_i^\dagger c_j \rangle \langle c_k^\dagger c_l \rangle + \langle c_i^\dagger c_l \rangle \langle c_j c_k^\dagger \rangle \quad (3.7)$$

(Druckfehler in Ref. 16, Seite 4408 Gleichung (3.21)).

Erwartungswerte von Produkten von Operatoren mit verschiedenen Spinindizes faktorisieren, da auch die D -Operatoren faktorisiert sind; z.B.:

$$\langle n_{i\uparrow} n_{j\downarrow} \rangle = \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{j\downarrow} \rangle . \quad (3.8)$$

Die Erwartungswerte von gleichzeitigen Observablen lassen sich also aus den equal-time Einteilchen-Greensfunktionen $G^\sigma(L)$ berechnen. Es sei nochmal daran erinnert, daß es sich hier nicht um die vollständigen Mittelwerte, sondern nur um die Spurbildung über die fermionischen Freiheitsgrade handelt. Diese Werte sind in der MC-Prozedur über die Isingspin-Konfigurationen zu mitteln.

Als ein Beispiel wollen wir den Erwartungswert (über die fermionischen Freiheitsgrade) der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen bestimmen. Die Korrelationsfunktion für Spins auf Gitterplätzen im Abstand δ ist

$$L_\delta = \frac{1}{N} \sum_j \langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+\delta} \rangle = \frac{3}{N} \sum_j \langle S_{j,z} S_{j+\delta,z} \rangle \quad (3.9)$$

mit

$$S_{j,z} = \sum_{\sigma\sigma'} \langle \sigma | S_z | \sigma' \rangle c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma'} \quad (3.10)$$

Dabei gilt für die Spinmatrix: $\langle \sigma | S_z | \sigma' \rangle = \frac{1}{2} \sigma \delta_{\sigma\sigma'}$, wobei $\sigma = \pm 1$, also:

$$S_{j,z} = \frac{1}{2} \sum_\sigma \sigma c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = \frac{1}{2} (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) \quad (3.11)$$

Damit reduziert sich die Spin-Spin-Korrelationsfunktion auf:

$$L_\delta = \frac{3}{4N} \sum_j \langle (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow})(n_{j+\delta,\uparrow} - n_{j+\delta,\downarrow}) \rangle \quad (3.12)$$

Anwendung der Gln.(3.7) und (3.8) liefert für $\delta \neq 0$

$$\begin{aligned} L_\delta = \frac{3}{4N} \sum_j \{ & [\langle n_{j\uparrow} \rangle - \langle n_{j\downarrow} \rangle] \cdot [\langle n_{j+\delta,\uparrow} \rangle - \langle n_{j+\delta,\downarrow} \rangle] \\ & + \langle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j+\delta,\uparrow} \rangle \langle c_{j\uparrow} c_{j+\delta,\uparrow}^\dagger \rangle + \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j+\delta,\downarrow} \rangle \langle c_{j\downarrow} c_{j+\delta,\downarrow}^\dagger \rangle \} \quad (3.13) \end{aligned}$$

Die jetzt noch auftretenden Erwartungswerte können, wie vorher gezeigt, aus den equal-time-Greensfunktionen entnommen werden.

Für den Wert $\delta = 0$ ergibt Gleichung (3.12) die mittlere lokale Magnetisierung:

$$L_0 = \frac{3}{4N} \sum_j \langle \sigma_z^2 \rangle = \frac{3}{4N} \sum_j [\langle n_{j\uparrow} \rangle + \langle n_{j\downarrow} \rangle - 2\langle n_{j\uparrow} \rangle \langle n_{j\downarrow} \rangle] \quad (3.14)$$

3.2. Zeitabhängige Observable

Zeitabhängige Korrelationsfunktionen werden zur Bestimmung q -abhängiger Suszeptibilitäten wie z.B. der magnetischen Suszeptibilität benötigt. Sie lassen sich aus den in (2.26) definierten zeitabhängigen B -Matrizen gewinnen. So gilt mit den Operatoren D_l^q aus (2.23) für Einteilchenoperatoren (ohne Elektronenspin-Indizes)

$$\begin{aligned} \langle c_i(l_1) c_j^\dagger(l_2) \rangle &= \frac{\text{Tr} D_L D_{L-1} \cdots D_{l_1+1} c_i D_{l_1} \cdots D_{l_2+1} c_j^\dagger D_{l_2} \cdots D_1}{\text{Tr} D_L \cdots D_1} \\ &= \frac{\text{Tr} D_{l_2} \cdots D_1 D_L \cdots D_{l_2+1} [(D_{l_1} D_{l_1-1} \cdots D_{l_2+1})^{-1} c_i D_{l_1} \cdots D_{l_2+1}] c_j^\dagger}{\text{Tr} D_{l_2} \cdots D_1 D_L \cdots D_{l_2+1}} \end{aligned} \quad (3.15)$$

(Der Index l wurde zur besseren Übersichtlichkeit jetzt nach unten gestellt.) Durch Entwicklung in Eigenzustände von $D_{l_1} D_{l_1+1} \cdots D_{l_2+1}$ läßt sich ähnlich wie bei Gleichung (3.2) bis (3.4) zeigen:

$$(D_{l_1} D_{l_1-1} \cdots D_{l_2+1})^{-1} c_i D_{l_1} D_{l_1-1} \cdots D_{l_2+1} = \sum_k (B_{l_1} B_{l_1-1} \cdots B_{l_2+1})_{ik} c_k \quad ,$$

woraus sich durch Einsetzen in Gleichung (3.15) und Anwendung von (3.2) und (3.4) ergibt:

$$\begin{aligned} \langle c_i(l_1) c_j^\dagger(l_2) \rangle &= \sum_k (B_{l_1} B_{l_1-1} \cdots B_{l_2+1})_{ik} \frac{\text{Tr} D_{l_2} \cdots D_1 D_L \cdots D_{l_2+1} c_k c_j^\dagger}{\text{Tr} D_{l_2} \cdots D_1 D_L \cdots D_{l_2+1}} \\ &= [B_{l_1} B_{l_1-1} \cdots B_{l_2+1} (I + B_{l_2} \cdots B_1 B_L \cdots B_{l_2+1})^{-1}]_{ij} \quad . \end{aligned} \quad (3.16)$$

Auf ähnliche Weise erhält man:

$$\langle c_i^\dagger(l_1) c_j(l_2) \rangle = [(I + B_{l_2} \cdots B_{l_2+1})^{-1} B_{l_2} \cdots B_{l_1+1}]_{ji} \quad (3.17)$$

(Druckfehler in Ref. 16, Seite 4408 Gleichung (3.26)). Für Korrelationen höherer Ordnung wende man die Gleichung (3.7) an. Aus den gleichzeitigen und den zeitabhängigen Korrelationsfunktionen lassen sich die Erwartungswerte verschiedener Observable bestimmen.

Insgesamt werden folgende Observablen ermittelt (die Gleichungen beziehen sich teilweise auf die folgenden Abschnitte):

- Einteilchendichte $\langle n_{i\sigma} \rangle$ ($\sigma = \pm 1$) nach (3.6) direkt aus der Greensfunktion
- Impulsverteilung $\langle n(q) \rangle$ nach Gl. (7.13) und (3.5) bis (3.8)
- lokale Magnetisierung nach Gleichungen (3.14) und (3.6)
- Spin-Spin-Korrelationfunktion nach Gleichungen (3.13) und (3.6)
- Dichte-Korrelationfunktionen $\langle n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \rangle$ nach (3.5) bis (3.8)
- innere Energie nach Gleichungen (4.1) und (3.5) bis (3.8)
- magnetische Strukturfaktoren $S(q)$ nach der Beziehung

$$S(q) = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{iq(R_i - R_j)} \langle (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})(n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}) \rangle \quad (3.18)$$

aus den Gleichungen (3.4) bis (3.8).

- ferromagnetische Suszeptibilität nach Gleichungen (3.18) gemäß

$$\chi(0) = \beta S(0) \quad . \quad (3.19)$$

- q-abhängige Suszeptibilität nach Gleichung (4.2) und den zeitabhängigen Korrelationen (3.16) und (3.17)

mittlere Dichten und Korrelationsfunktionen für

- Elektronen
- Löcher
- Doppelbesetzungen

mit den Definitionen (7.6) und (7.8)

- Cooperpaar-Korrelationsfunktion nach (7.11).

4. Testläufe

4.1. Eindimensionale Systeme

4.1.1. Abhängigkeit vom Diskretisierungsparameter

Die Zerlegung der Zustandssumme Z in L Trotter-Schritte nach Gl.(2.8) führt zu einem Fehler der Ordnung $\Delta\tau^2$. Über den Vorfaktor wissen wir nur, daß er proportional zum Abstoßungsparameter U ist. Daher wird die Abhängigkeit der Mittelwerte von $\Delta\tau$ untersucht. Beispielhaft geschieht dies für den Ring aus 6-Gitterplätzen mit halber Bandfüllung bei $U = 4$ und der Temperatur $T = 1$. Gemessen werden die lokale Magnetisierung (Gl.(3.14)) und die innere Energie pro Gitterplatz

$$E = \frac{1}{N} \langle H \rangle \quad (4.1)$$

(mit H aus (1.2)) in Abhängigkeit von $\Delta\tau$. Nach 500 MC-Sweeps zur Thermalisierung des Systems werden 2000 Messungen, unterbrochen von je 2 Sweeps zur Vermeidung von Autokorrelationen, durchgeführt. In Abb. 1 bzw. 2 sind die Werte von L_0 bzw. E über $\Delta\tau^2$ für $\Delta\tau = \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$ und $\frac{1}{16}$ aufgetragen. Die Fehlerbalken geben den statistischen Fehler an. Der Einfluß von $\Delta\tau$ auf die innere Energie ist größer als auf die lokale Magnetisierung. In beiden Fällen lassen sich die Werte linear auf $\Delta\tau \rightarrow 0$ extrapolieren, und die Abweichungen von den extrapolierten Werten sind für $\Delta\tau < \frac{1}{8}$ kleiner als die statistischen Fehler von 0,5% in L_0 bzw. 5% in E . Für $\Delta\tau \rightarrow 0$ erhält man

$$L_0 \rightarrow 0.586(2) \quad , \quad E \rightarrow 0.178(5)$$

(in Klammern: Fehler in der letzten Dezimalen). Der Wert für L_0 kann mit dem Resultat aus der exakten Diagonalisierung von H.Shiba⁵ für das großkanonische Ensemble verglichen werden. Zahlenwerte sind dort zwar nicht gegeben, aber man kann an der dort gezeigten Kurve ablesen, daß der hier erhaltene Wert im Rahmen des Fehlers mit dem exakten Resultat übereinstimmt.

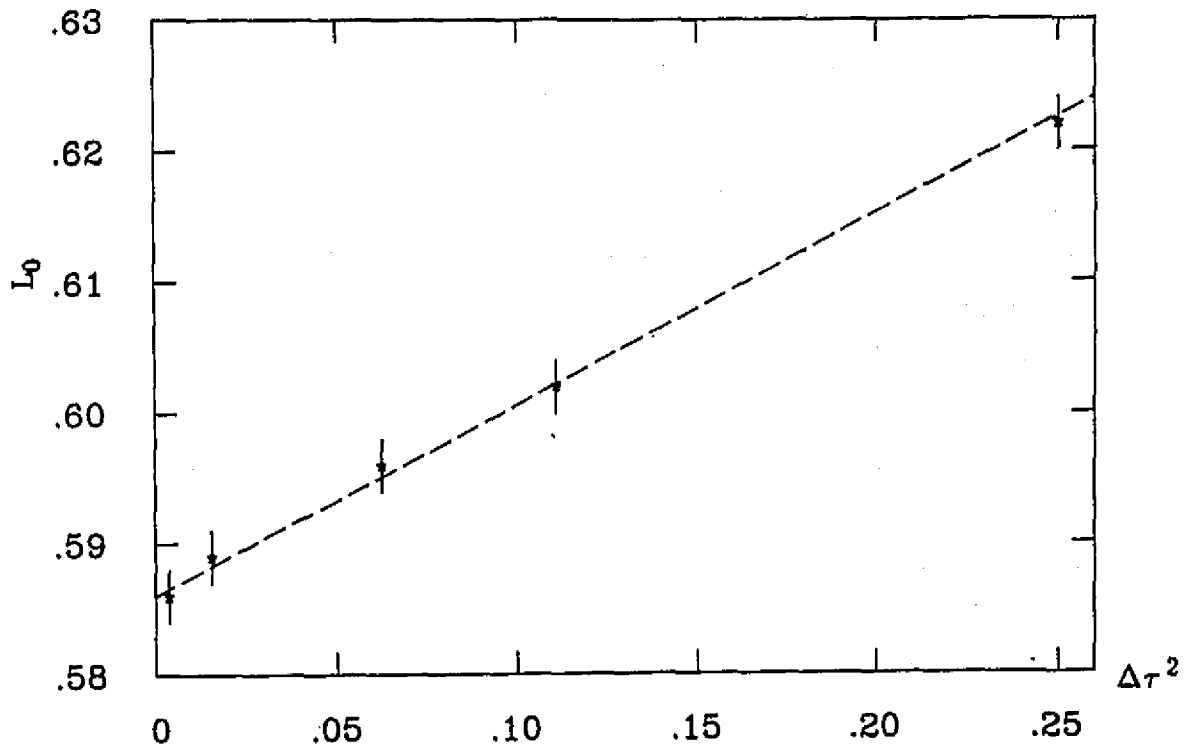


Abb. 1: lokale Magnetisierung des 6er-Rings bei $U=4$, $T=1$ in Abhängigkeit vom Diskretisierungsparameter $\Delta\tau$

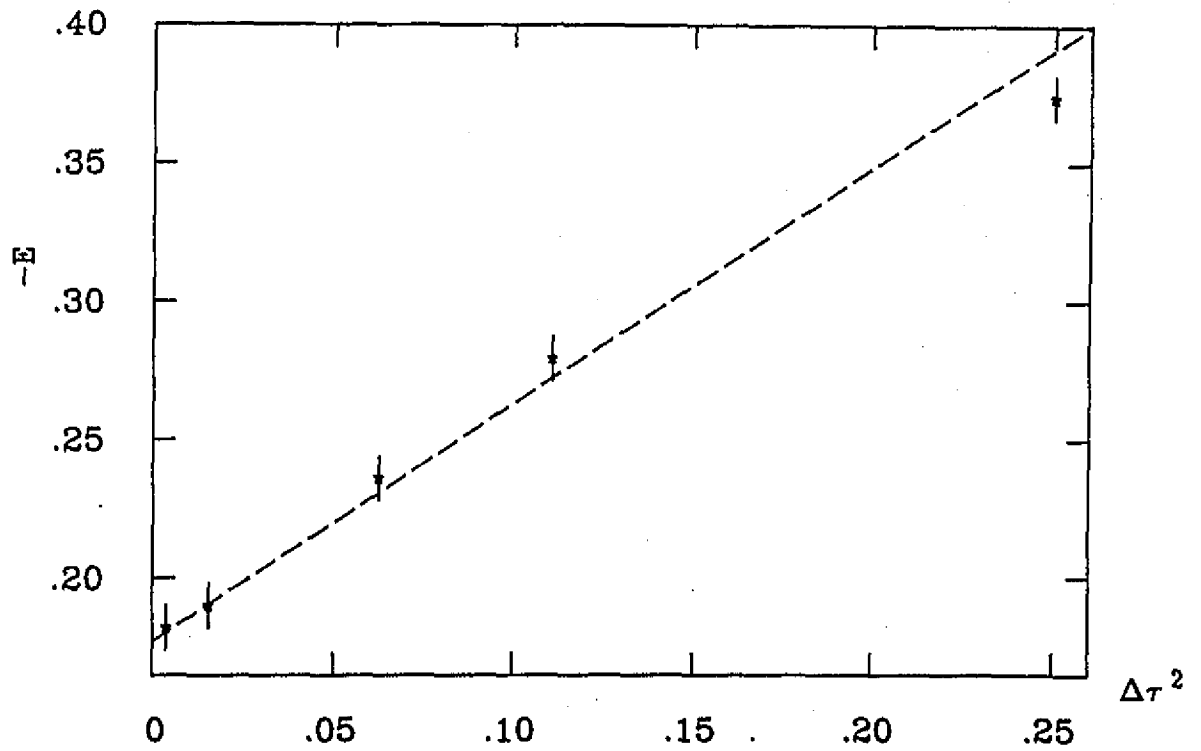


Abb. 2: innere Energie in Abhängigkeit von $\Delta\tau$ (Parameter wie in Abb. 1)

4.1.2. Vergleich mit exakter Diagonalisierung

Der Vergleich mit Resultaten aus der exakten Diagonalisierung endlicher Systeme ist ein guter Test des Algorithmus' und des Programms, weil dabei eine Extrapolation auf den Grundzustand oder den thermodynamischen Limes überflüssig ist. Zum Vergleich werden insbesondere die Resultate für den Ring aus 6 Gitterplätzen (das größte exakt diagonalisierte System von H.Shiba⁵) bei halber Bandfüllung herangezogen. Die lokale Magnetisierung (siehe Gl.(3.14)), die Spin-Spin-Korrelationsfunktion für benachbarte Gitterplätze L_1 (Gl.(3.12)) sowie die ferromagnetische Suszeptibilität $\chi(0)$ (Gl.(3.19)) sind die zu vergleichenden Observablen. Die Zahl der MC-Sweeps wird in der Regel wie in Kap. 4.1.1 gewählt. Bei tiefen Temperaturen wird die Zahl der Messungen wegen der starken Fluktuationen in C_1^{SS} auf bis zu 5000 erhöht. Es wurden Simulationen bei verschiedenen Temperaturen zwischen $T = 5$ und $T = \frac{1}{8}$ und verschiedenen Werten des Coulomb-Parameters U (0,4 und 8) durchgeführt. $\Delta\tau$ wurde abhängig von U zu $\frac{1}{4}, \frac{1}{8}$ bzw. $\frac{1}{12}$ gewählt. Abbildung 3 zeigt die lokale Magnetisierung in Abhängigkeit von der Temperatur für den 6-er Ring bei $U = 4$ und $U = 8$. Die durchgezogenen Linien sind die Resultate von H.Shiba, die Kreuze (Kreise) Ergebnisse der MC-Simulationen bei $U = 4(8)$. Die Werte liegen im Rahmen der statistischen Fehler (etwa 1%) auf der exakten Kurve. Für den wechselwirkungsfreien Fall $U = 0$ ist bei halber Bandfüllung (ein Elektron pro Gitterplatz) die Wahrscheinlichkeit, genau ein Elektron- d.h. ein magnetisches Moment- auf dem Gitterplatz j zu finden, $\frac{1}{2}$. Das lokale magnetische Moment beträgt daher $L_0(U = 0) = \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{2} = \frac{3}{8} = 0.375$. Die MC-Simulation liefert exakt diesen Wert.

Die Spin-Spin-Korrelationsfunktion C_1^{SS} (Abb.4) ist nur für Temperaturen $T < 1$ merklich von null verschieden und fluktuiert stärker als bei der lokalen Magnetisierung; die Übereinstimmung mit der exakten Kurve (durchgezogene Linie) ist aber im Rahmen der statistischen Fehler wiederum gegeben.

Die magnetische Suszeptibilität $\chi(0)$ ist bis auf einen Faktor $\frac{4\beta}{3}$ die Summe über alle Spin-Spin-Korrelationen. Die Ergebnisse (Abb. 5) liegen daher erwartungsgemäß wieder im Rahmen der statistischen Fehler auf der exakten Kurve.

Die Fluktuationen nehmen mit sinkender Temperatur zu; bei Temperaturen $T < \frac{1}{4}$ treten die erwähnten numerischen Instabilitäten auf. Daher wurde für tiefe Temperaturen die in Kapitel 5 dargestellte Orthogonalisierung angewendet. Für $U = 0$ läßt sich die exakte Kurve sehr genau reproduzieren. In diesem Fall entfällt die eigentliche MC-Prozedur, da das Isingspin-Hilfsfeld mit U an die Fermionen koppelt. Auch ist die Trotter-Suzuki-Zerlegung (2.8) hier exakt. Die Übereinstimmung der Ergebnisse mit den exakten Resultate bestätigt daher nur, daß das Programm bei der Diagonalisierung der Hoppingmatrix (gem. (2.17)) und bei der Bestimmung der Observablen korrekt ist.

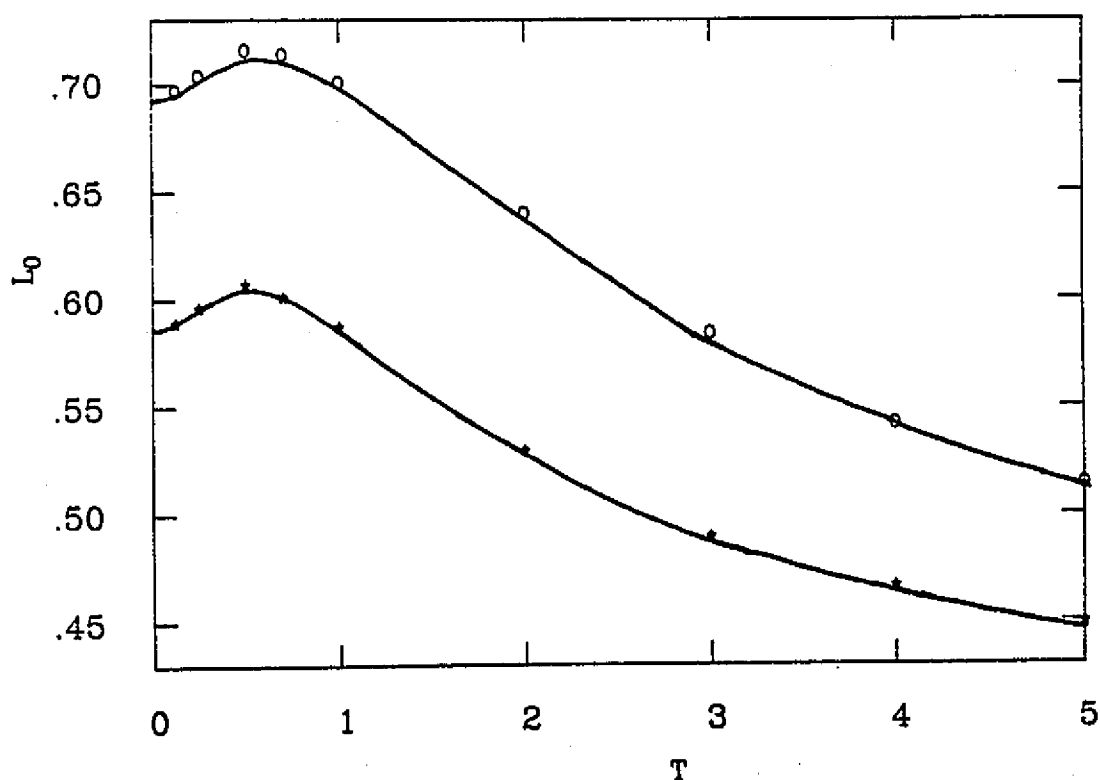


Abb. 3: lokale Magnetisierung des 6er-Rings bei $U=4$ (*)
bzw. $U=8$ (o); exakte Diagonalisierung (—)

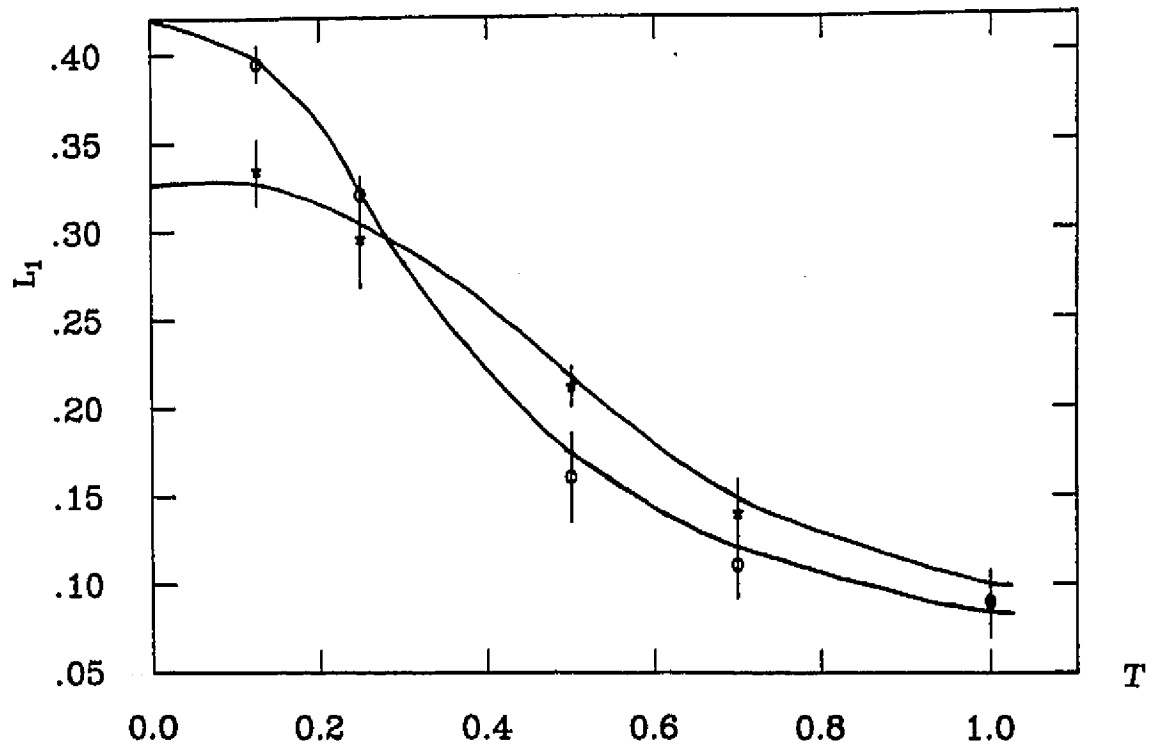


Abb. 4: erste Spin-Spin Korrelationsfunktion des 6er-Rings,
 $U=4$ ($\star$) bzw. $U=8$ ($\circ$); exakt (—)

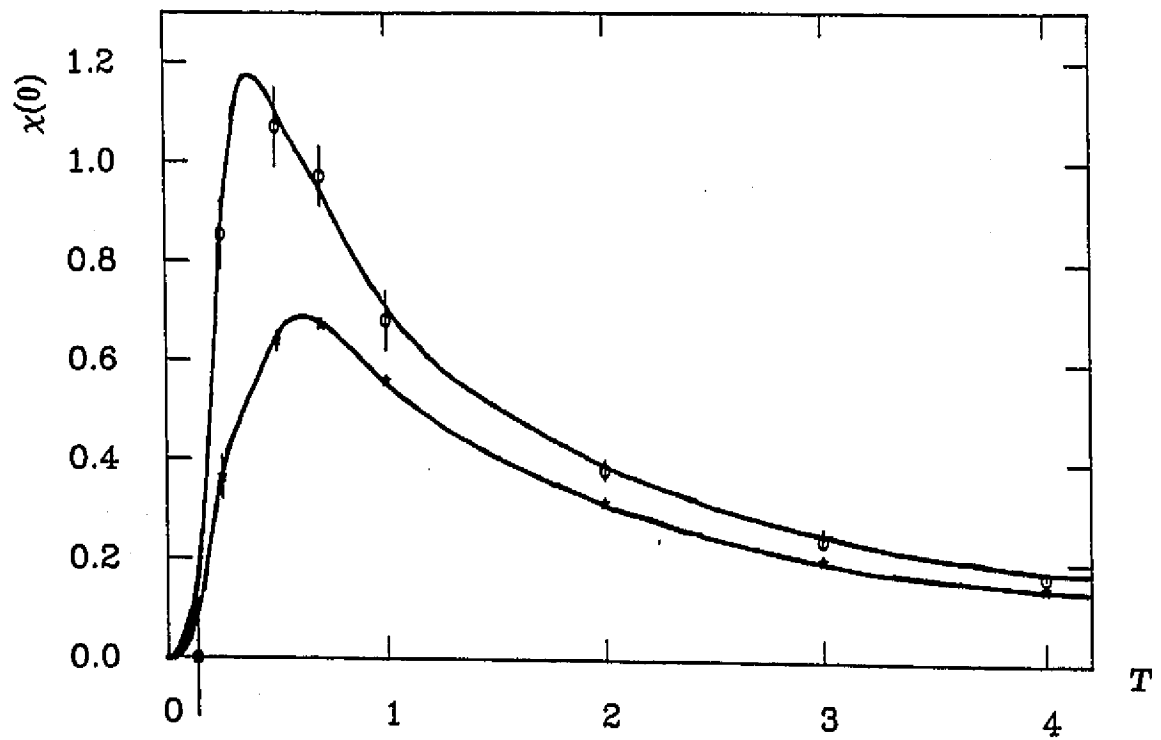


Abb. 5: ferrömagnetische Suszeptibilität des 6er-Rings,
 $U=4$ ($\star$) bzw. $U=8$ ($\circ$); exakt (—)

4.1.3. Abhängigkeit von der Systemgröße

H. Shiba berechnete die innere Energie, die lokale Magnetisierung und die magnetische Suszeptibilität für das eindimensionale Hubbardmodell im Grundzustand im thermodynamischen Limes bei beliebigen Bandfüllungen⁴. Um die Werte aus den MC-Simulationen mit diesen zu vergleichen, ist eine Extrapolation für $T \rightarrow 0$ und $N \rightarrow \infty$ notwendig. Die Abhängigkeit der lokalen Magnetisierung von der Systemgröße N wurde für den Fall $U = 2$ bei halbgefülltem Band ($n = 1$) untersucht. Die Ringlänge N lag dabei zwischen 8 und 48 Gitterplätzen bei inversen Temperaturen β zwischen 24 und 32. Die Änderung von L_0 liegt in diesem Temperaturbereich unter 0.5%. Abb. 6 zeigt die Ergebnisse für L_0 aufgetragen über $1/N^2$. Die Werte lassen sich sehr gut linear auf $N \rightarrow \infty$ extrapolieren. Die Steigung der Geraden ist relativ flach; die Abweichung von L_0 etwa bei $N = 24$ vom extrapolierten Wert $L_0^\infty = 0.488$ beträgt wieder etwa 1%. Die Übereinstimmung mit dem exakten Resultat⁴ ist ebenfalls sehr gut. L_0 konvergiert also recht schnell gegen den thermodynamischen Limes, auch die Temperaturabhängigkeit ist für $\beta > 24$ nicht sehr stark.

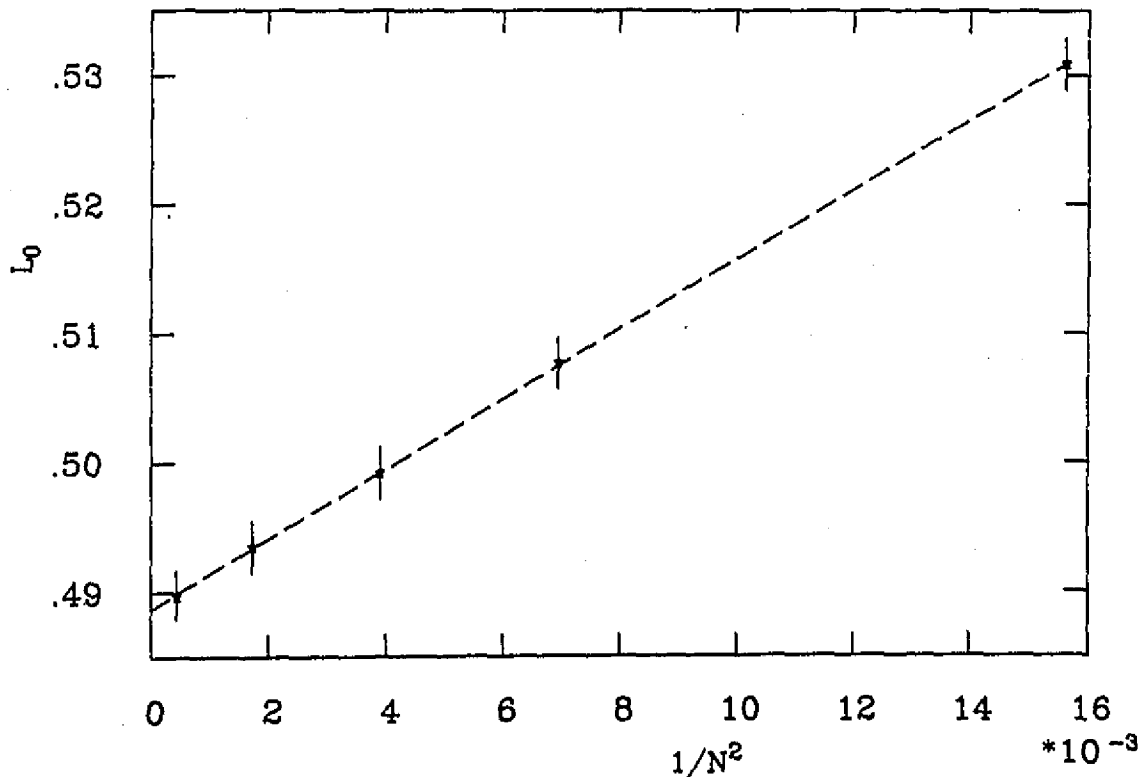
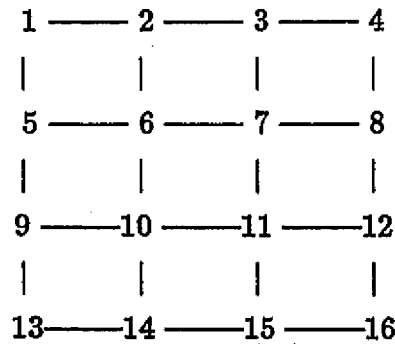


Abb. 6: Systemgrößenabhängigkeit der lokalen Magnetisierung

$U=2, \beta=32$

4.2. Zweidimensionale Systeme

Anschließend wurde das Simulationsprogramm auf den zweidimensionalen Fall erweitert. Dazu braucht für die Monte-Carlo-Prozedur lediglich zu Beginn die Hopping-Matrix umgeändert werden. Außerdem sind gegebenenfalls die Prozeduren zur Bestimmung der Observablen umzuschreiben, falls diese - wie z.B. die q -abhängige magnetische Suszeptibilität - von der Geometrie des Gitters explizit abhängen. Zur Bestimmung der Hopping-Matrix wird das quadratische Gitter (hier das 4×4 -Gitter) z.B. wie folgt durchnummeriert:



Auf diese Weise werden Doppelt-Indizierungen vermieden. Es werden periodische Randbedingungen gewählt. Das 4×4 - und das 6×6 -Gitter wurden mit Coulombparametern $U = 2$ und $U = 4$ simuliert. Die Temperaturen lagen zwischen $T = \frac{1}{8}$ und $T = 3$ (in Einheiten von $\frac{t}{k_B}$). Als Observablen dienten die innere Energie pro Gitterplatz E aus (4.1), die lokale Magnetisierung L_0 aus (3.12), die ferromagnetische Suszeptibilität $\chi(0,0)$ nach (3.18) und (3.19) sowie die *staggered* Suszeptibilität $\chi(\pi, \pi)$ mit

$$\begin{aligned}
 \chi(\vec{q}) &= \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \int_0^\beta d\tau \langle [n_{i\uparrow}(\tau) - n_{i\downarrow}(\tau)] [n_{j\uparrow}(0) - n_{j\downarrow}(0)] \rangle \\
 &= \frac{\Delta\tau}{N} \sum_{ij} e^{i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \sum_{l=1}^L \langle [n_{i\uparrow}(l) - n_{i\downarrow}(l)] [n_{j\uparrow}(0) - n_{j\downarrow}(0)] \rangle \quad (4.2)
 \end{aligned}$$

$\chi(\vec{q})$ verknüpft Größen aus verschiedenen Trotterschritten. Dazu ist nach (3.16) z.B.

$$\langle c_i(l) c_j^\dagger(0) \rangle = [B(l) \cdots B(1) (I + B(L) \cdots B(1))]_{ij} = [B(l) \cdots B(1) G(L)]_{ij} \quad (4.3)$$

für $l = 1, \dots, L$ zu berechnen. Daher erfordert die Bestimmung der q -abhängigen Suszeptibilitäten nochmal einen ähnlichen Rechenaufwand wie die eigentliche MC-Prozedur. $\chi(0,0)$ muß im Rahmen der Genauigkeit mit dem magnetischen Strukturfaktor $S(0,0)$ aus (3.18), multipliziert mit der inversen Temperatur, übereinstimmen. Dies war auch stets der Fall, was die Korrektheit der betreffenden Unterprogramme bestätigt.

Die Ergebnisse für das halbgefüllte Band können mit den Resultaten der MC-Simulationen von J.E.Hirsch¹⁶ verglichen werden. Die lokale Magnetisierung (Abb.8) ist gegenüber dem eindimensionalen Fall etwas unterdrückt. Sie zeigt bei sehr tiefen Temperaturen wieder einen Anstieg, der aber mit der Systemgröße kleiner wird. Die Übereinstimmung mit den Resultaten in Ref.16 ist sehr gut. Die ferromagnetische Suszeptibilität $\chi(0,0)$ für $U = 2$ bzw. $U = 4$ wird in den Abbildungen 10 bzw. 11 gezeigt. Zum Vergleich ist $\chi(0,0)$ im wechselwirkungsfreien Fall für das 4×4 -Gitter (gepunktet) und das 6×6 -Gitter (gestrichelt) eingezeichnet. Für $U = 0$ divergiert $\chi(0,0)$ hier logarithmisch mit der inversen Temperatur β . Die Wechselwirkung U erhöht die ferromagnetische Suszeptibilität bei relativ hohen Temperaturen ($T > .75$). Der Anstieg bei tieferen Temperaturen ist bei $U = 4$ dagegen schwächer als bei $U = 2$; außerdem nehmen die Werte mit der Systemgröße ab. Dies impliziert, daß im thermodynamischen Limes keine ferromagnetische Ordnung existiert. Geht man zu noch tieferen Temperaturen ($T < .25$) - dies wurde in Ref.16 wegen der dort fehlenden Orthogonalisierungsmethode nicht durchgeführt -, so stellt man tatsächlich ein Abfallen der ferromagnetischen Suszeptibilität fest. Dagegen wird die staggered magnetische Suszeptibilität $\chi(\pi, \pi)$ durch die Wechselwirkung U bei tiefen Temperaturen drastisch verstärkt (Abb. 12 und 13 mit denselben Symbolen wie oben). Wie im eindimensionalen Fall scheint also hier bei halber Bandfüllung der Coulombparameter U antiferromagnetische Korrelationen zu erzeugen. Die Resultate der Suszeptibilitäten $\chi(0,0)$ und $\chi(\pi, \pi)$ stimmen mit den Werten aus Ref.16 überein. Abbildung 9 schließlich zeigt die innere Energie pro Gitterplatz für das 4×4 - (Sterne) bzw. das 6×6 -Gitter (Kreise). Zum Vergleich sind wieder die Werte für das 6×6 -Gitter im Fall $U = 0$ eingezeichnet (gestrichelte Kurve). Die innere

Energie variiert nur sehr schwach mit der Temperatur und wächst mit U an. Die Abhängigkeit von der Systemgröße ist ebenfalls sehr schwach. Die Unterschiede zwischen den beiden Gittern sind bei den tiefsten Temperaturen kaum größer als der statistische Fehler von rund 2%. Die Übereinstimmung mit den Resultaten von J.E.Hirsch ist wieder sehr gut.

Nach dem *Mermin-Wagner Theorem* kann in zweidimensionalen Systemen wegen thermischer Fluktuationen keine langreichweitige Ordnung bei endlichen Temperaturen auftreten. Obwohl wir bei der MC-Simulation nicht direkt den Grundzustand erzeugen, können wir doch ausreichend tiefe Temperaturen erreichen, bei denen die thermische Korrelationslänge größer als die Systemabmessungen wird. Dann verhält sich das System effektiv wie im Grundzustand, und Quantenfluktuationen in Spin und Ladung sind dominant. Dies wird z.B. in der Spin-Spin-Korrelationsfunktion (Abb. 7) deutlich. Die antiferromagnetischen Korrelationen erstrecken sich bereits bei der inversen Temperatur $\beta = 3$ über das ganze Gitter.

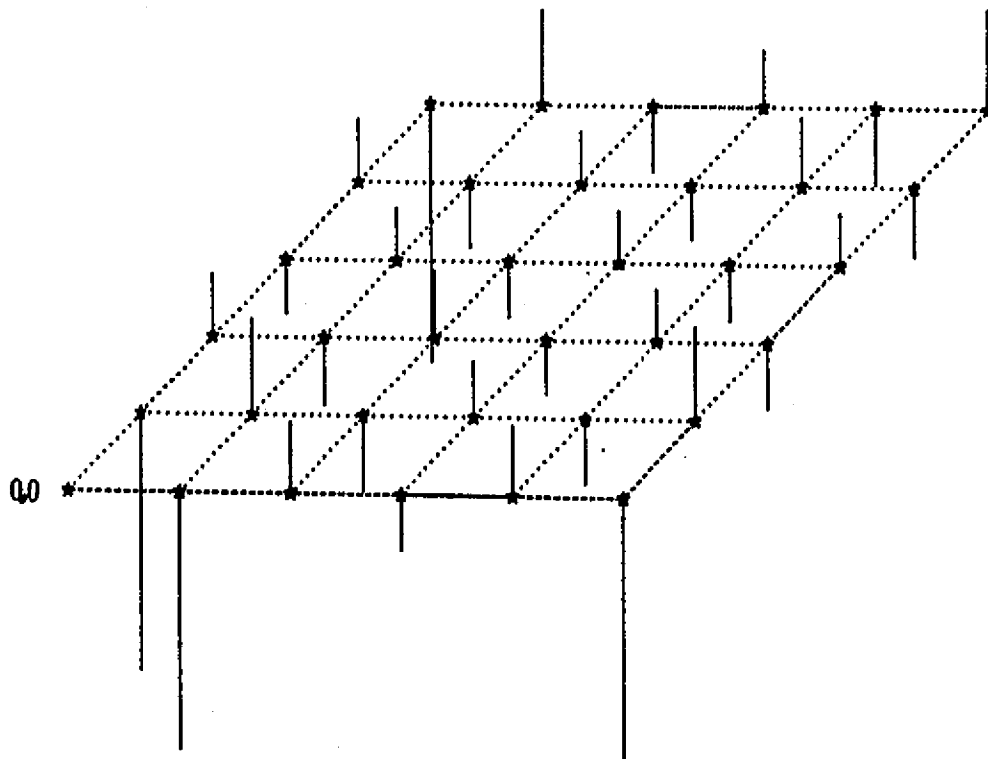


Abb. 7: Spin-Spin Korrelationsfunktion des 6×6 -Gitters, $U=4$, $\beta=3$

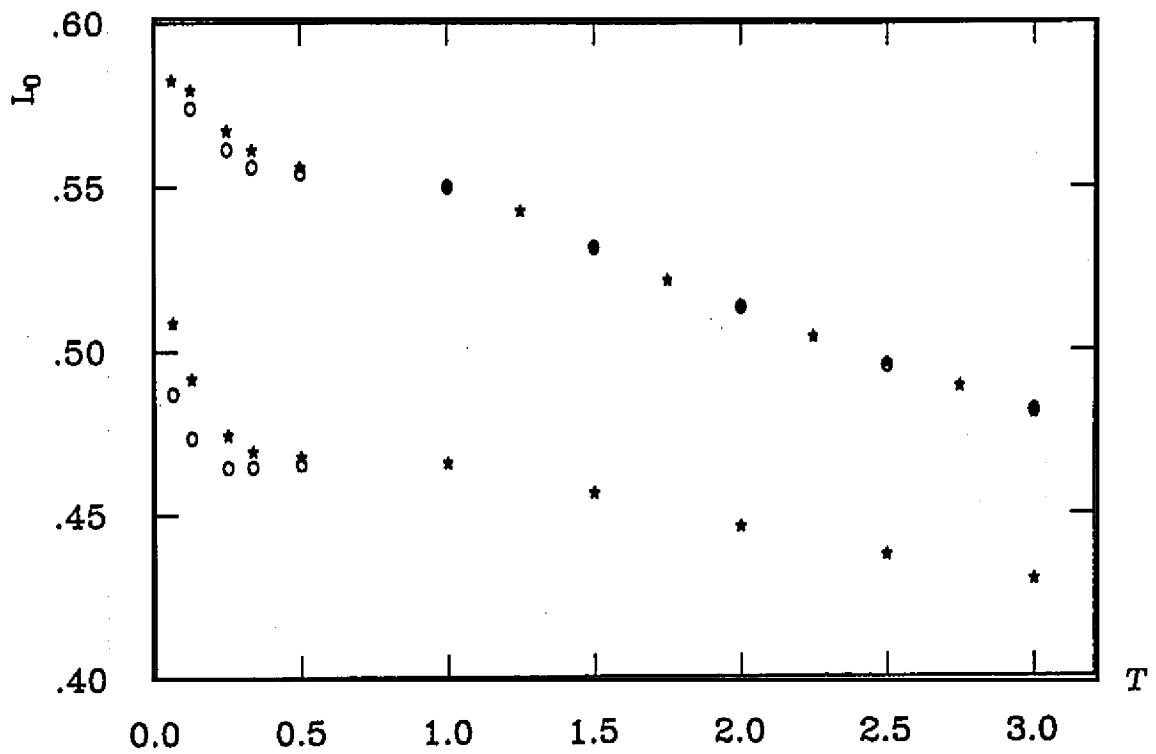


Abb. 8: lokale Magnetisierung des 4×4 -(*) bzw. des 6×6 -Gitters (o)
 obere Kurve: $U=4$, untere Kurve: $U=2$

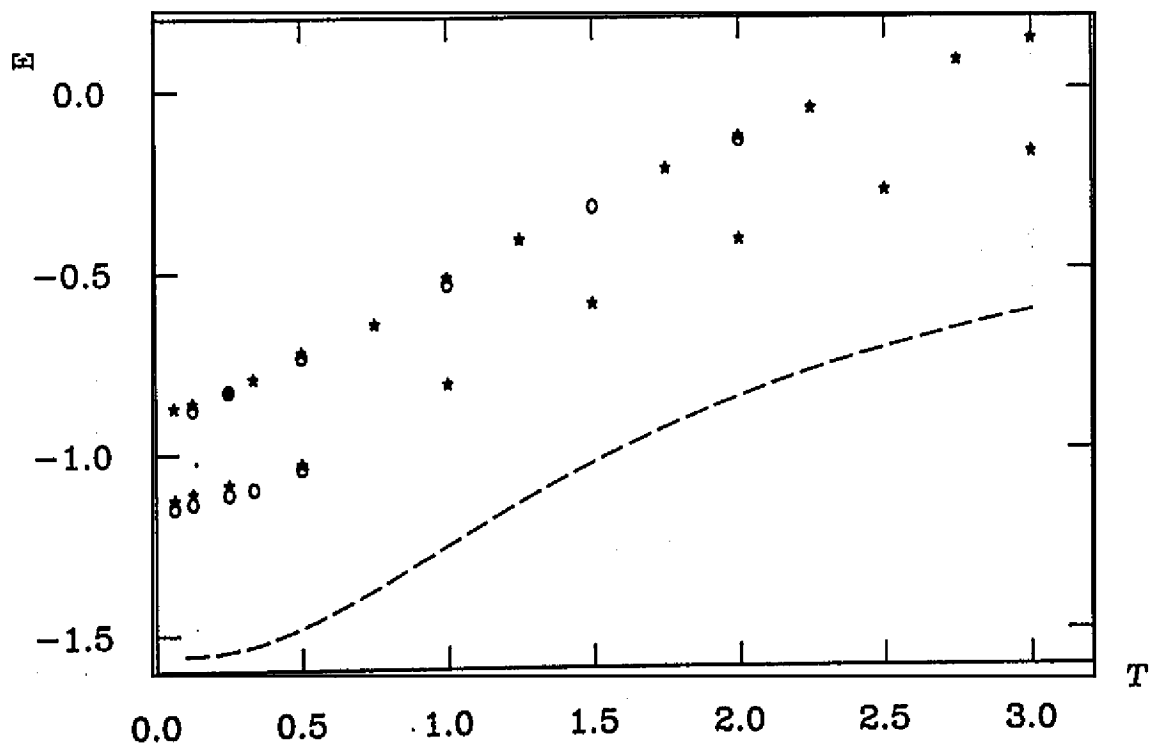


Abb. 9: innere Energie quadratischer Gitter (Parameter wie in Abb. 8)
 gestrichelte Linie: 6×6 -Gitter bei $U=0$

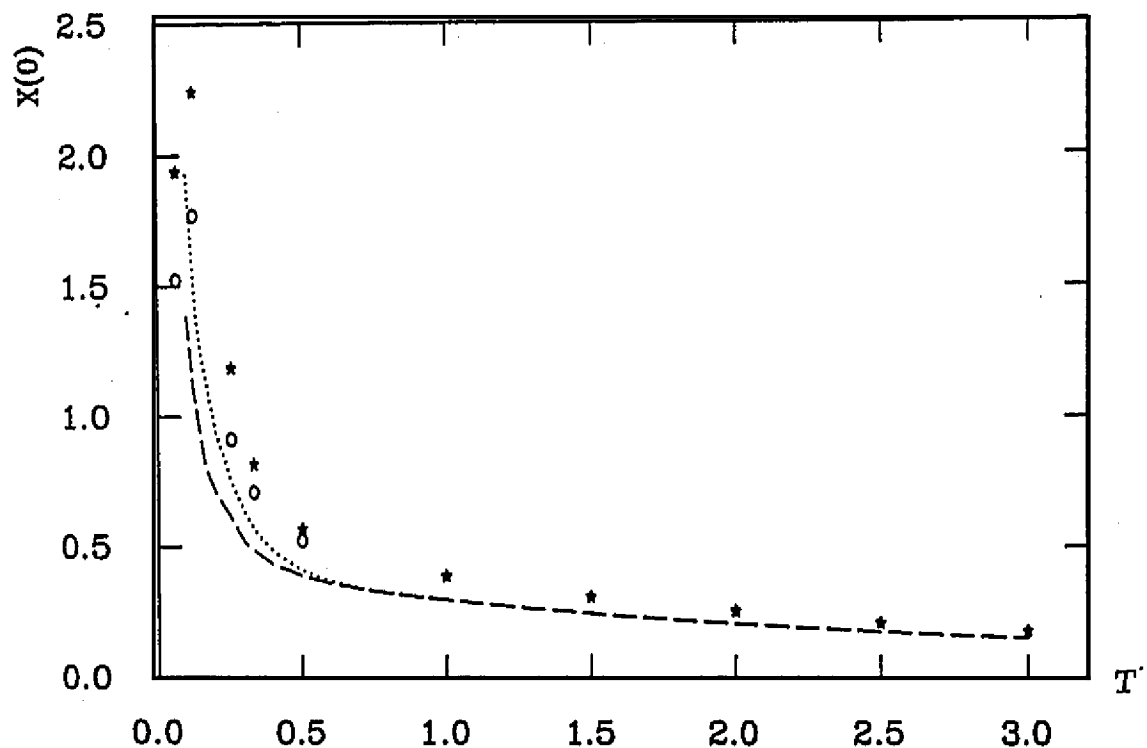


Abb. 10: ferromagnetische Suszeptibilität für das 4×4 -Gitter bei $U=0$ (···) bzw. $U=2$ (*) und das 6×6 -Gitter bei $U=0$ (---) bzw. $U=2$ (o)

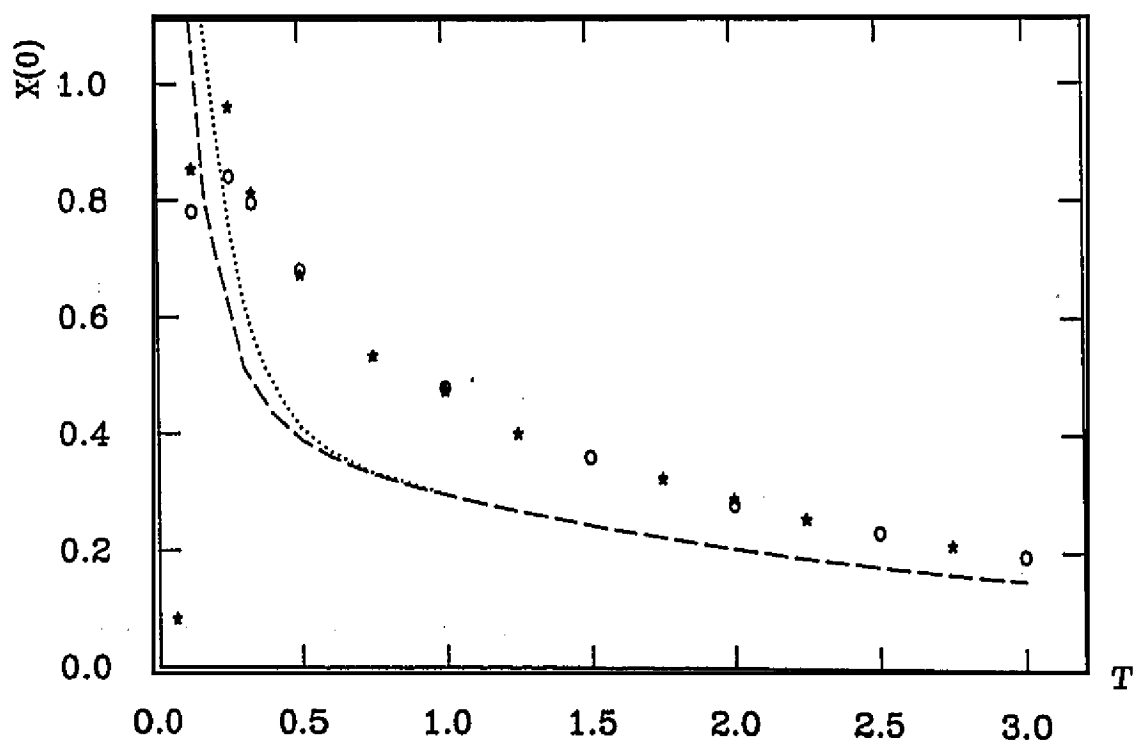


Abb. 11: ferromagnetische Suszeptibilität bei $U=4$
(sonstige Symbole wie in Abb. 10)

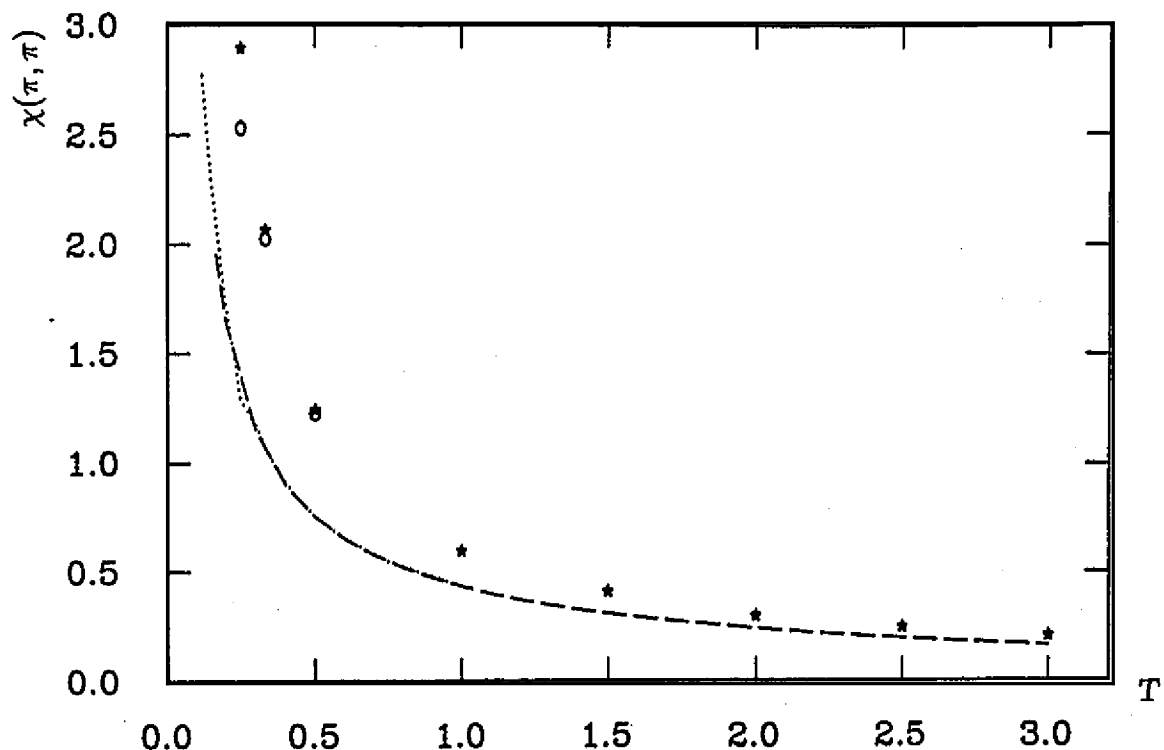


Abb. 12: staggered magnetische Suszeptibilität bei $U=2$

(Symbole wie in Abb. 10)

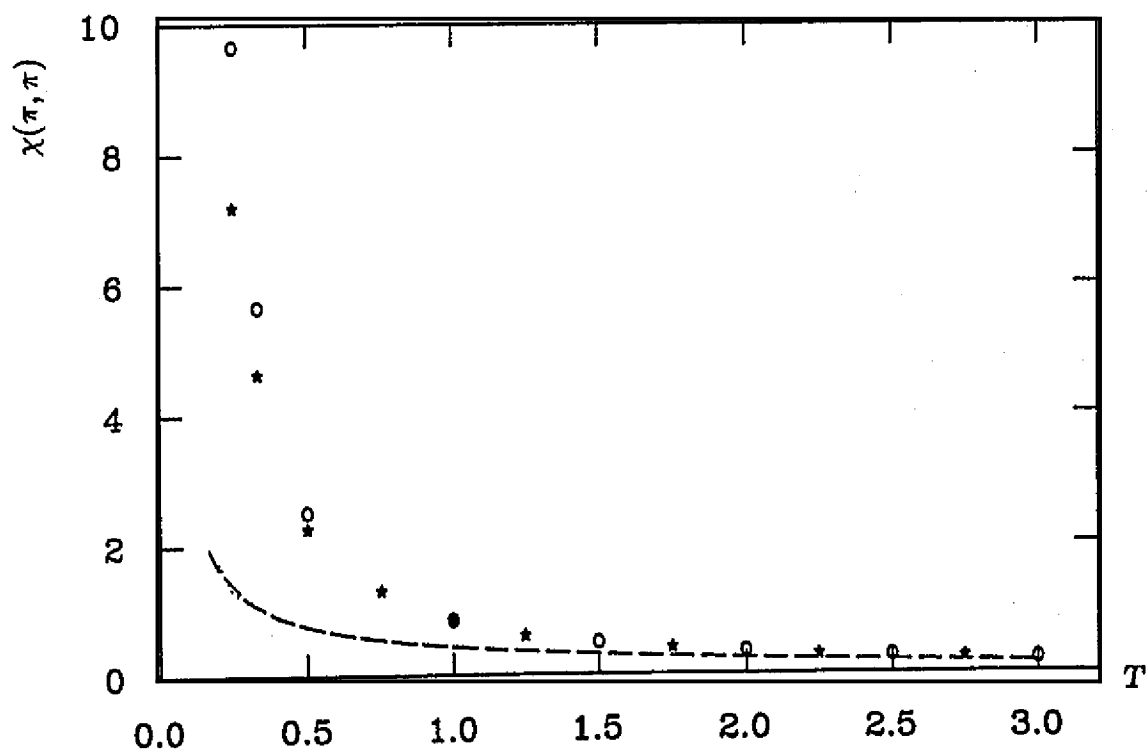


Abb. 13: staggered magnetische Suszeptibilität bei $U=4$

(Symbole wie in Abb. 11)

4.3. Dreidimensionale Systeme

Im Gegensatz zu ein- und zweidimensionalen Systemen ist hier eine langreichweitige magnetische Ordnung auch bei endlichen Temperaturen möglich. Daher erwartet man im dreidimensionalen Hubbardmodell bei halber Bandfüllung einen Phasenübergang zum antiferromagnetischen Isolator bei einer kritischen Temperatur T_N , der *Neél*-Temperatur. Zur Untersuchung dieses Verhaltens sind u.a. auch MC-Simulationen durchgeführt worden^{17,18}. In Ref.17 werden die Ergebnisse aus zwei verschiedenen Algorithmen verglichen. Diese sind der auch in dieser Arbeit verwendete MC-Algorithmus von J.E.Hirsch. et.al. sowie das sog. *hybrid-molecular-dynamics* (HMD)-Verfahren¹⁹. Beim HMD-Verfahren werden die Fermionendeterminanten und daraus die statistischen Gewichte (vgl. Gleichungen (2.24) ff.) nicht exakt ausgerechnet, sondern durch Einführen eines weiteren Hilfsfeldes mit Methoden der Molekulardynamik bestimmt. Die Rechenzeit wächst hier etwa linear mit der Systemgröße, weshalb sehr große Systeme (bis 10^3 Gitterplätzen) simuliert wurden. Dafür sind die Ergebnisse für einen weiteren Diskretisierungsparameter ($\epsilon \rightarrow 0$) zu extrapolieren. Die Anwendbarkeit des HMD-Algorithmus ist allerdings auf Systeme mit positiven Determinantenprodukten beschränkt, d.h. beim Hubbardmodell in Dimensionen $d > 1$ auf den Fall der halben Bandfüllung.

Auf kubischen Gittern der Größe 4^3 bis 10^3 wurden in Ref. 17 und 18. verschiedene Observablen wie lokale Magnetisierung, innere Energie, spezifische Wärme und staggered magnetische Suszeptibilität in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmt. Die Ergebnisse bei Werten von U zwischen 2 und 6 deuten auf einen Phasenübergang 1. Ordnung hin. Die *Neél*-Temperatur z.B. bei $U = 4$ beträgt hiernach etwa 0.33. Für größere Werte von U liegen noch keine gesicherten Aussagen vor; die Ergebnisse der beiden Verfahren weichen hier deutlich voneinander ab. Simulation mit dotierten Systemen ($n \neq 1$) sind bisher noch nicht durchgeführt worden. Als weiteren Test wurden die lokale Magnetisierung, die innere Energie und die antiferromagnetische Suszeptibilität für das 4^3 -Gitter bei Tem-

peraturen zwischen $\frac{1}{2}$ und 6 ermittelt (Abbildungen 14 bis 16).

Deutlich zu erkennen ist der starke Anstieg der staggered magnetischen Suszeptibilität zu tiefen Temperaturen. Zum Vergleich sind wieder die Resultate für den wechselwirkungsfreien Fall als gestrichelte Linien angegeben. (Die lokale Magnetisierung ist bei $U = 0$ stets exakt $\frac{3}{8}$.) Es wurden für jeden Temperaturpunkt nach 500 MC-Sweeps zur Thermalisierung 1000 Messungen, unterbrochen von je 2 MC-Sweeps, durchgeführt. Die Übereinstimmung mit den Resultaten aus Ref. 17 und 18 ist im Rahmen der statistischen Fehler sehr gut.

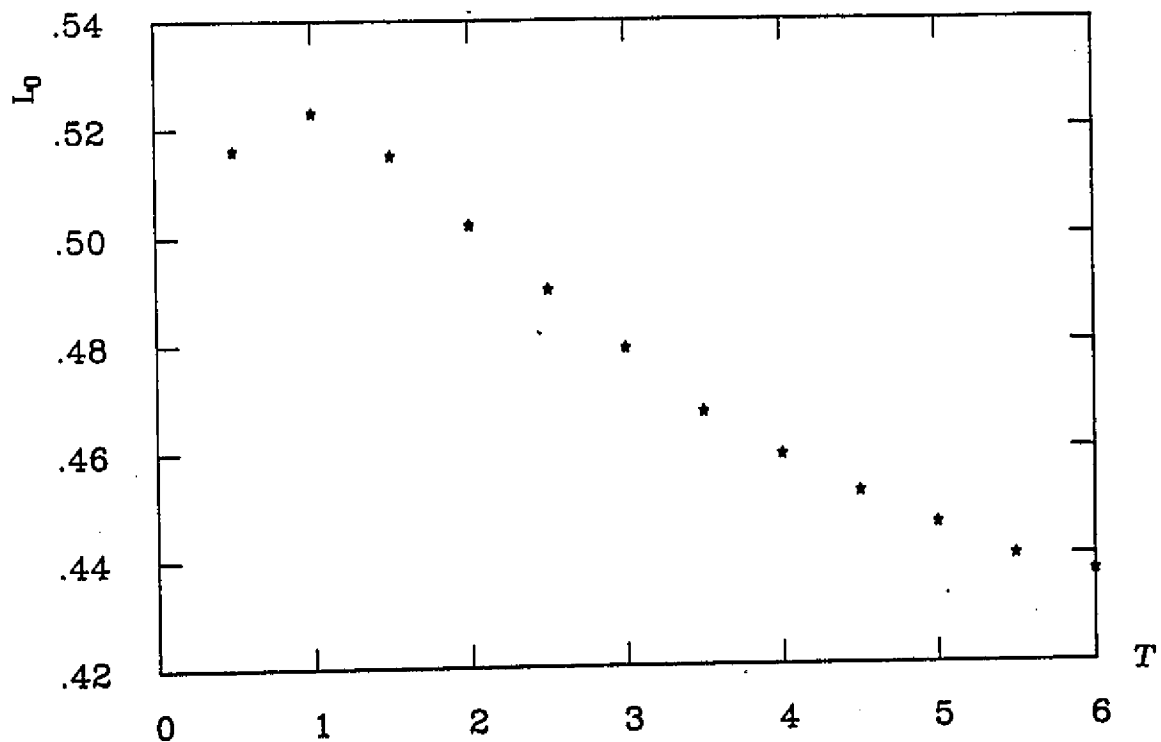


Abb. 14: lokale Magnetisierung des 4^3 -Gitters bei $U=4$

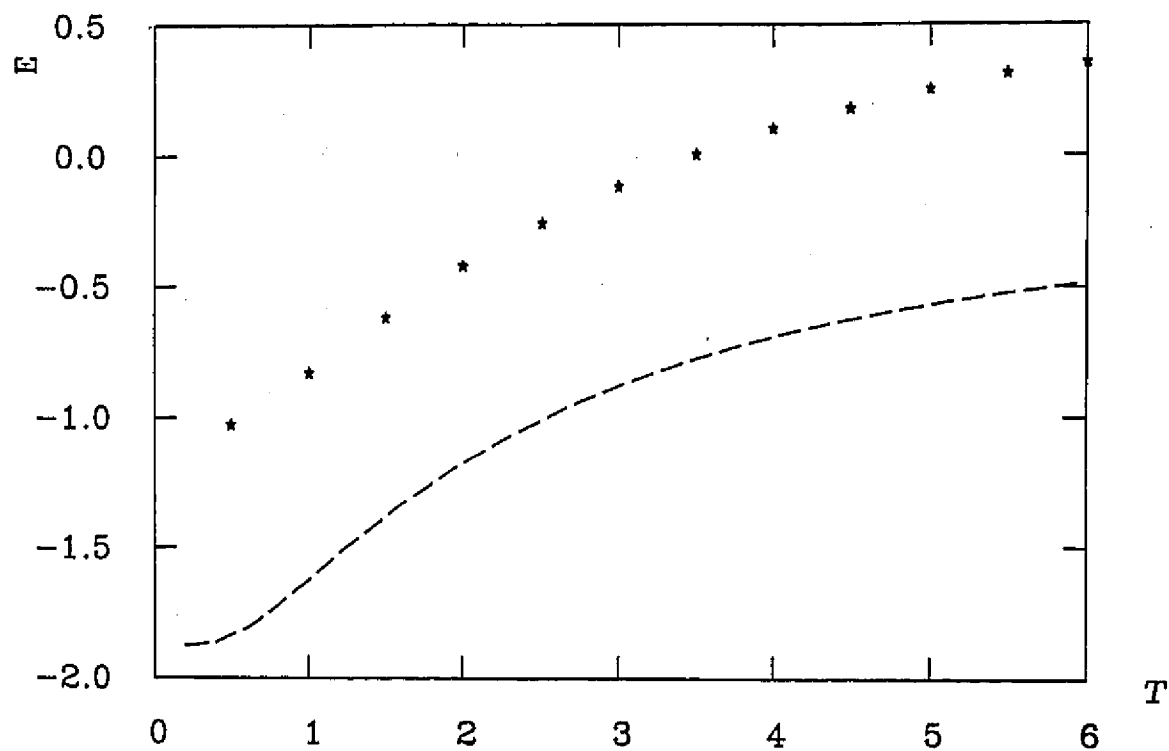


Abb. 15: innere Energie des 4^3 -Gitters bei $U=4$ (gestrichelte Linie: $U=0$)

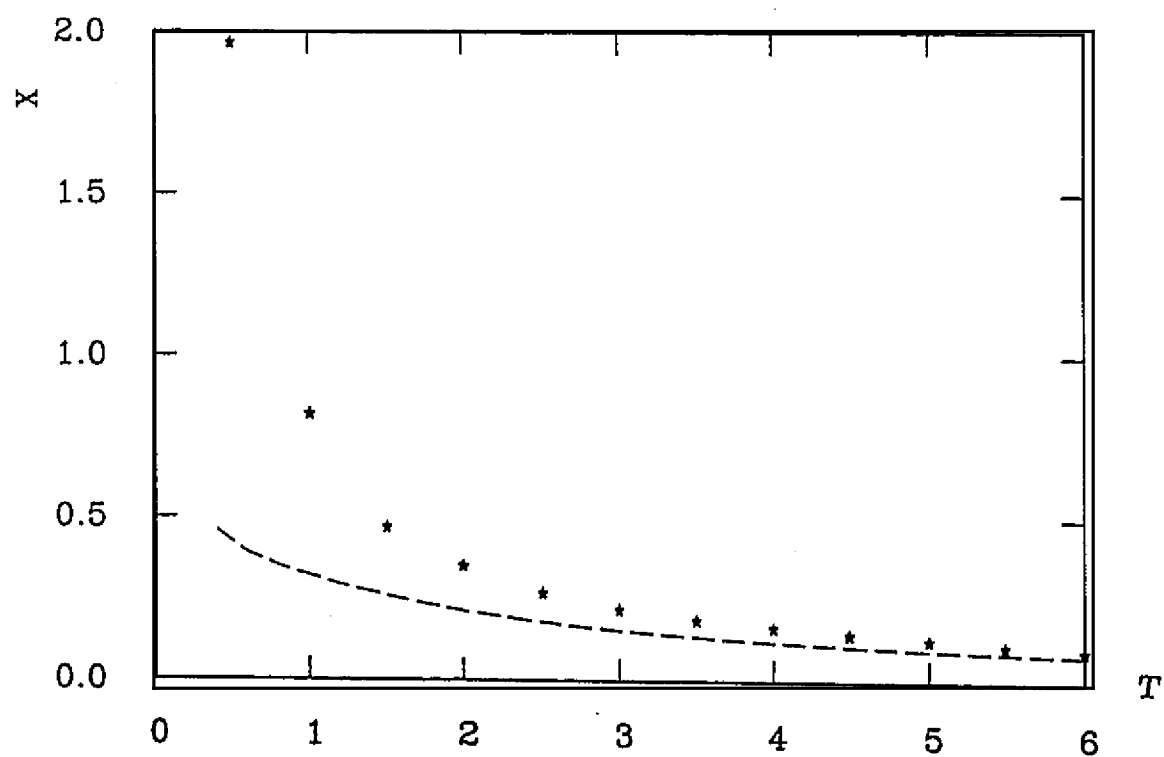


Abb. 16: staggered magnetische Suszeptibilität des 4^3 -Gitters (gestrichelte Linie: $U=0$)

5. Numerische Instabilitäten

Wie bereits erwähnt ist der in Kapitel 2 beschriebene Algorithmus nur für Temperaturen bis etwa $T \simeq \frac{1}{4}$ numerisch stabil. Die Matrizen $A^\sigma(l)$ aus Gleichung (2.27) besitzen mit wachsender inverser Temperatur β sehr große und betragsmäßig sehr kleine Eigenwerte. Durch diese werden bei jeder Multiplikation einige Richtungen des Vektorraums unterdrückt, andere verstärkt, was schließlich zu Rundungsfehlern führt, die die eigentlichen Werte in den Matrizen überragen. Diese Auslöschungen treten bei der Multiplikation mit orthogonalen Matrizen natürlich nicht auf. Daher wird in dem Produkt (2.27)

$$A^\sigma(l) = B^\sigma(l)B^\sigma(l-1)\cdots B^\sigma(l+1) \quad ,$$

(das z.B. von rechts ausgehend aufmultipliziert wird,) die jeweils rechts stehende Matrix so zerlegt, daß nur orthogonale Matrizen aufzumultiplizieren sind. Dazu eignet sich eine *QDR-Zerlegung*; dabei ist Q eine orthogonale, D eine diagonale Matrix und R eine obere Dreiecksmatrix mit Diagonalelementen $R_{ii} = 1$. Dazu wird die Matrix mittels *Housholder-Transformationen*²¹ in das Produkt QR zerlegt, und anschließend werden die Zeilen von R so normiert, daß $R_{ii} = 1$ gilt. D enthält die ehemaligen Diagonalelemente von R . Die Produktbildung läuft wie folgt ab (ohne Elektronen-Spin σ , o.B.d.A. $l = L$):

$$\begin{aligned} B(L)B(L-1)\cdots B(2)B(1) &= \cdots B(2)Q_1D_1R_1 = \cdots B'(2)D_1R_1 \\ &= \cdots B''(2)R_1 = \cdots Q_2D_2R_2' R_1 = \cdots Q_2D_2R_2 \quad . \end{aligned} \quad (5.1)$$

Dabei wird zunächst $B(1)$ QDR-zerlegt. Dann wird erst Q_1 auf $B(2)$ multipliziert, auf das Ergebnis dann D_1 . Das Produkt wird anschließend wiederum QDR-zerlegt und die beiden R -Matrizen werden multipliziert (das Produkt ist wieder eine normierte obere Dreiecksmatrix). Dieses Verfahren wiederholt sich bis das gesamte Produkt gebildet ist. Die großen und kleinen Eigenwerte stecken nun in den D -Matrizen. Die Dreiecksmatrizen sind zwar nicht notwendigerweise

gut konditioniert, in der Praxis hat sich aber herausgestellt, daß die numerische Stabilität zumindest für $\beta \leq 100$ gegeben ist (vgl. auch Ref. 20). Pro Multiplikationsschritt sind hierbei eine volle Matrixmultiplikation, eine Multiplikation von Dreiecksmatrizen und eine QDR-Zerlegung erforderlich. Die QDR-Zerlegung ist wie die Multiplikation ein N^3 -Prozeß (N = Matrixdimension) und erfordert für große N etwa 1,5 mal soviel Rechenzeit wie diese. Insgesamt erhöht sich die Rechenzeit pro Schritt für große N um einen Faktor von knapp 3. Allerdings braucht die QDR-Zerlegung nicht nach jedem Multiplikationsschritt durchgeführt zu werden, sondern nur nach einer Anzahl m von gewöhnlichen Multiplikationen bis die Rundungsfehler eine bestimmte Schwelle überschritten haben. Der Einteilchenpropagator $G(l)$ wird dann aus dem QDR-zerlegten Produkt $A(l)$ wie folgt berechnet:

$$\begin{aligned}
G(l) &= [1 + A(l)]^{-1} = [1 + QDR]^{-1} \\
&= [Q(Q^{-1}R^{-1} + D)R]^{-1} = [Q(Q'D'R')R]^{-1} \\
&= [\tilde{Q}D'\tilde{R}]^{-1} = \tilde{R}^{-1}D'^{-1}\tilde{Q}^{-1}
\end{aligned} \tag{5.2}$$

Dabei wurde der Ausdruck in runden Klammern in der zweiten Zeile QDR-zerlegt, und die Q- und die R-Matrizen jeweils miteinander multipliziert. Nur die Matrix $\tilde{R}$ braucht tatsächlich invertiert zu werden. Die Inverse der orthogonalen Matrix $\tilde{Q}$ ist gleich ihrer Transponierten, und die Invertierung der Diagonalmatrix D' bedeutet die Inversion der Diagonalelemente. Das Fortschreiten der Greensfunktion von einem Trotter-Schritt l zum nächsten nach (2.36) führt durch die Multiplikation von $B(l+1)$ und $B(l+1)^{-1}$ zu einer ähnlichen Propagation von Rundungsfehlern wie oben. Die Anzahl $\tilde{m}$ von *Updatings* dieser Form, die numerisch stabil durchgeführt werden kann, ist etwa gleich m . Dann ist wieder eine Neuberechnung der Greensfunktion nach Gleichung (2.32) erforderlich. Die Zahl m ist für feste Diskretisierungsgröße $\Delta\tau$ unabhängig von β . Es zeigt sich, daß etwa für $\Delta\tau \cdot m \leq 1.5$ die Berechnungen numerisch stabil bleiben. Bei einem realistischen Wert von etwa $\Delta\tau = \frac{1}{8}$ braucht also nur nach jeder 12. Matrixmultiplikation eine QDR-Zerlegung durchgeführt zu werden, bzw. nach jedem

12. Updating von $G^\sigma(l)$ nach (2.36) ist eine Neuberechnung der Greensfunktionen aus dem Isingspin-Hilfsfeld nach (2.32) durchzuführen. Andererseits wächst die Zahl der Trotter-Schritte L nach der Beziehung $\Delta\tau = \beta/L$ linear mit der inversen Temperatur. Daher steigt der Anteil der vollständigen Neuberechnungen der Greensfunktion mit β an, weshalb diese dann den größten Teil der Rechenzeit kosten. m MC-Sweeps durchs Ortsgitter erfordern folgende Prozeduren:

- m Updatings nach (2.36).
- $L - \frac{L}{m}$ gewöhnliche Matrixmultiplikationen
- $\frac{L}{m}$ Prozeduren nach (5.1), jede entspricht 3 Matrixmultiplikationen

Die Gesamtzahl von Matrixmultiplikation (bzw. in der Rechenzeit äquivalenter Prozesse) für einen vollständigen MC-Sweep durchs Orts- und Zeitgitter beträgt somit $\frac{L}{m}(2m + L + 2\frac{L}{m})$. Sie wächst also quadratisch mit L , d.h. mit der inversen Temperatur β . Daher ist eine Reduktion der Anzahl von Matrixmultiplikationen sehr wünschenswert.

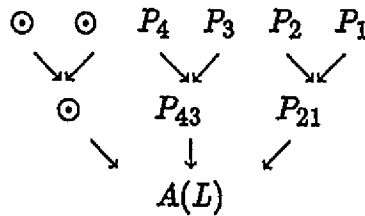
6. Steigerung der Effizienz

6.1. Reduktion von Matrixmultiplikationen

Die Zahl der Matrixmultiplikationen zur Bestimmung des Einteilchenpropagators G^σ nach Gleichung (2.27) und (2.32) wächst quadratisch mit der Zahl der Trotter-Schritte L und damit mit der inversen Temperatur β . Durch das Abspeichern von Zwischenprodukten in einer hierarchischen Struktur kann diese Abhängigkeit auf $L \log L$ reduziert werden. Dies soll im Folgenden dargestellt werden. Jeweils m B -Matrizen aus (2.26) können ohne numerische Probleme miteinander multipliziert werden. Die resultierenden $\frac{L}{m}$ Produkte (ohne Elektronenspin σ):

$$P_k = B_{mk} \cdots B_{m(k-1)+2} B_{m(k-1)+1} \quad (k = 1, \dots, L/m) \quad . \quad (6.1)$$

werden QDR-zerlegt und gespeichert. Die Berechnung des gesamten Produkts $A(L)$ sei an dem Beispiel $\frac{L}{m} = 4$ gezeigt:



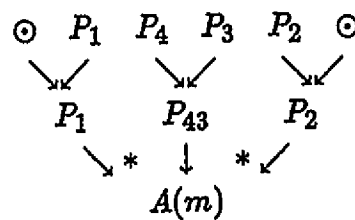
Dabei deuten die Pfeile auf das Produkt der beiden oben stehenden Matrizen hin. $\odot$ sind Platzhalter; sie werden später benötigt und wirken bei der Multiplikation wie Einheitsmatrizen, d.h. die Multiplikation braucht gar nicht durchgeführt zu werden. Die Multiplikation zweier QDR-zerlegter Matrizen wird folgendermaßen durchgeführt:

$$\begin{aligned} Q_2(D_2 R_2)(Q_1 D_1) R_1 &= Q_2(R_2' Q_1') R_1 \\ &= Q_2(QDR) R_1 = Q_{21} D_{21} R_{21} \quad . \end{aligned} \quad (6.2)$$

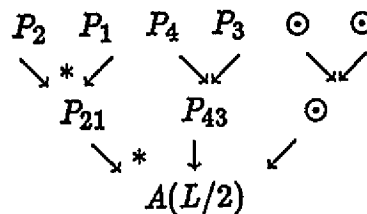
Zuerst werden die Diagonalmatrizen D_2 bzw. D_1 auf R_2 bzw. Q_1 multipliziert. Die resultierenden Ergebnisse werden dann miteinander multipliziert, und das Produkt (in Klammern) QDR-zerlegt. Schließlich werden die Produkte aus den beiden Q- bzw. R-Matrizen gebildet. Dieser Prozeß erfordert insgesamt soviel Rechenzeit wie etwa 3 Matrixmultiplikationen, wenn man die Dreiecksgestalt der R-Matrizen ausnutzt. Aus dem (QDR-zerlegten) $A(L)$ wird der Einteilchenpropagator $G(L) = [1 + A(L)]^{-1}$ wie in (5.2) berechnet. Anschließend kann die Greensfunktion nach einem Sweep durch das Ortsgitter nach Gleichung (2.36) neu bestimmt werden. Nach m Anwendungen dieser Gleichung ist wieder eine vollständige Neuberechnung der Greensfunktion durchzuführen. Dazu ist zu berechnen:

$$A(m) = B_m B_{m-1} \cdots B_1 B_L B_{L-1} \cdots B_{m+1} = P_1 P_{\frac{L}{m}} P_{\frac{L}{m}-1} \cdots P_2 \quad (6.3)$$

In den ersten m Sweeps durchs Ortsgitter ändern sich nur Matrixelemente von $P_1 = B_m \cdots B_1$ durch die Fluktuationen des Ising-Hilfsfeldes. Daher genügt es, P_1 aus dem Ising-Feld neu zu bestimmen, die Matrizen in der obigen Baumstruktur geeignet umzustellen, und alle betroffenen Matrixprodukte im Baum (*) neu zu berechnen:



Die hierarchische Struktur reduziert die Anzahl neu auszuführender Matrixprodukte auf $\log_2 \frac{L}{m}$. Diese Prozedur wird nach jeweils m Sweeps durch das Ortsgitter sinngemäß wiederholt, bis nach $\frac{L}{2m}$ Umstellungen der Matrizen-Baum folgende Gestalt hat: (* deutet wieder neue Produkte an)



Er kann dann durch einfache Verschiebung der Matrizen nach rechts auf die ursprüngliche Form gebracht werden. Weitere $\frac{L}{2m}$ Operationen vervollständigen

einen Sweep durch den Trotter-Raum. Die Zahl der Matrixmultiplikationen (bzw. der QDR-Zerlegungen mit einem Faktor 1.5 gewichtet) für einen der L/m Schritte setzt sich zusammen aus:

- $2m$ für die Bestimmung von $G(l)$ nach Gleichung (2.36)
- $2.5m$ für die Neuberechnung und QDR-Zerlegung eines Blocks P_k
- $3 \log_2 \frac{L}{m}$ für die Multiplikation der Matrizen in der Baumstruktur

Insgesamt sind also $\Sigma = \frac{L}{m}(4.5m + 3 \log_2 \frac{L}{m})$ Matrixmultiplikationen für einen vollständigen Sweep nötig. Das Verfahren ohne Abspeichern der Zwischenprodukte erfordert dagegen $\tilde{\Sigma} = \frac{L}{m}(2m + L + 2 \frac{L}{m})$ Multiplikationen (siehe Kapitel 5). $\frac{\Sigma'}{\Sigma}$ entspricht auch etwa dem Verhältnis der gesamten Rechenzeit, da diese zu ca. 90% für Matrixmultiplikationen und QDR-Zerlegungen verwendet wird. Für typische Werte der Laufparameter - beispielsweise $\beta = 32, \Delta\tau = \frac{1}{8}, L = \beta/\Delta\tau = 256, m = 8$ - beträgt das Verhältnis $\frac{\Sigma'}{\Sigma} \simeq 6.5$, bei $\beta = 128$ und sonst gleichen Parametern erhöht sich das Verhältnis auf etwa 22. Besonders für größere Systeme bei tiefen Temperaturen bewirkt das hier vorgestellte Verfahren also eine deutliche Steigerung der Effektivität. Da die Systemgröße kubisch in die Rechenzeit eingeht, kann für Simulationen bei relativ tiefen Temperaturen (etwa ab $\beta = 30$) die Zahl der Gitterplätze bei gleicher Rechenzeit etwa verdoppelt werden. Der Preis dafür ist ein nicht unerheblicher Speicherplatzbedarf. Für Elektronenspin up und down müssen je $3 \frac{L}{m}$ QDR-zerlegte Matrizen gespeichert werden, d.h. pro Matrix etwa $2N^2$ Einträge. In dem obigen Beispiel ($L = 256, m = 8$) bedeutet dies für ein System von z.B. $N = 100$ Gitterplätzen 192 Matrizen mit je $2 \cdot 10^4$ Einträgen, also einen Speicherplatzbedarf von insgesamt $3.8 \cdot 10^6$ Real-Zahlen, bei Real*8-Zahlen also etwa 30 MByte.

6.2. Beschleunigung der Matrixmultiplikationen

Nach dem die Zahl der Matrixmultiplikationen für einen MC-Sweep reduziert worden ist, soll nun die Zahl der Operationen für eine Matrixmultiplikation verringert werden. Die B -Matrizen nach (2.26)

$$B^\sigma(l) = e^{-\Delta\tau k} e^{-\sigma\Delta\tau v(l)}$$

setzen sich aus einem diagonalen Term $e^{-\sigma\Delta\tau v(l)}$ und der exponenzierten Hopping-Matrix k zusammen. k ist in der Regel nur sehr dünn besetzt, insbesondere wenn nur nearest-neighbor hopping zugelassen ist. Im eindimensionalen Fall ist z.B. nur die erste Nebendiagonale besetzt. Werden im Fall $d = 2$ die Gitterplätze wie in Kap.4.2 beschrieben durchnummeriert, so hat $k^{(2)}$ folgende Block-Gestalt (z.B. für $N = 16$ Gitterplätze):

$$k^{(2)} = \begin{pmatrix} k^{(1)} & I & 0 & I \\ I & k^{(1)} & I & 0 \\ 0 & I & k^{(1)} & 0 \\ I & 0 & I & k^{(1)} \end{pmatrix}$$

Dabei ist I die 4×4 -Einheitsmatrix und

$$k^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

die Hoppingmatrix für den Ring aus 4 Gitterplätzen. $e^{-\Delta\tau k}$ ist zwar streng genommen voll besetzt, aber die Matrixelemente fallen exponentiell mit dem Abstand von der Haupt- bzw. Nebendiagonalen ab. Die Trotter-Suzuki-Zerlegung (2.8) erzeugt einen Fehler in den Erwartungswerten der Ordnung $\Delta\tau^2$. Daher liegt es nahe, die Matrix $e^{-\Delta\tau k}$ nur bis zur ersten oder zweiten Ordnung zu entwickeln:

$$e^{-\Delta\tau k} \simeq I - \Delta\tau k + \frac{1}{2}(\Delta\tau k)^2 + O(\Delta\tau^3) \quad . \quad (6.4)$$

Im Folgenden wird beispielhaft der eindimensionale Fall betrachtet. Hier gilt

$$k_{ij} = \delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1} \quad \text{und} \quad [k]_{ij}^2 = \delta_{i,j+2} + 2\delta_{ij} + \delta_{i,j-2} \quad , \quad (6.5)$$

wobei periodische Randbedingungen gewählt werden, d.h. $N + 1 \rightarrow 1$ etc.. Auf diese Weise verschwinden alle Elemente, die nicht auf der Haupt- oder den ersten beiden Nebendiagonalen liegen. Die vorhandenen Elemente sind bis zur Ordnung $\Delta\tau^2$ exakt.

Eine Verbesserung besteht darin, $e^{-\Delta\tau k}$ zunächst exakt zu berechnen - via Diagonalisierung der Matrix k - und dann die Elemente, die einen Abstand von mehr als z.B. 2 zur Hauptdiagonalen haben, gleich null zu setzen. Dann sind die "wichtigen" Elemente exakt, was eine deutliche Verbesserung in den Ergebnissen bedeutet (siehe Tabelle 1). Eine weitere Methode ist die in Kap.2.2 beschriebene *even-odd*-Zerlegung. Durch diese erhält man zwei Matrizen k_1 und k_2 , die aus jeweils $\frac{N}{2}$ kommutierenden 2×2 Matrizen zusammengesetzt sind. Diese können unabhängig voneinander exponenziert werden. Um $e^{-\Delta\tau k}$ auf eine volle Matrix aufzumultiplizieren, sind hier $4N^2$ Multiplikationen durchzuführen im Vergleich zu N^3 Multiplikation bei vollen Matrizen auf beiden Seiten. Die oben beschriebenen Verfahren mit dem Abschneiden der Nebendiagonalen benötigen dafür $(1 + 2m)N^2$ Multiplikationen, wobei m die Anzahl der berücksichtigten Nebendiagonalen ist. Sie haben den Vorzug, sich auf den Fall von next-nearest-neighbor hopping und für höhere Dimensionen leicht erweitern zu lassen.

Tabelle 1 zeigt die Werte der inneren Energie des 6er-Rings bei $U = 4$ und $T = 2$ für verschiedene Werte des Diskretisierungsparameters $\Delta\tau$. Die Werte bei Abschneiden der Nebendiagonalen bis auf eine oder zwei, bzw. bei Entwicklung von $e^{-\Delta\tau k}$ in erster und zweiter Ordnung wurden ermittelt. Es stellt sich heraus, daß im ersten Fall bereits bei $\Delta\tau = \frac{1}{8}$ die Abweichung vom Ergebnis mit voller Matrixmultiplikation unter 2% liegt, wenn man nur eine Nebendiagonale berücksichtigt. Werden zwei Nebendiagonalen mitgenommen, reduziert sich der Fehler auf unter 0.1%. Dagegen sind die Abweichungen bei Entwicklung nach $\Delta\tau$ relativ groß. Für $\Delta\tau = \frac{1}{8}$ betragen diese etwa 20% bei Entwicklung in erster bzw. 2% bei Entwicklung in zweiter Ordnung. Im Gegensatz zum Verfahren mit Abschneiden der Nebendiagonalen bleibt hier die Spur von $e^{-\Delta\tau k}$, die im Fall $U = 0$ gleich der Summe der exponenzierten Energieeigenwerte ist, nicht erhalten, was die recht großen Abweichungen verursacht. Das erste Verfahren ist dagegen gut anwend-

bar und auch einfach zu implementieren. Es wurde auch für größere Systeme getestet und bringt dort einen erheblichen Gewinn an Rechengeschwindigkeit. Bei Berücksichtigung von zwei Nebendiagonalen werden in der Multiplikation der Streifenmatrix mit einer voll besetzten Matrix z.B. bei $N = 32$ mehr als 80% der Multiplikationen eingespart. Bei tiefen Temperaturen wird daher die meiste Rechenzeit von den dort notwendigen QDR-Zerlegungen beansprucht.

Verfahren	Diskretisierungsparameter $\Delta\tau$		
	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$
<i>volle Matrizen</i>	0.1407	0.1660	0.1730
<i>eine Nebendiagonale</i>	0.1316	0.1632	0.1732
<i>zwei Nebendiagonalen</i>	0.1404	0.1659	0.1730
<i>Entw. in 1.Ordnung</i>	0.0651	0.1349	0.1647
<i>Entw. in 2.Ordnung</i>	0.1567	0.1686	0.1736

Tab.1: Werte der inneren Energie in Abhängigkeit vom Diskretisierungsparameter $\Delta\tau$ für verschiedene Verfahren der Matrizenmultiplikation

7. Das eindimensionale Hubbardmodell

7.1. Exakte Resultate

Der kinetische Anteil (1.3) im Hubbard-Hamiltonian kann im eindimensionalen Fall durch die Transformation in den Impulsraum:

$$c_{\sigma}^{\dagger}(q) = \frac{1}{N} \sum_j e^{iqj} c_{j\sigma}^{\dagger}, \quad q = \frac{2\pi}{N}l, \quad l = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1 \quad (7.1)$$

mit dem Energieeigenwerten $\epsilon(q) = -2 \cos q$ diagonalisiert werden. Die Fermikante liegt dann im Fall $U = 0$ bei $q_F = \frac{n\pi}{2}$ (n : Besetzungsdichte). Was ist bei endlicher Wechselwirkung (1.2) an exakten Resultaten für den thermodynamischen Limes bekannt?

$T = 0$: Die Lieb und Wu- Gleichungen² liefern thermodynamische Größen des Grundzustandes sowohl bei halber Bandfüllung ($n = 1$)^{2,3} als auch bei $n \neq 1$ ⁴. Im singulären Fall $n = 1$ liegt für jeden endlichen Wert des Coulombparameters $U > 0$ ein Isolator mit antiferromagnetischer Kopplung, aber ohne langreichweitige Ordnung vor. Im Fall $n \neq 1$ ist das System ein paramagnetischer Leiter in dem Sinne, daß keine Bandlücke existiert.

$T > 0$: Bei endlichen Temperaturen kann nach dem *Mermin-Wagner Theorem* keine langreichweitige Ordnung mit gebrochener Symmetrie (wie z.B. Magnetisierung) auftreten. Viel mehr kann über die Eigenschaften des Hubbardmodells bei $T > 0$ nicht gesagt werden, da Lösungen der Integralgleichungen von M. Takahashi³ nicht bekannt sind.

Keine Aussagen macht die Lösung von Lieb und Wu über Korrelationsfunktionen und über die Impulsverteilung $n(q)$. Insbesondere ist es nicht klar, ob das eindimensionale Hubbardmodell im Rahmen einer Fermiflüssigkeitstheorie zu beschreiben ist. In einer Fermiflüssigkeit können Anregungen der Elektronen um die Fermikante als Einteilchenzustände (*Quasiteilchen*) beschrieben werden. Dazu ist eine scharfe Fermikante, d.h. ein Sprung von $n(q)$ bei $q = q_F$ notwendig. Diese

Eigenschaften des eindimensionalen Hubbardmodells sind in jüngster Zeit wieder Thema zahlreicher Arbeiten gewesen ^{7,24,26,27}.

7.2. Ergebnisse aus Renormierungsgruppenrechnungen

Ein Modell für schwach wechselwirkende Fermionen in einer Dimension ist das *Tomonaga-Luttinger (TL)*-Modell²². Dieses besitzt keine wohldefinierten Quasiteilchen, ist also keine Fermiflüssigkeit. Das Hubbardmodell kann auf das TL-Modell abgebildet werden, wenn man das Energiespektrum $\epsilon(q)$ des ungestörten Hamiltonians (7.1) um q_F linearisiert. T.Giamarchi und H.J.Schulz²³ berechneten hieraus mit einer Ortsraum-Renormierungs(RG)-Technik das langreichweitige Verhalten von Korrelationsfunktionen (KFen). Sie erhalten einen Abfall der KFe mit dem Abstand der Gitterplätze nach einem Potenzgesetz; z.B. für die Dichte-Dichte- und die Spin-Spin-KF (vgl. Gln. (7.6a,b)):

$$C_j^{NN} = A_1 \cos(2k_F j) j^{-\gamma} + A_2 \cos(4k_F j) j^{-\beta} \quad (7.2a)$$

$$C_j^{SS} = B_1 \cos(2k_F j) j^{-\gamma} \quad (7.2b)$$

mit zusätzlichen logarithmischen Korrekturen. H.J.Schulz²⁴ bestimmte die Exponenten γ und β in Abh. vom Coulomb-Parameter U und der Bandfüllung n . Die Exponenten für einige Spezialfälle sind:

$$\begin{aligned} U = 0 : & \quad \gamma = 2, A_2 = 0 \text{ (exakt lösbar)} \\ n = 1, U > 0 : & \quad \gamma = 1 \\ n \neq 1, U \rightarrow \infty : & \quad \gamma = \frac{3}{2} \\ n \rightarrow 0, 1; U > 0 : & \quad \gamma = \frac{3}{2}. \end{aligned}$$

Allgemein gilt für

$$n \neq 1, U > 0 : \quad \frac{3}{2} < \gamma < 2 \text{ und stets } 4\gamma = \beta + 4.$$

Obwohl die RG-Rechnungen nur für den Fall $U \ll t$ durchgeführt werden können, glaubt man, daß die Ergebnisse sich auf den Fall großer U übertragen lassen, da die exakte Lösung von Lieb und Wu kein kritisches Verhalten bei irgendeinem Wert von $U > 0$ aufweist.

7.3. Ergebnisse aus Variationsrechnungen

Zur analytischen Untersuchung des Hubbardmodells schlug Gutzwiller²⁵ folgende Variationswellenfunktion vor.

$$|\Psi_G\rangle = \prod_i (1 - (1 - g)n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}) |\Psi_0\rangle = g^D |\Psi_0\rangle, \quad D = \sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \quad (7.3)$$

Dabei ist $|\psi_0\rangle$ die Wellenfunktion des nicht-wechselwirkenden Fermigas (Slaterdeterminante) auf dem Gitter. Die Abstoßung U in (1.4) führt zu einer Vermeidung von Doppelbesetzungen, die durch den Variationsparameter g approximiert wird. Der Wert von g in Abhängigkeit vom Coulombparameter U und der Elektrodichte n wird durch Minimalisierung des Energieerwartungswertes gefunden. Grenzfälle sind $g = 1$ für $U = 0$ (Fermigas) und $g = 0$ für $U \rightarrow \infty$ (antiferromagnetisches Heisenbergmodell).

D.Vollhardt et.al.⁷ gelang 1988 die analytische Berechnung des Variationsparameters g für beliebiges U und beliebige Besetzungsdichte sowie die Bestimmung der Korrelationsfunktionen für die Gutzwiller-Wellenfunktion (GWF). Obwohl die Variationsenergie für große U z.T. deutlich von der exakten Grundzustandsenergie abweicht, stehen die KF, insbesondere die Spin-Spin-KF, zumindest für den atomaren Limes $U \rightarrow \infty$, in sehr guter Übereinstimmung mit exakten und numerischen Resultaten. Für das halbgefüllte Band ergibt hier die GWF

$$C_j^{SS}(g = 0, n = 1) = (-1)^j \frac{Si(\pi j)}{(\pi j)} \quad (7.4)$$

Die Fouriertransformierte $C^{SS}(q)$ divergiert bei $q = \pi$, zeigt also das zu erwartende antiferromagnetische Verhalten. Allerdings weisen die KFen aus der GWF für endliches U ein langreichweitiges Verhalten $C_j^{SS} \sim j^{-2}$ auf, d.h. der Übergang zum antiferromagnetischen Zustand tritt erst bei $U \rightarrow \infty$ auf statt bei $U \rightarrow 0+$, wie Lieb und Wu zeigten⁹. Für $n \neq 1$ wird bei der GWF ebenfalls ein quadratischer Abfall der Spin-Spin- und der Dichte-Dichte-KFen festgestellt.

7.4. Ergebnisse der MC-Simulation

7.4.1. Definitionen und einfache Zusammenhänge

Im Hubbardmodell ist ein Gitterplatz entweder leer, einfach besetzt mit Spin $\uparrow$ oder $\downarrow$ oder doppelt besetzt. Die Korrelationsfunktionen (KFen) zwischen diesen Möglichkeiten sind durch folgende Summen über Gitterplätze definiert

$$C_j^{XY} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle X_i Y_{i+j} \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle \quad . \quad (7.5)$$

X_i und Y_i sind dabei zwei der folgenden lokalen Operatoren

$$S_i \equiv n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} \quad (\text{Spin}) \quad (7.6a)$$

$$N_i \equiv n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \quad (\text{Elektronendichte}) \quad (7.6b)$$

$$D_i \equiv n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (\text{Doppelbesetzung}) \quad (7.6c)$$

$$H_i \equiv (1 - n_{i\uparrow})(1 - n_{i\downarrow}) \quad (\text{Leerstelle, Loch}). \quad (7.6d)$$

(Beachte, daß die so gebildete Spin-Spin-KF sich von der in Gl. (3.12) definierten (L_δ) um einem Faktor $\frac{4}{3}$ unterscheidet.) Die jeweiligen mittleren Dichten (s,n,d,h) sind

$$x \equiv \langle X \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle X_i \rangle \quad . \quad (7.7)$$

Die mittlere Magnetisierung s verschwindet, da der Hamiltonian (1.4) die Symmetrie für Spin $\uparrow$ und $\downarrow$ nicht bricht. Auf diese Weise lassen sich 10 KFe bilden, von denen allerdings nur 4 unabhängig sind. So gilt

$$C_j^{ND} = \frac{1}{2} [C_j^{NN} + C_j^{DD} - C_j^{HH}] \quad , \quad (7.8a)$$

$$C_j^{DH} = \frac{1}{2} [C_j^{DD} + C_j^{HH} - C_j^{NN}] \quad , \quad (7.8b)$$

$$C_j^{NH} = \frac{1}{2} [C_j^{DD} - C_j^{HH} - C_j^{NN}] \quad . \quad (7.8c)$$

Es genügt daher, z.B. nur die vier KFen C_j^{XX} zu berechnen. Bei Umklappen aller Spins ($\uparrow \leftrightarrow \downarrow$) ändern sich die Erwartungswerte wegen der Invarianz des Hamiltonians (1.4) nicht. Andererseits ändert sich das Vorzeichen der KFen mit ungerader Anzahl von Spin-Operatoren S_i , weshalb die restlichen drei KFen C_j^{SN} , C_j^{SD} und C_j^{SH} verschwinden. In der MC-Simulation sind zunächst die Erwartungswerte in den Gln. (7.6) und (7.7) über die fermionischen Freiheitsgrade zu bestimmen. Dies geschieht gemäß (3.4) bis (3.8) aus den equal-time Greensfunktionen (vgl. Bsp. (3.13)). Anschließend folgt die Summation über die Konfigurationen des Isingspin-Hilfsfeldes $\{s_{ij}\}$. Der Fall $j = 0$ muß - wegen des δ_{ij} in den Kommutationsrelationen - gesondert betrachtet werden. Die KFen $C_0^{XX} = \frac{1}{N} \sum_i \langle X_i^2 \rangle - x^2$ lassen sich aber in Termen der mittleren Dichtefunktionen (7.7) ausdrücken

$$C_0^{SS} = n - 2d \quad (7.9a)$$

$$C_0^{NN} = 2d + n(1 - n) \quad (7.9b)$$

$$C_0^{DD} = d(1 - d) \quad (7.9c)$$

$$C_0^{HH} = h(1 - h) \quad (7.9d)$$

Außerdem ist die Lochdichte h durch die Beziehung

$$h = 1 - n + d \quad (7.10)$$

gegeben. (Jede Doppeltbesetzung erzeugt genau ein Loch, und ohne Doppeltbesetzungen gilt $h + n = 1$.) Insgesamt werden also die vier KFen C_j^{XX} ($j > 0$) und zwei mittlere Dichten, z.B. n, d bestimmt. Die anderen KFen können dann ebenfalls daraus gewonnen werden.

Um die Rolle von supraleitenden Fluktuationen und den Einfluß von U auf diese zu untersuchen, wird außerdem die KF

$$C_j^{Sc} \equiv \frac{1}{N} \sum_i \langle c_{i\uparrow} c_{i\downarrow} c_{i+j,\uparrow}^\dagger c_{i+j,\downarrow}^\dagger \rangle \quad (7.11)$$

mit $C_0^{Sc} = -h$ für lokale Singlet-Cooperpaare bestimmt.

7.4.2. Spin-Spin-Korrelationsfunktionen

7.4.2.1. Halbe Bandfüllung

Um Rückschlüsse auf den Grundzustand bzw. auf den thermodynamischen Limes ziehen zu können, wird die Abhängigkeit der KF von der Temperatur bzw. von der Systemgröße untersucht.

Temperaturabhängigkeit: Bei endlichen Temperaturen zerstören thermische Fluktuationen die Korrelationen. In endlichen Systemen kann aber ein Verhalten wie im Grundzustand erwartet werden, wenn die thermische Korrelationslänge ξ die Systemabmessungen überschreitet. Für den Ring aus 32 Gitterplätzen wurde die Spin-Spin-KF C_j^{SS} bei inversen Temperaturen β zwischen 2 und 32 bestimmt. Abb. 17 zeigt C_j^{SS} in Abhängigkeit vom Abstand j bei einem Coulombparameter von $U = 2$. Die Zahl der Messungen lag im folgenden stets zwischen 1500 und 3500, unterbrochen von je 2 MC-Sweeps. Zur Thermalisierung wurden 500 MC-Sweeps durchgeführt. Die verschiedenen Symbole stehen für die verschiedenen Temperaturen. Die durchgezogene Linie ist das Resultat aus der GWF⁷. Für $\beta \geq 8$ sind die antiferromagnetischen Korrelationen an dem wechselnden Vorzeichen deutlich zu erkennen. Die Werte wachsen betragsmäßig mit β an und unterscheiden sich zwischen $\beta = 16$ und $\beta = 32$ nur noch gering. In Abb. 18 ist der Verlauf durch die Stauchung von C_0^{SS} deutlicher zu erkennen. Die Korrelationen sind wesentlich stärker ausgeprägt als die der GWF. Dies macht sich in der Fouriertransformierten $C^{SS}(q)$ (Abb. 19) in dem scharfen Maximum bei $q = \pi$ bemerkbar, welches in der MC-Simulation mit β anwächst, in dem Resultat aus der GWF dagegen nicht auftritt. Für $q \neq \pi$ stimmen die Ergebnisse aus der MC-Simulation für tiefe Temperaturen mit denen aus der GWF sehr gut überein. Der ferromagnetische Anteil $q = 0$, der bei höheren Temperaturen auftritt, wird mit wachsendem β unterdrückt.

Systemgrößenabhängigkeit: Die Spin-Spin-KF für verschiedene Ringlängen ($N = 16, 24, 32, 48$) ist in Abb. 20 dargestellt. Die Temperatur wurde so skaliert, daß $\frac{\beta}{N} = \frac{1}{2} = \text{const.}$ gilt. Dies resultiert aus der Annahme, daß die Anzahl thermischer Anregungen proportional zu Temperatur ist, d.h. für die thermische

Korrelationslänge: $\xi \sim \beta$. Der Abstand eines Systems vom Grundzustand wird durch das Verhältnis $\frac{\xi}{N}$ bestimmt, welches möglichst groß sein muß, um Grundzustandseigenschaften zu ermitteln. Will man Systeme verschiedener Größe vergleichen, so ist dieses Verhältnis konstant zu halten, woraus die obige Skalierung resultiert. Wie man sieht, ist der Einfluß der Systemgröße auf C_j^{SS} für $N \geq 24$ sehr gering. In der Fouriertransformierten (Abb. 21) fallen die Kurven fast zusammen, nur das Maximum bei $q = \pi$ wird mit der Systemgröße zunehmend höher und schärfer, was auf eine Divergenz im thermodynamischen Limes hinweist.

Abhängigkeit von der Wechselwirkung: Abb. 22 zeigt $C^{SS}(q)$ für den 32er-Ring bei $\beta = 32$ für verschiedene Werte von U . Die durchgezogenen Linien sind wieder die Resultate aus der GWF. Für $U = 0$ sind beide Methoden exakt. Die Übereinstimmung zwischen dem endlichen System bei endlicher Temperatur mit dem Grundzustand im thermodynamischen Limes ist (zumindest) hier sehr gut. Die q -abh. Spin-Spin-KFen aus der GWF zeigen einen glatten Verlauf, die Werte erhöhen sich mit der elektronischen Abstoßung U insbesondere zu $q = \pi$ hin. Nur für $U \rightarrow \infty$ liegt bei $q = \pi$ eine logarithmische Divergenz vor. Bei den MC-Resultaten stellt man dagegen ein scharfes Maximum bei $q = \pi$ fest, das mit U deutlich anwächst und mit der Systemgröße schmaler und höher wird. Dies spiegelt die Tatsache wieder, daß bei der GWF ein Phasenübergang zum antiferromagnetischen Zustand erst bei $U = \infty$ auftritt, im Gegensatz zu $U_c = 0$ in der exakten Lösung von Lieb und Wu.

7.4.2.2. Viertel Bandfüllung

Die Spin-Spin-KF im Fall $n = \frac{1}{2}$ zeigt Abb. 23 für den 32er-Ring. Hier ist wieder $U = 2$ und β liegt zwischen 16 und 32. Das positive Vorzeichen tritt hier nicht auf jedem zweiten Gitterplatz, sondern auf jedem vierten auf. Das entspricht aber jedem zweiten Elektron, da hier im Mittel nur jeder zweite Gitterplatz besetzt ist. Die antiferromagnetische Kopplung ist also wieder zu beobachten. Die Temperaturabhängigkeit ist (zumindest in diesem Bereich) sehr gering. Die KF aus der GWF zeigt ein ähnliches Verhalten, wobei die Kopplung mit jedem vierten Gitterplatz gegenüber dem MC-Resultat abgeschwächt ist. Die Fouriertransformierte

$C^{SS}(q)$ für verschiedene Ringlängen ist in Abb. 24 zu sehen. Der Verlauf von $C^{SS}(q)$ nach der GWF (durchgezogene Kurve) ist unabhängig von n , sie nimmt lediglich für $q \geq n\pi$ einen konstanten Wert an. Dagegen weist die Spin-Spin-KF aus den MC-Simulationen ein Maximum bei $q = 2k_F = \pi$ und ein Abfallen für $q \rightarrow \pi$ unter den Wert aus der GWF auf. Das Maximum wächst schwach mit der Ringlänge N , der Wert bei $q = 0$ geht gegen 0. $C^{SS}(\pi)$ ändert sich dagegen nicht mit N . Das Maximum bei $q = 2k_F$ wurde bereits in anderen MC-Simulationen^{10,26} sowie für den Grenzfall $U \rightarrow \infty$ mit einer Bethe-Ansatz-Wellenfunktion für endliche Systeme ($N \leq 32$)²⁷ gefunden. Abb. 25 zeigt $C^{SS}(q)$ bei verschiedenen Werten von U . Gezeigt werden die Ergebnisse für den 32er-Ring bei $U=0,2$ und 4, $\beta = 32$ aus der MC-Simulation und bei $U = \infty$, $T = 0$ aus der Bethe-Ansatz-Wellenfunktion sowie die exakte Kurve für $U = 0$, $T = 0$ im thermodynamischen Limes. Das Maximum bei $q = 2k_F$ wächst mit U . Auffallend ist, daß bei $U = \infty$ $C^{SS}(\pi)$ auf den Wert $\frac{1}{2}$ des wechselwirkungsfreien Falls zurückgeht, bei den Zwischenwerten von U (aus den MC-Simulationen) dagegen nicht. Da letztere bei $T > 0$ bestimmt wurden, liegt es nahe, an einen Temperatureffekt zu denken. Dagegen spricht aber das in Abb. 23 gezeigte nahezu temperaturunabhängige Verhalten der Spin-Spin-KF. (Die Fouriertransformierte $C^{SS}(\pi)$ ändert sich ebenfalls nicht in diesem Temperaturbereich.) Außerdem liefert eine Störungsrechnung erster Ordnung in U ebenfalls ein Ansteigen von $C^{SS}(\pi)$ gegenüber dem Fall $U = 0$ ²⁷. Es scheint daher einen maximalen Wert $U_{max} > 2$ zu geben, bei dem der Wert von $C^{SS}(\pi)$ wieder abfällt. Abb. 26 zeigt schließlich die Spin-Spin-KF für $U = 0, 2$ und 4 aus den MC-Simulationen und aus der Störungsrechnung erster Ordnung (durchgezogene Linie). Die Übereinstimmung bei $U = 2$ ist erstaunlich gut, wenn man bedenkt, daß $U = 2$ eigentlich kein "kleiner" Entwicklungsparameter ist. Bei größeren Werten von U nehmen die Abweichungen erwartungsgemäß zu.

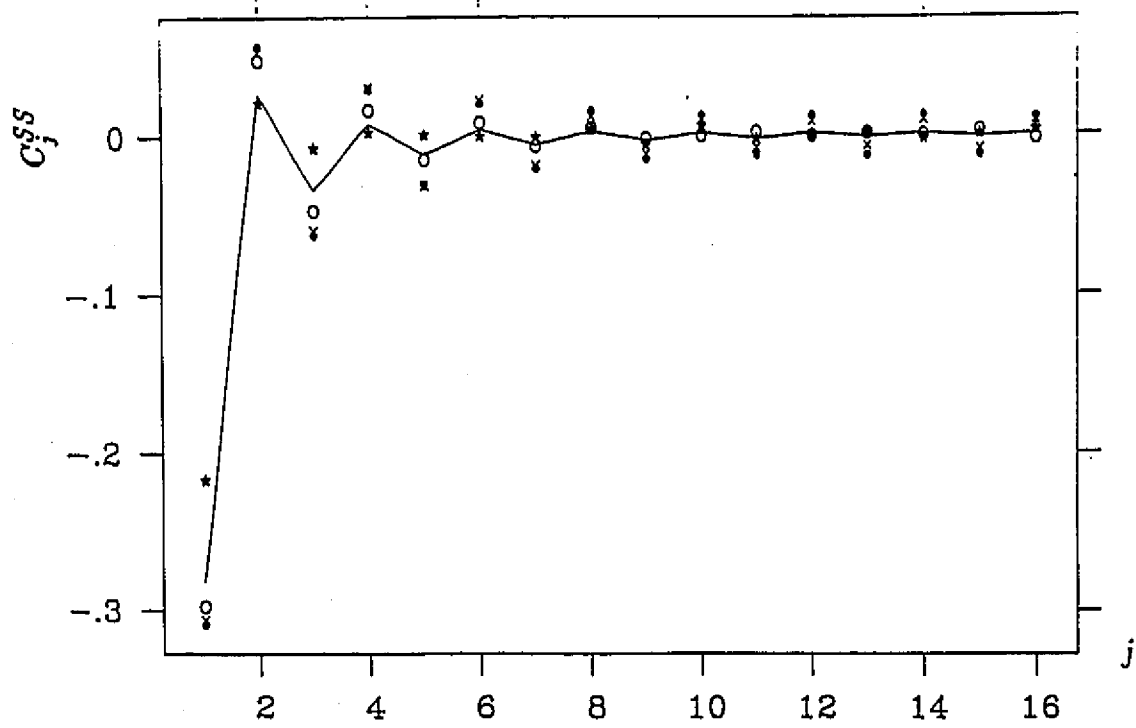


Abb. 17: Spin-Spin-KF C_j^{SS} bei halber Bandfüllung
 $N = 32, U = 2, \beta = 2(\star), 8(\circ), 16(\times), 32(\cdot), \text{GWF} : (-)$

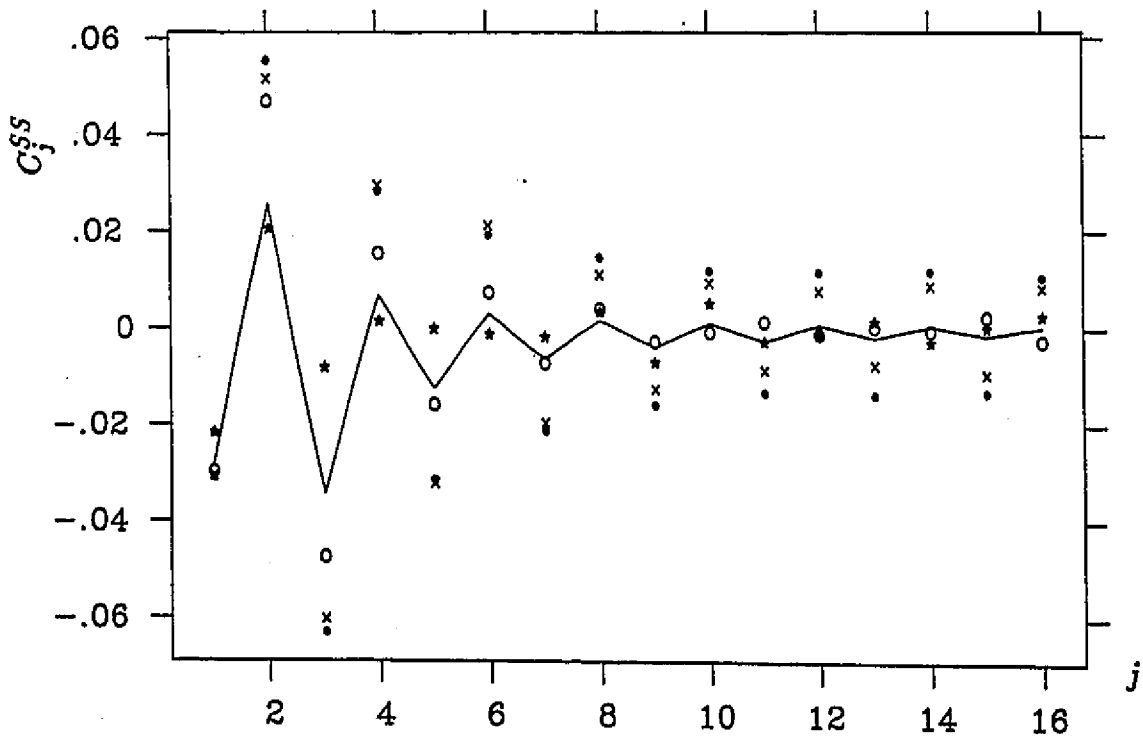


Abb. 18: wie Abb. 17, nur C_j^{SS} um Faktor 10 gestaucht

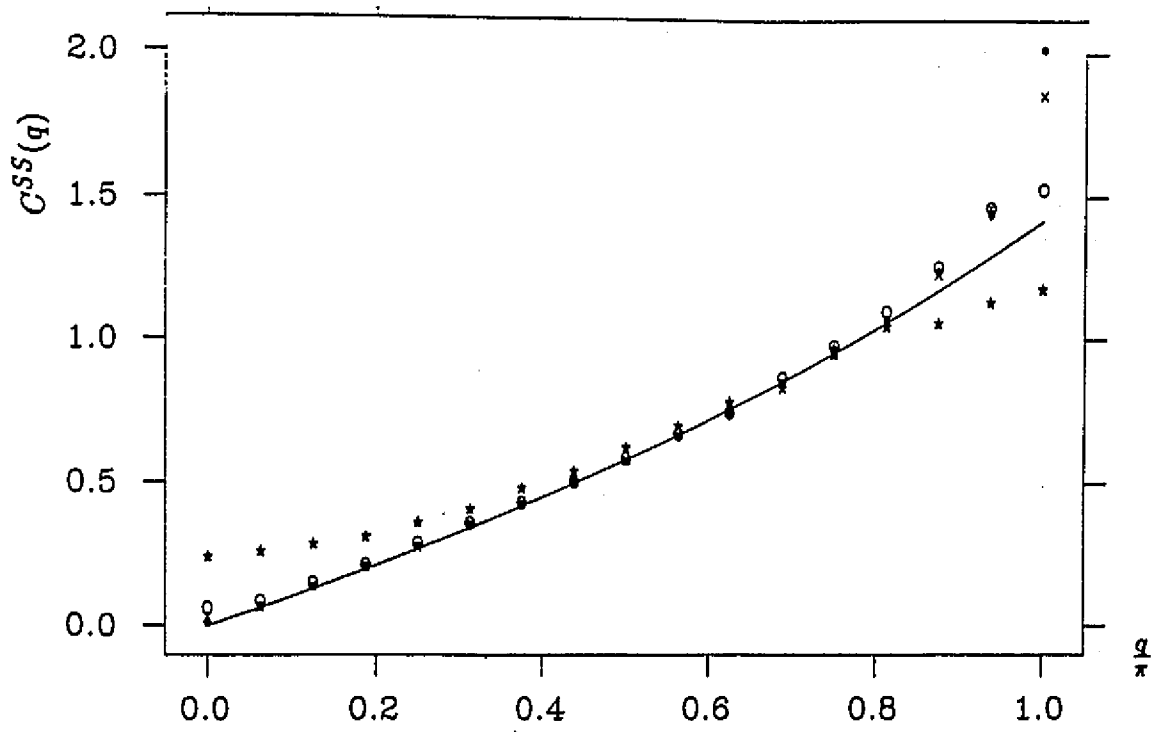


Abb. 19: Spin-Spin-KF $C^{SS}(q)$ bei halber Bandfüllung
 $N = 32, U = 2, \beta = 2(\star), 8(\circ), 16(\times), 32(\bullet), \text{GW} : (—)$

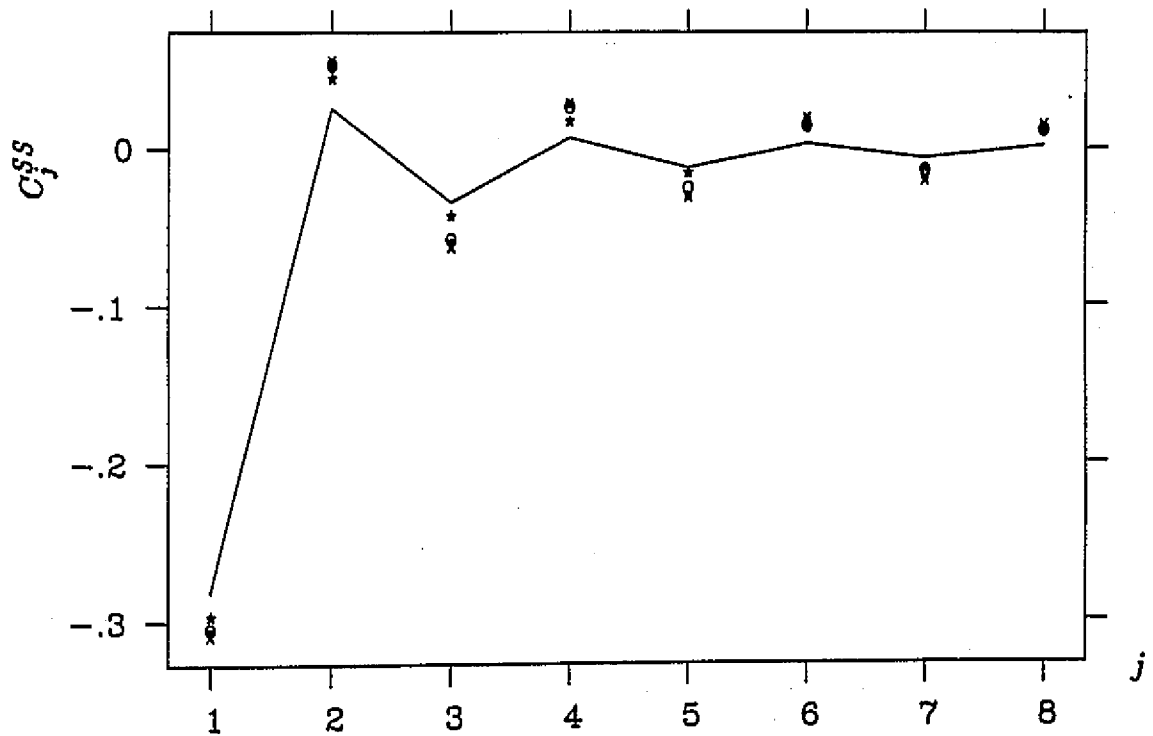


Abb. 20: Spin-Spin-KF C_j^{SS} bei halber Bandfüllung
 $U = 2, \beta = \frac{N}{2}, N = 16(\star), 24(\circ), 32(\times), 48(\bullet) \text{GW} : (—)$

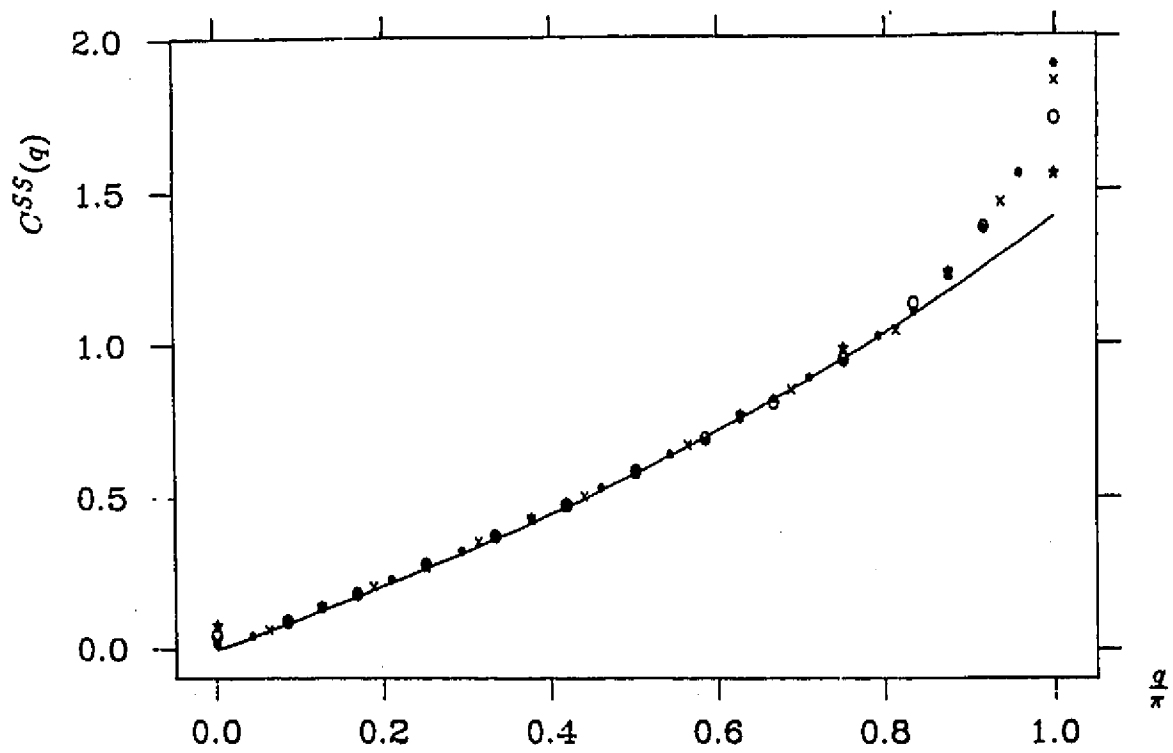


Abb. 21: Spin-Spin-KF $C^{SS}(q)$ bei halber Bandfüllung
 $U = 2, \beta = \frac{N}{2}, N = 16(*), 24(o), 32(x), 48(\bullet), \text{GWf: } (—)$

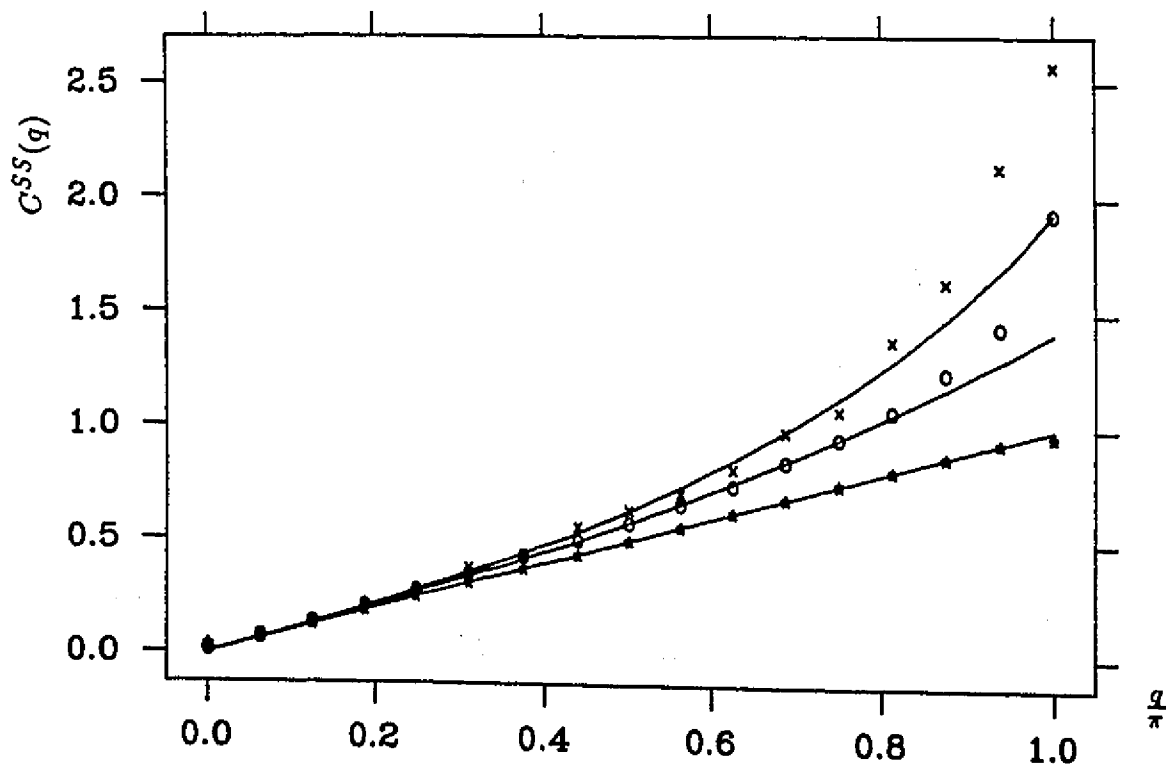


Abb. 22: Spin-Spin-KF $C^{SS}(q)$ bei halber Bandfüllung
 $N = 32, \beta = 32, U = 0, 2, 4$ (von unten nach oben), GWf: (—)

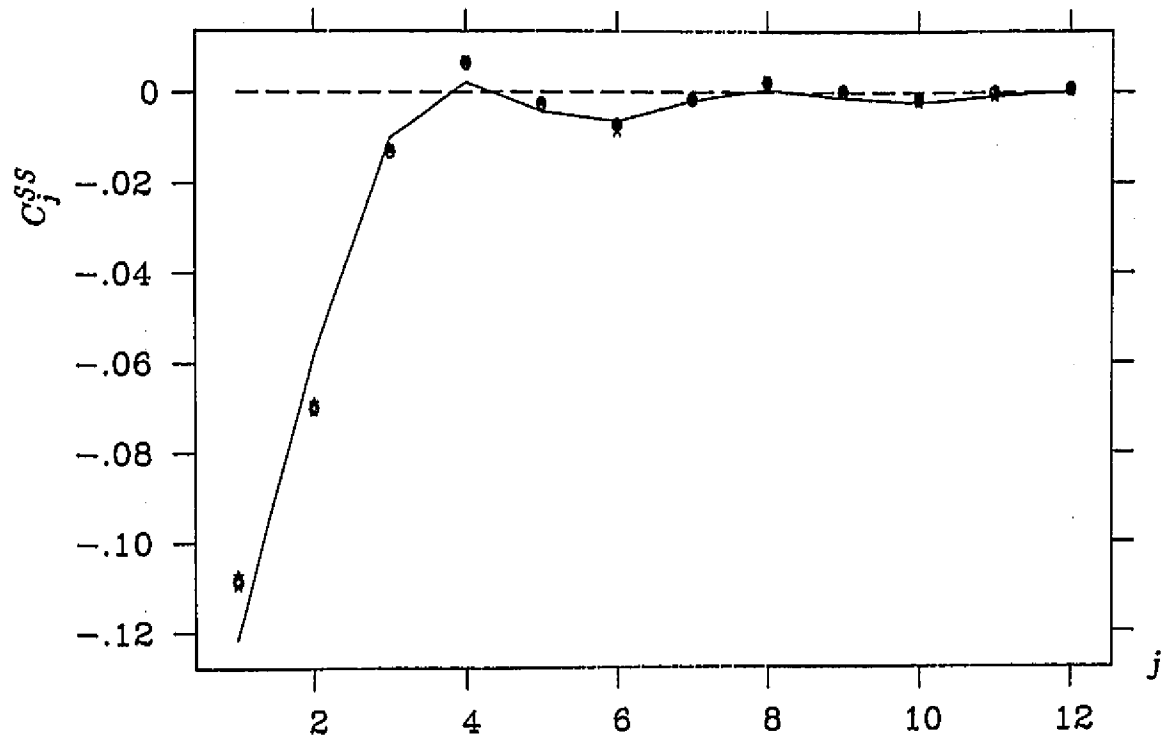


Abb. 23: Spin-Spin-KF C_j^{SS} bei viertel Bandfüllung
 $N = 32, U = 2, \beta = 16(*), 24(o), 32(\times), \text{GW}F : (-)$

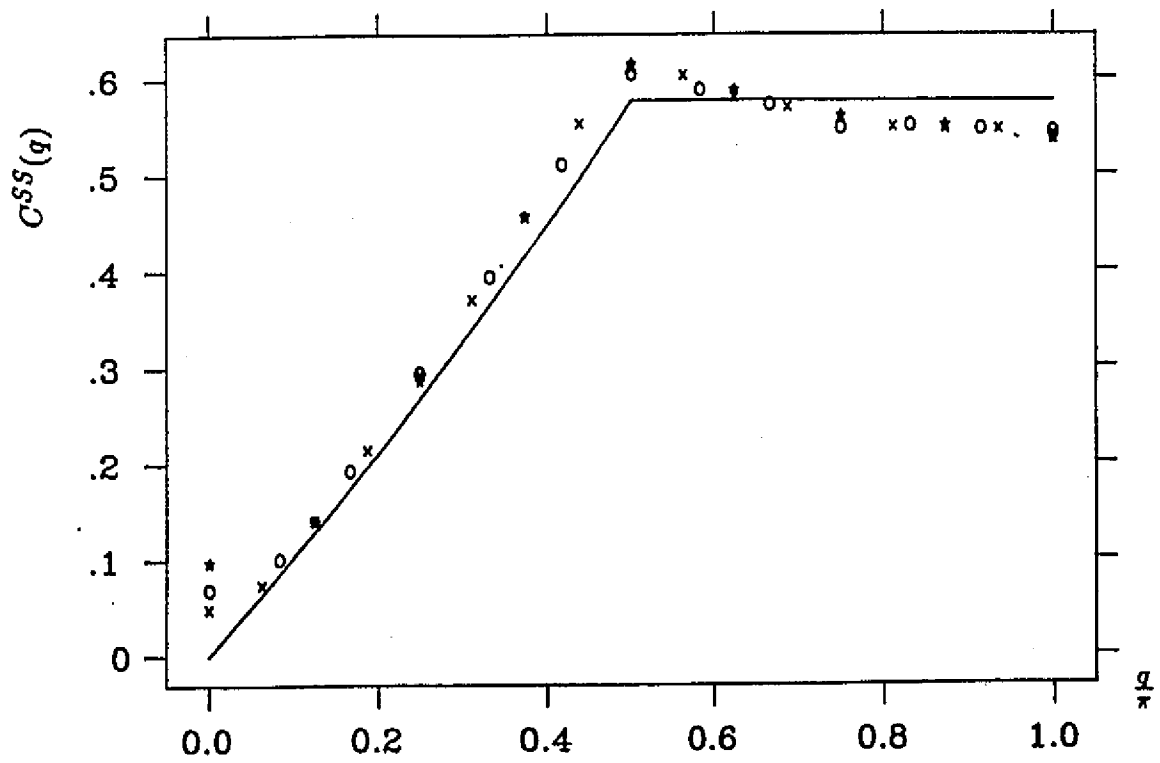


Abb. 24: Spin-Spin-KF $C^{SS}(q)$ bei viertel Bandfüllung
 $U = 2, \beta = \frac{N}{2}, N = 16(*), 24(o), 32(\times), \text{GW}F : (-)$

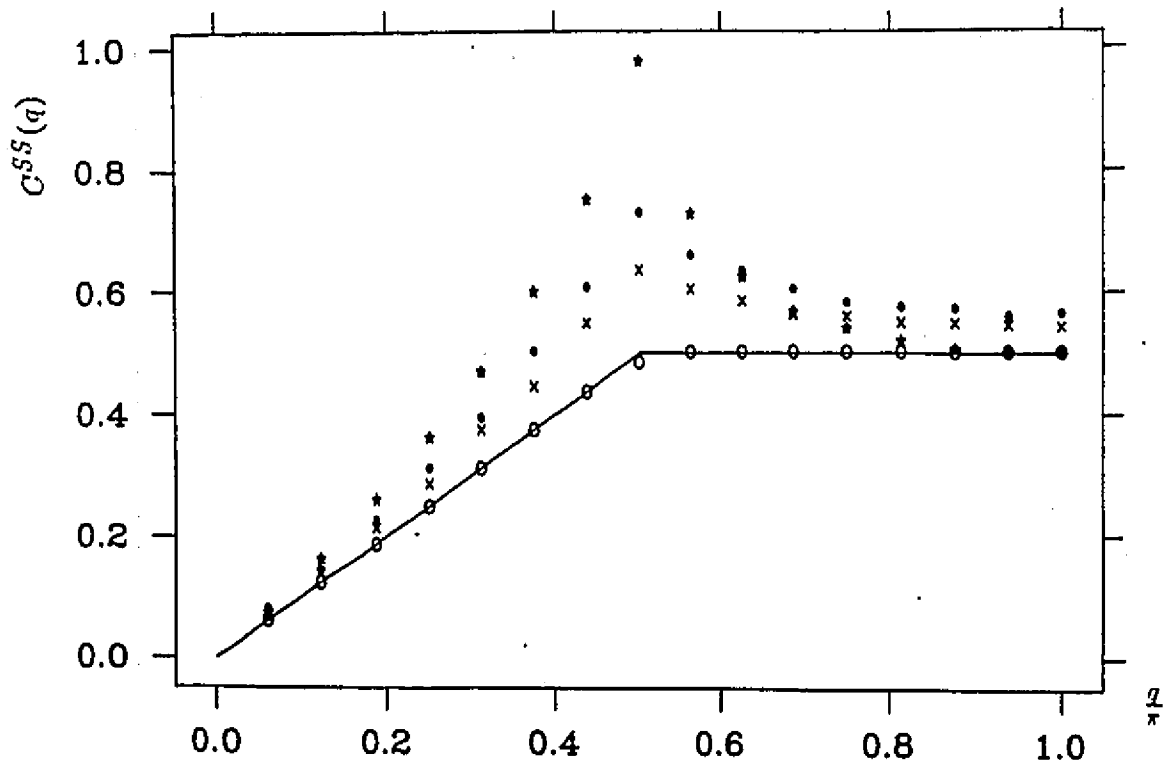


Abb. 25: Spin-Spin-KF $C^{SS}(q)$ bei viertel Bandfüllung

QMC, $N = 32$, $U = 0, 2, 4$ ($\circ, \times, \bullet$) Bethe-Ansatz-WF, $N = 32$, $U = \infty$ ($\star$)

exakt, $N = \infty$, $U = 0$ (—)

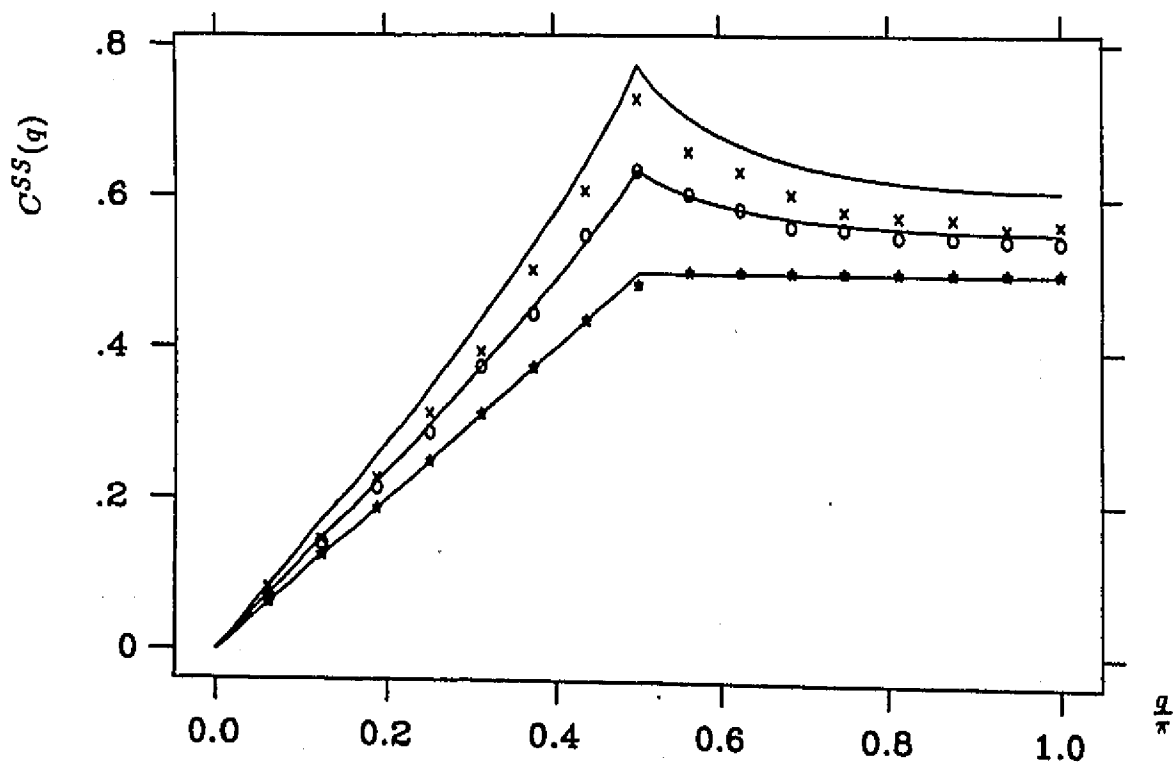


Abb. 26: Spin-Spin-KF $C^{SS}(q)$ bei viertel Bandfüllung

QMC, $N = 32$, $U = 0, 2, 4$ ($\star \circ \times$)

Störungsrechnung 1.Ord. $U = 0, 2, 4$ (—) (von unten nach oben)

7.4.3. Dichte-Dichte-Korrelationsfunktionen

7.4.3.1. Halbe Bandfüllung

Die Dichte-Dichte-KF C_j^{NN} (Gln. (7.5) und (7.6b)) für den 32er-Ring bei $U = 2$ ist in Abb. 27 zu sehen. Die ersten drei Werte sind wieder gestaucht, um den weiteren Verlauf besser erkennen zu können. Die inversen Temperaturen β liegen zwischen 2 und 32. Die Werte aus der GWF (durchgezogene Linie) zeigen starke Schwankungen mit der Periode π . Dagegen nehmen sie bei der MC-Simulation betragsmäßig monoton mit dem Abstand ab, wobei aber jeder zweite Wert mit den GWF-Resultaten recht gut übereinstimmt. Mit wachsendem β verringert sich der Abstand der anderen Werte zu den GWF-Resultaten. Abb. 28 zeigt das Verhalten für verschiedene Ringlängen. Auch hier wird die Übereinstimmung mit dem GWF-Resultat mit wachsender Systemgröße besser. Beim 48er-Ring fallen die Werte zwar immer noch betragsmäßig monoton, aber die Schwankungen mit π sind bereits deutlich zu erkennen. Bei der Fouriertransformierten (Abb. 29) macht sich die Systemgröße jedoch fast ausschließlich an den Grenzen $q = 0$ und $q = \pi$ bemerkbar, ansonsten liegen die Werte auf derselben Kurve. Das Verhalten für verschiedene Werte von U zeigt Abb. 30. Die Dichte-Dichte-KFen sind in der MC-Simulationen gegenüber den GWF-Resultaten unterdrückt. Die Abweichungen wachsen mit U an, wobei für kleine q -Werte der Verlauf auch qualitativ anders ist. Im Gegensatz zu den Dichte-Dichte-KFen aus der GWF, die mit der Steigung 1 bei $q = 0$ beginnen und dann rechtsgekrümmt verlaufen, weisen sie bei MC-Simulation eher eine waagerechte Tangente bei $q = 0$ und einen Wechsel in Krümmung von links nach rechts auf.

7.4.3.2. Viertel Bandfüllung

Die Matrixelemente in der Dichte-Dichte-KF $C^{NN}(k)$ haben die Form

$$\langle c_{p\sigma}^\dagger c_{p-k,\sigma} c_{q\sigma'}^\dagger c_{q+k,\sigma'} \rangle \quad (7.12)$$

mit den Vernichtern (Erzeugern) $c_q^{(\dagger)}$ von Zuständen im k -Raum. Dies entspricht einer Streuung zweier Elektronen mit Impuls p und q mit dem Impulsübertrag k .

Die vier Impulse sind daher stets betragsmäßig kleiner als der Fermi-Impuls $q_F = \frac{n\pi}{2}$. Liegt $|k|$ zwischen $n\pi$ und π - was bei halber Bandfüllung nicht vorkommen kann -, so kann diese Streuung nur durch einen *Umklapp-Prozeß* realisiert werden, bei dem zusätzlich ein reziproker Gittervektor $\pm\pi$ addiert wird. Dies führt bei der GWF zu einem Abfall von $C_j^{NN}(q)$ für $q > n\pi$ (siehe Abb. 31). Die MC-Resultate steigen dagegen monoton an, wobei allerdings die Steigung für $q > n\pi$ deutlich abnimmt. Die Dichte-Dichte-KFen werden wieder mit der Wechselwirkung U unterdrückt; der Einfluß von U ist aber wegen der kleineren Gesamtdichte nicht so stark wie im Fall $n = 1$. Die q -abh. Dichte-Dichte-KFen für Ringe aus 16 bzw. 32 Gitterplätze sind für verschiedene Werte von U in Abb. 31 dargestellt. Zum Vergleich sind wieder die Resultate aus der GWF (durchgezogene Linie) eingetragen. (Für $U=0$ sind die Ergebnisse wieder exakt.) Die Abweichungen bei endlichem U sind erheblicher größer als im Fall $n = 1$.

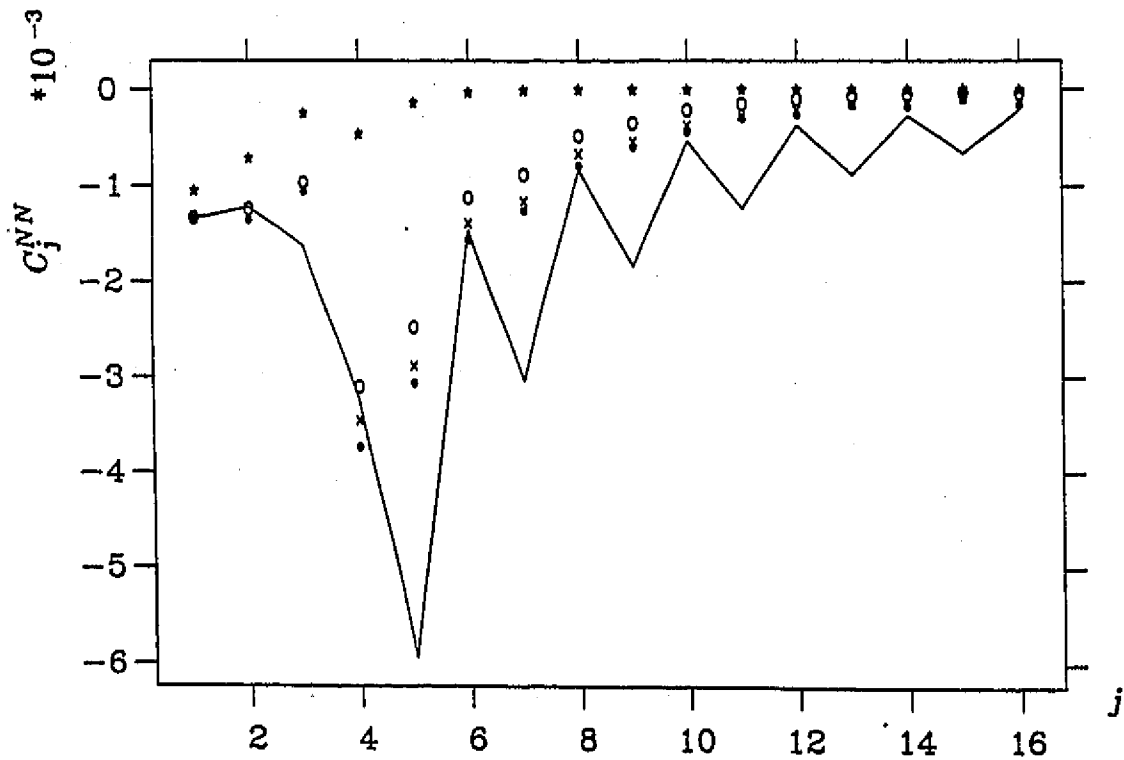


Abb. 27: Dichte-Dichte-KF C_j^{NN} bei halber Bandfüllung ($\frac{C_1^{NN}}{100}, \frac{C_2^{NN}}{10}, \frac{C_3^{NN}}{10}$)
 $N = 32, U = 2, \beta = 2$ (*), 8(o), 16(x), 32(·), GWF : (—)

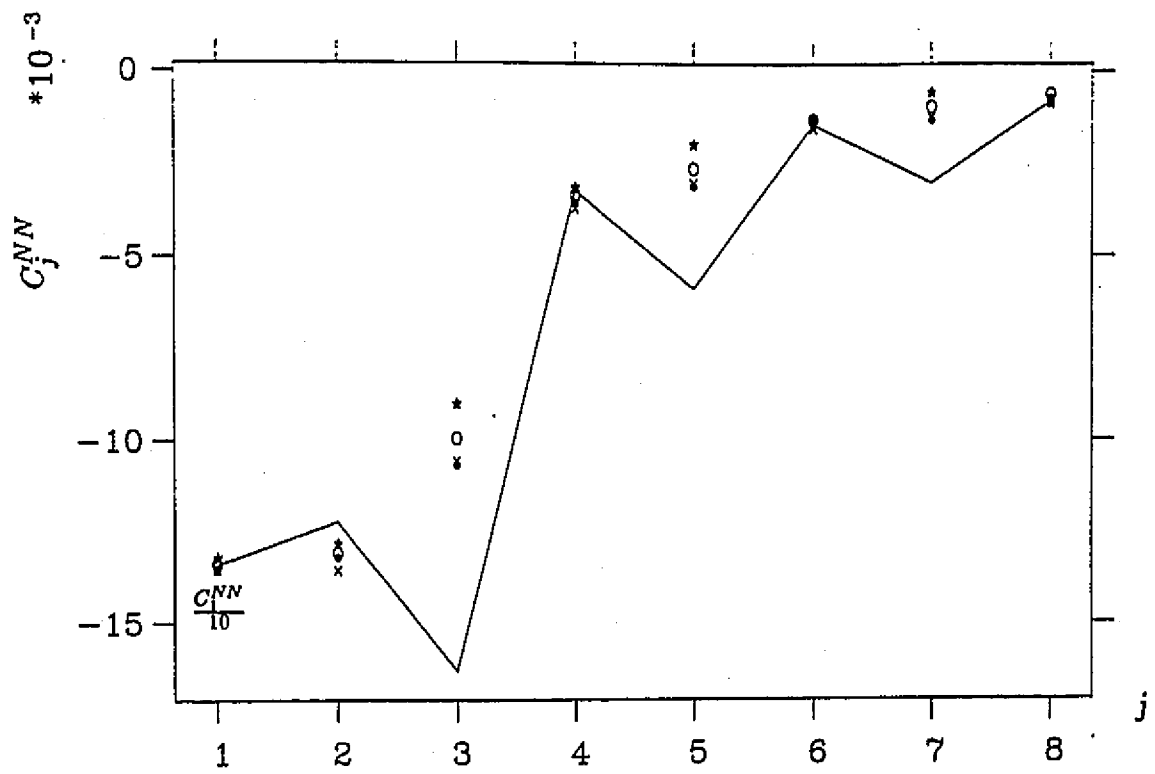


Abb. 28: Dichte-Dichte-KF C_j^{NN} bei halber Bandfüllung

$U = 2, \beta = \frac{N}{2}, N = 16(*), 24(o), 32(x), 48(\cdot)$ GWF : (—)

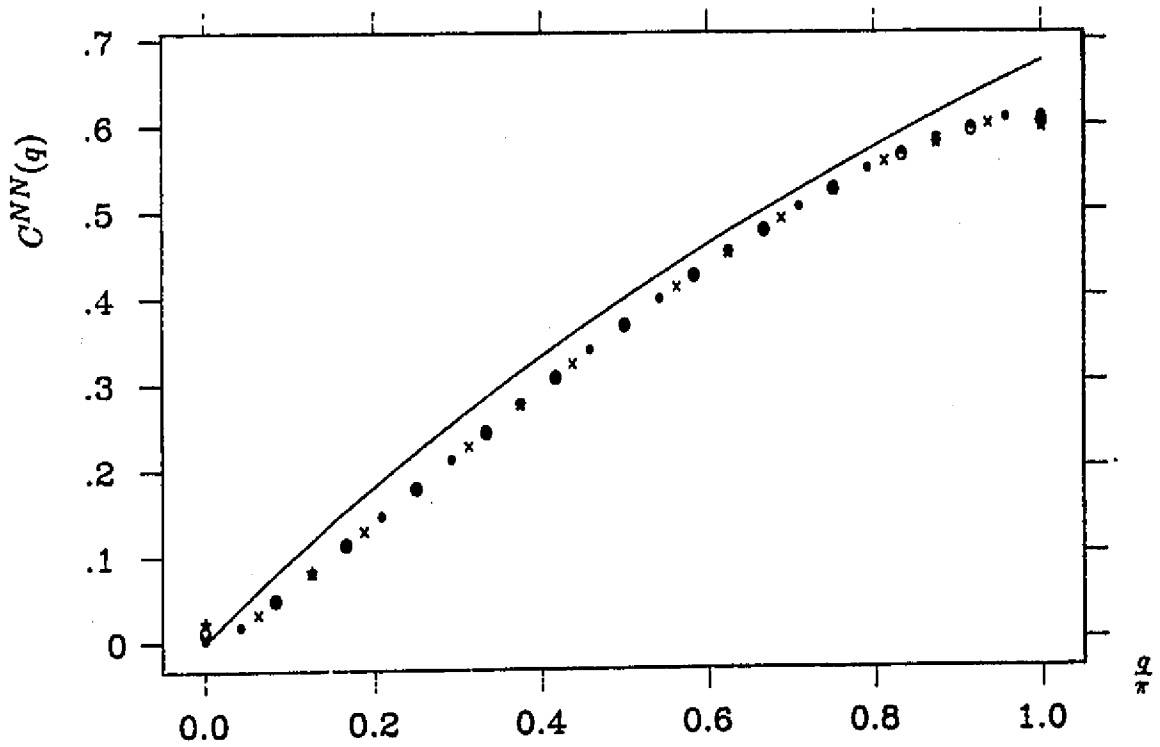


Abb. 29: Dichte-Dichte-KF $C^{NN}(q)$ bei halber Bandfüllung

$U = 2, \beta = \frac{N}{2}, N = 16(*), 24(o), 32(x), 48(\cdot)$ GWF : (—)

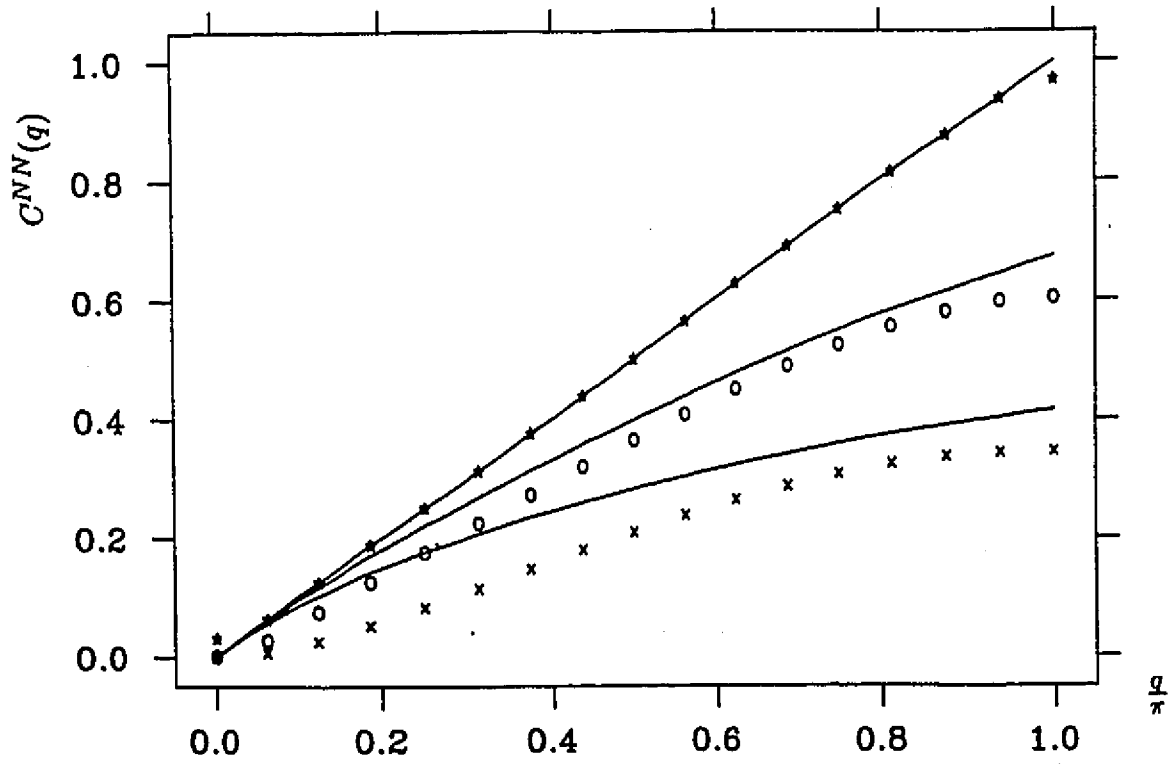


Abb. 30: Dichte-Dichte-KF $C^{NN}(q)$ bei halber Bandfüllung
 $\beta = 32, N = 32, U = 0, 2, 4$ (von oben nach unten), GWF : (—)

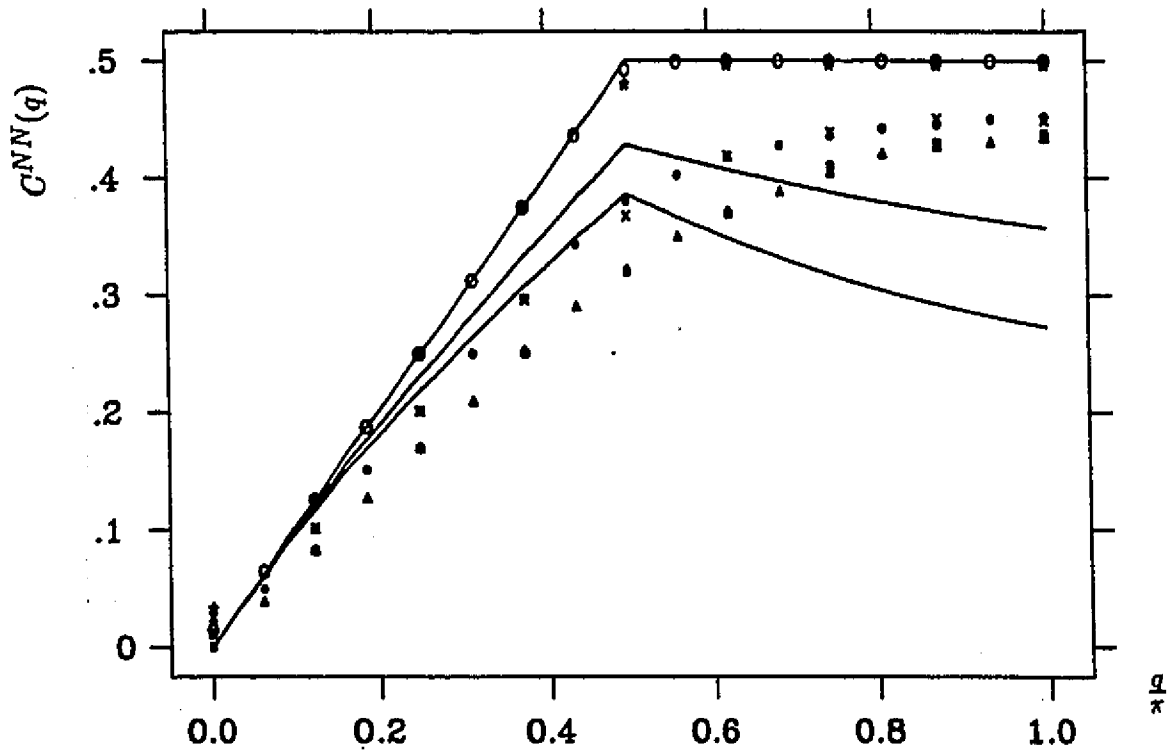


Abb. 31: Dichte-Dichte-KF $C^{NN}(q)$ bei viertel Bandfüllung
 $\beta = 32, N = 16, 32, U = 0, 2, 4$ (von oben nach unten), GWF : (—)

7.4.4. Loch-Loch- und Doppelbesetzungs-KFen

7.4.4.1. Halbe Bandfüllung

In diesem Fall ist die Erzeugung von Löchern äquivalent zur Erzeugung von Doppelbesetzungen, und die dazugehörigen KFen sind daher gleich. Dies war auch bei der MC-Simulation stets der Fall, was die Richtigkeit der verwendeten Unterprogramme bestätigt. Abb. 32 zeigt $C^{HH}(q)$ (bzw. $C^{DD}(q)$) für Ringe aus 16, 24 und 32 Gitterplätzen bei $U = 2$ bzw. 4. Die inverse Temperatur wurde zu $\beta = 32$ gewählt. Deutlich zu erkennen ist die starke Reduzierung der Korrelationen mit U , was mit der starken Lokalisierung der Elektronen bereits bei kleinen Werten von U zu erklären ist. Im atomaren Limes ($U \rightarrow \infty$) müssen $C^{HH}(q)$ und $C^{DD}(q)$ im Fall $n = 1$ verschwinden.

7.4.4.2. Viertel Bandfüllung

Die q -abh. Loch-Loch-KF bei $n = \frac{1}{2}$ ist für $U = 2$ und 4 in Abb. 33 dargestellt. Die Resultate der Ringe mit 16 bzw. 32 Gitterplätzen weichen nicht stark voneinander ab. Im atomaren Limes verhalten sich Löcher wie nicht-wechselwirkende spinlose Fermionen, deren Korrelationsfunktion aber bekannt ist. Sie ist nämlich gleich der Dichte-Dichte-KF C^{NN} für Elektronen bei $U = 0$, aber wegen der Spinlosigkeit mit dem Fermiimpuls $k_F = n_h \pi$ (vgl. Abb. 30 obere Kurve). Im atomaren Limes ist die Lochdichte $n_h = 1 - n$, da keine Doppelbesetzungen mehr vorliegen. $C^{HH}(q)$ ist für diesen Fall als gestrichelte Linie eingezeichnet. Die MC-Resultate nähern sich mit wachsendem U dieser Geraden an. Die Doppelbesetzungs-KF (Abb. 34) ist hier wegen der geringeren Elektronendichte kleiner als im Fall $n = 1$ und wird mit U wieder deutlich unterdrückt. Im Bereich $n\pi \leq q \leq \pi$ ist die Kurve nach unten gekrümmt. Wegen des kleinen Maßstabs treten die Unterschiede zwischen dem 16er- und dem 32er-Ring deutlicher hervor. Da im atomaren Limes keine Doppelbesetzungen mehr auftreten, verschwindet dort $C^{DD}(q)$ im Gegensatz zu $C^{HH}(q)$.

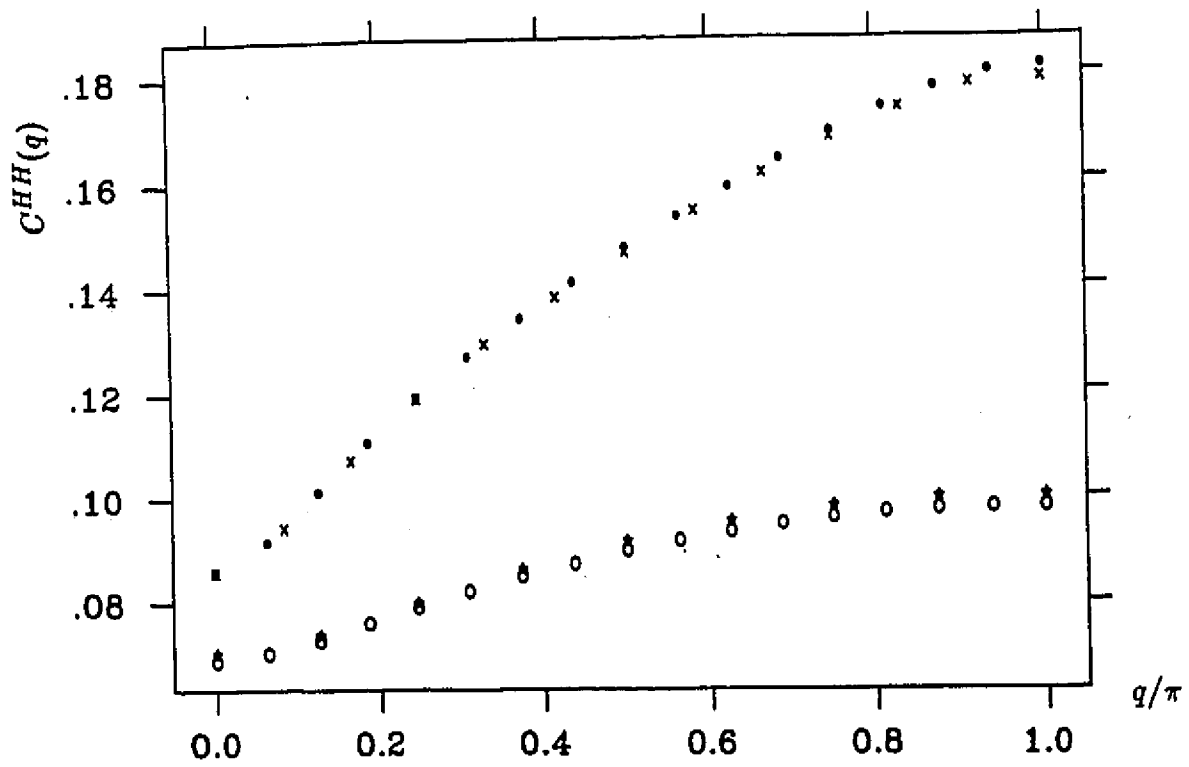


Abb. 32: Loch-Loch-KF $C^{HH}(q)$ bei halber Bandfüllung
 $\beta = 32$, $N = 16, 24, 32$, $U = 2, 4$ (von oben nach unten)

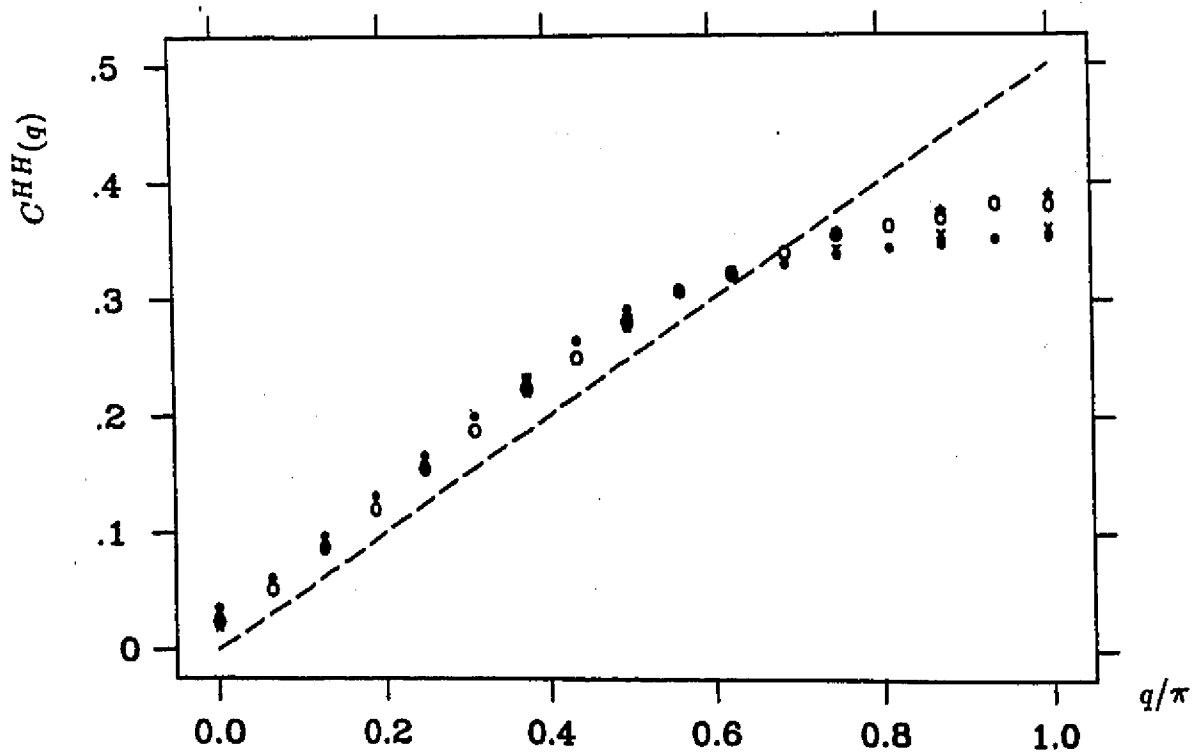


Abb. 33: Loch-Loch-KF $C^{HH}(q)$ bei viertel Bandfüllung
 $n = \frac{1}{2}$, $\beta = 32$, $N = 16, 32$, $U = 2, 4$ (von unten nach oben) $U = \infty$ (---)

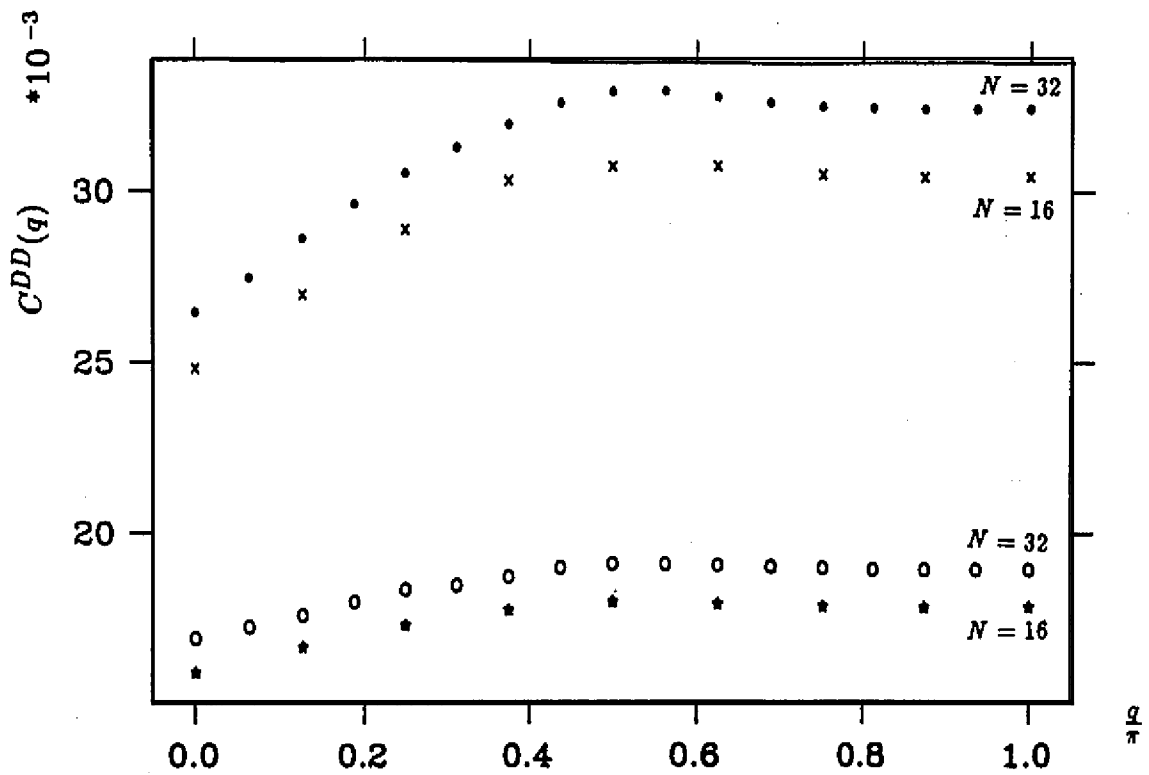


Abb. 34: Doppelbesetzungs-KF $C^{DD}(q)$ bei viertel Bandfüllung
 $\beta = 32$, $N = 16, 32$, $U = 2, 4$ (von oben nach unten),

7.4.5. Cooperpaar-Korrelationsfunktionen

Abb. 35 zeigt die Cooperpaar-KF $C^{Sc}(q)$ (Gl. (7.11)) für das halbgefüllte Band bei $U = 2$ und $U = 4$. $C^{Sc}(q)$ hat den betragsmäßig maximalen Wert bei $q = 0$ und geht für $q \rightarrow \pi$ gegen 0. Die Werte werden mit U unterdrückt. Im Fall $n = 1$ kann man zeigen ⁷, daß die Cooperpaar-KF im Ortsraum bis auf ein alternierendes Vorzeichen gleich der Dichte-Dichte-KF ist, d.h. für die Fourier-transformierten: $C^{Sc}(q) = -C^{NN}(\pi - q)$. Dies traf auch bei den MC-Ergebnissen stets zu. Die mit U zunehmenden Abweichungen der MC-Resultate in $C^{Sc}(q)$ von den Werten aus der GWF entsprechen daher den Abweichungen in $C^{NN}(q)$. Der Verlauf von $C^{Sc}(q)$ ist für verschiedene Bandfüllungen ($n = 0.5, 0.94$ und 1) in Abb. 36 dargestellt. $C^{Sc}(q)$ erreicht bei $q = 1 - n$ den Wert $1 - n$ und verläuft dann konstant. Dieses Verhalten wird bei beiden Methoden beobachtet. Bei allen Werten von n werden die Cooperpaar-Korrelationen durch die Wechselwirkung U unterdrückt.

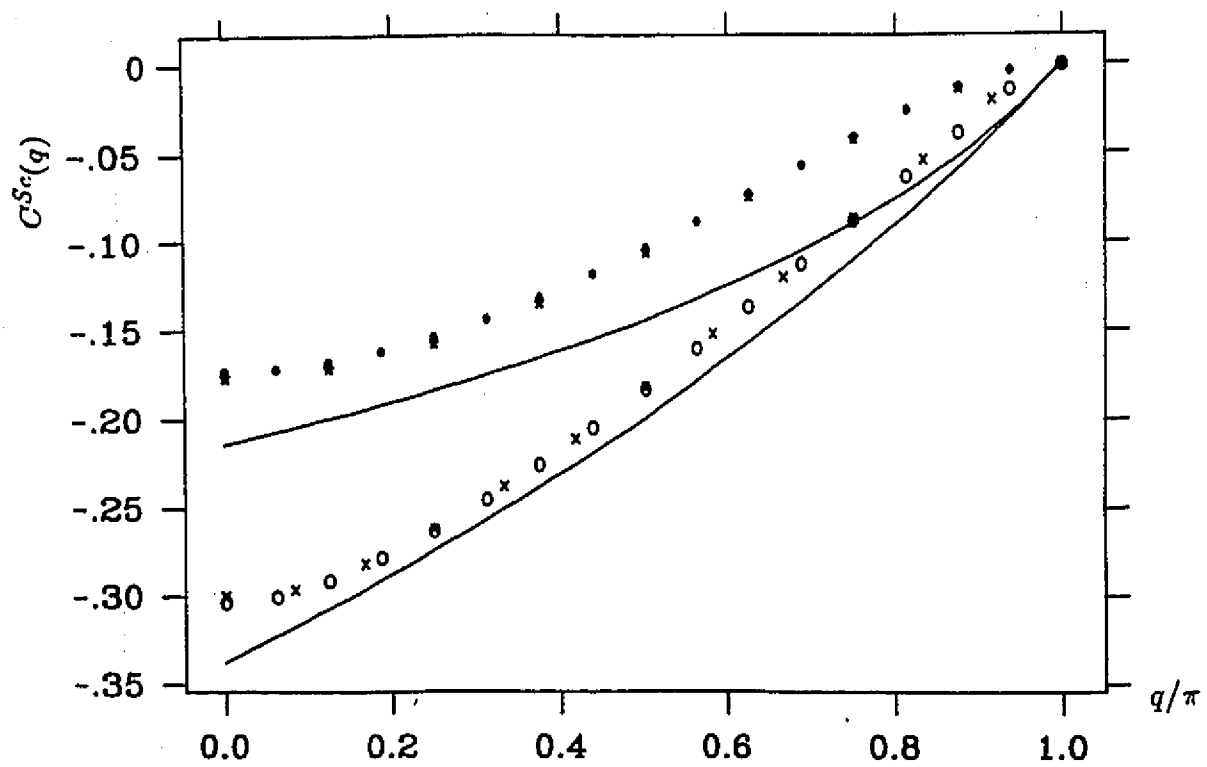


Abb. 35: Cooperpaar-KF $C^{Sc}(q)$ bei halber Bandfüllung
 $\beta = 32$, $N = 16, 32$, $U = 2, 4$ (von unten nach oben), GWF: (—)

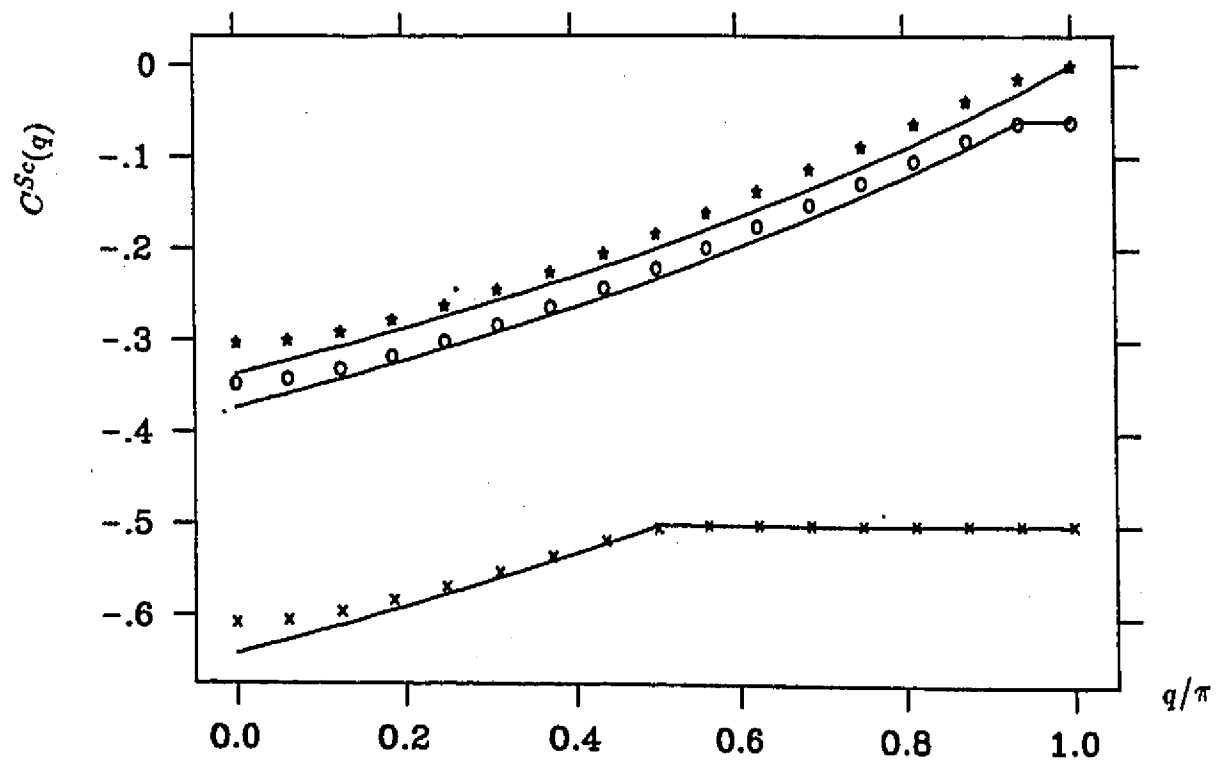


Abb. 36: Cooperpaar-KF $C^{Sc}(q)$ für $U = 2$, $\beta = 32$, $N = 32$,
 $n = \frac{1}{2}(\times)$, $n = .94(o)$, $n = 1(\star)$, GWF: (—)

7.4.6. Langreichweitiges Verhalten

Nach den RG-Rechnungen^{23,24} fallen die KFn für große Gitterabstände j mit einem Potenzgesetz ab (vgl. Gl. 7.2). Bei den KFn aus der GWF ergibt sich stets ein Abfall $\sim j^{-2}$. Der Exponent γ der Spin-Spin- und der Dichte-Dichte-KFn soll nun aus den MC-Resultaten gewonnen werden. Bei endlichen Temperaturen ist hier zwar stets ein exponentieller Abfall mit dem Abstand zu erwarten, es wird aber angenommen, daß die thermische Korrelationslänge ξ größer als die Ringlänge ist, da sich die KFn für $\beta > 16$ kaum noch mit der Temperatur ändern.

Halbe Bandfüllung: Im Fall $n = 1$ finden T.Giamarchi und H.Schulz²³ einen Exponenten $\gamma = 1$ für C_j^{SS} und C_j^{NN} bei jedem Wert von $U > 0$. In Abb. 37 ist die Spin-Spin-KF des 32er-Rings bei $U = 2$ für verschiedene Temperaturen doppelt-logarithmisch dargestellt. Die Steigungen nähern sich tatsächlich dem Wert -1 an. Die Dichte-Dichte-KF dagegen fällt dagegen eher wie j^{-2} ab (Abb. 38). Ob dies auch für den Grundzustand im thermodynamischen Limes zutrifft, müßte durch weitere Untersuchungen (finite-size scaling) geklärt werden. Andere Ursachen für die Abweichung sind möglicherweise ein zusätzlicher j^{-2} -Term, der auf kurzen Abständen dominant ist, oder logarithmische Korrekturen.

Schwache Dotierung: Die Spin-Spin-KF fällt bei schwacher Dotierung ($n = .94$) deutlich stärker ab als bei $n = 1$. Sowohl bei der Spin-Spin als auch bei der Dichte-Dichte-KF ergeben die MC-Resultaten bei $U = 2$ (Abb. 39) einen Exponenten $\gamma = 1.5$. Für $U = 4$ sind die Fluktuationen für eine Bestimmung von γ zu groß. $\gamma = 1.5$ steht in Übereinstimmung mit den RG-Rechnungen²⁴ die diesen Exponenten für $n \rightarrow 1$, $n \neq 1$ für beliebiges $U > 0$ vorhersagen.

Halbe Bandfüllung Abb. 40 zeigt die exemplarisch die Dichte-Dichte-KF des 32er-Rings bei $U = 2$ für $\beta = 8, 16$ und 32 . Es wurde nur der erste und dann jeder vierte Werte eingetragen, weil dazwischen die Fluktuationen sehr groß werden. Wegen der periodischen Randbedingungen sind dies nur drei bis vier Werte, was für eine genaue Bestimmung der Exponenten natürlich nicht ausreicht. Aus der Gerade durch die drei Punkte ergibt sich ein Exponent von $\gamma \simeq 2$ bei $\beta = 32$ im Vergleich zu $\gamma \simeq 1.9$ aus der RG-Rechnung für den Grundzustand.

Die Bestimmung des langreichweitigen Verhaltens der Korrelationsfunktionen aus den MC-Resultaten ist vor allem wegen der großen erforderlichen Systemlängen schwierig. Wo sie sinnvoll durchgeführt werden kann - das ist hier in der Nähe der halben Bandfüllung bei relativ kleinen Werten von U -, werden die Resultate aus der RG-Rechnung bestätigt.

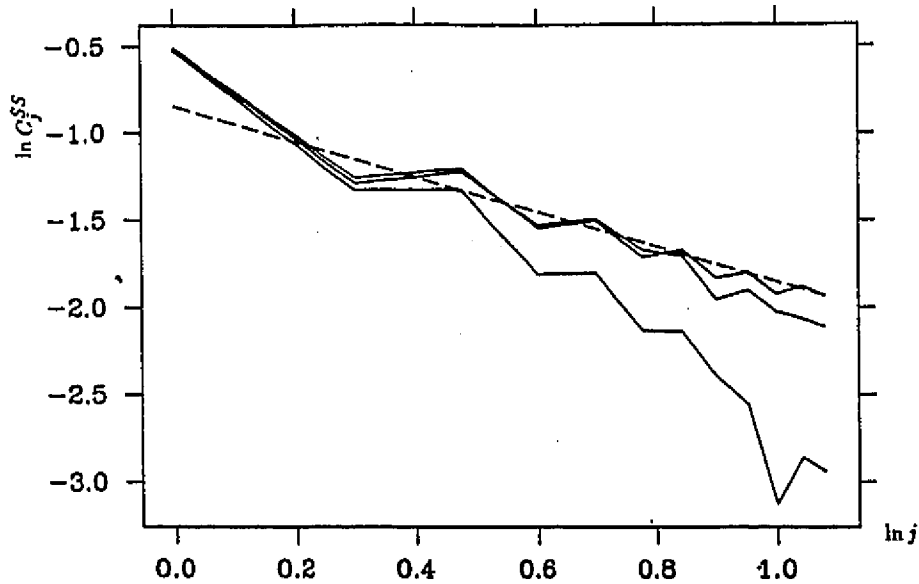


Abb. 37: Spin-Spin-KF bei halber Bandfüllung (doppelt-logarithmisch)
 $N = 32, U = 2, \beta = 8, 16, 32$ (von unten nach oben) (- -): Steigung -1

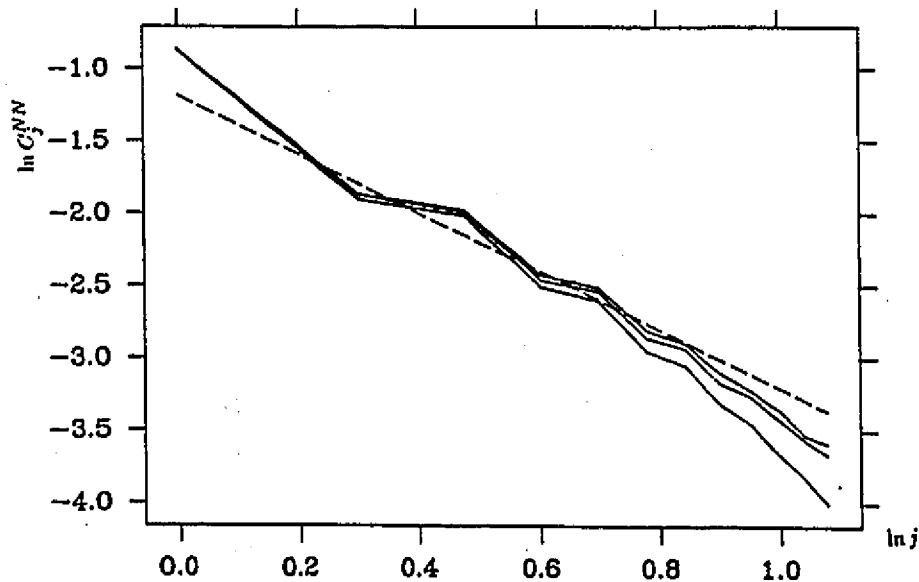


Abb. 38: Dichte-Dichte-KF bei halber Bandfüllung (doppelt-logarithmisch)
 $N = 32, U = 2, \beta = 8, 16, 32$ (von unten nach oben) (- -): Steigung -2

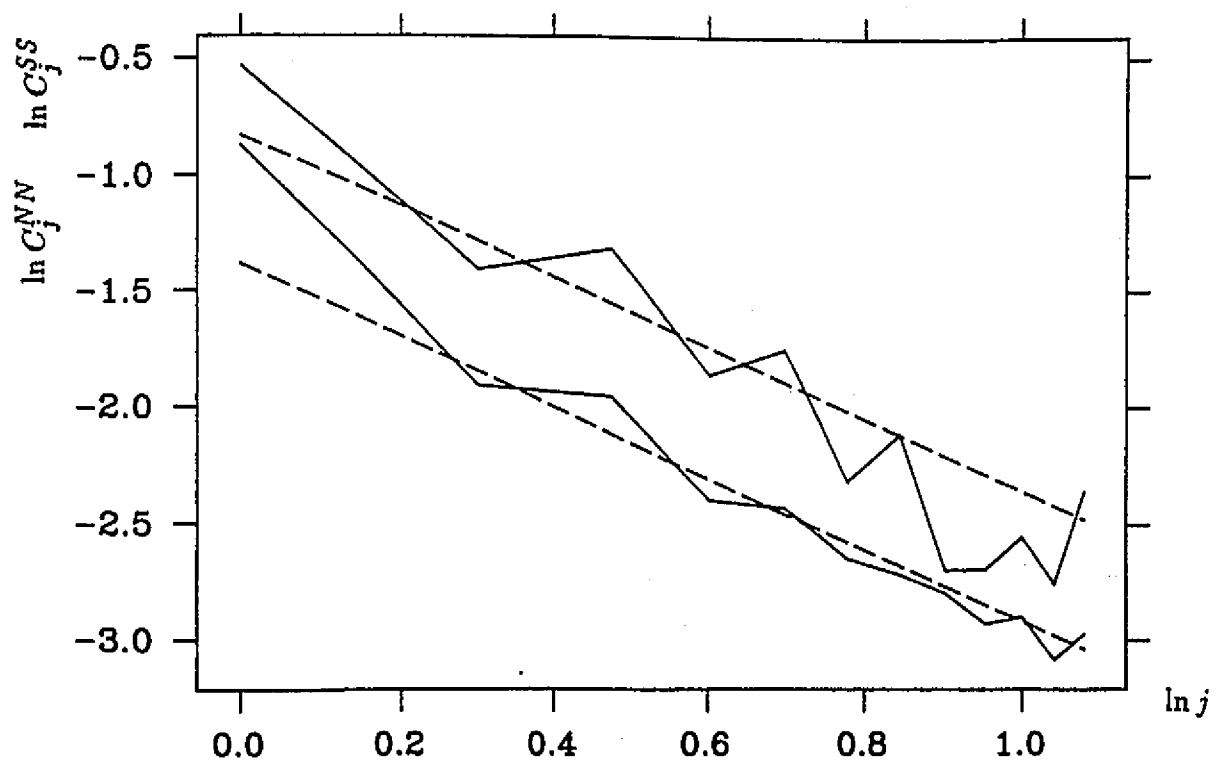


Abb. 39: Dichte-Dichte-KF (unten) und Spin-Spin-KF (oben) bei schwacher Dotierung ($n = .94$) (doppelt-logarithmisch)
 $N = 32, U = 2, \beta = 32$, (- -): Steigung -1.5

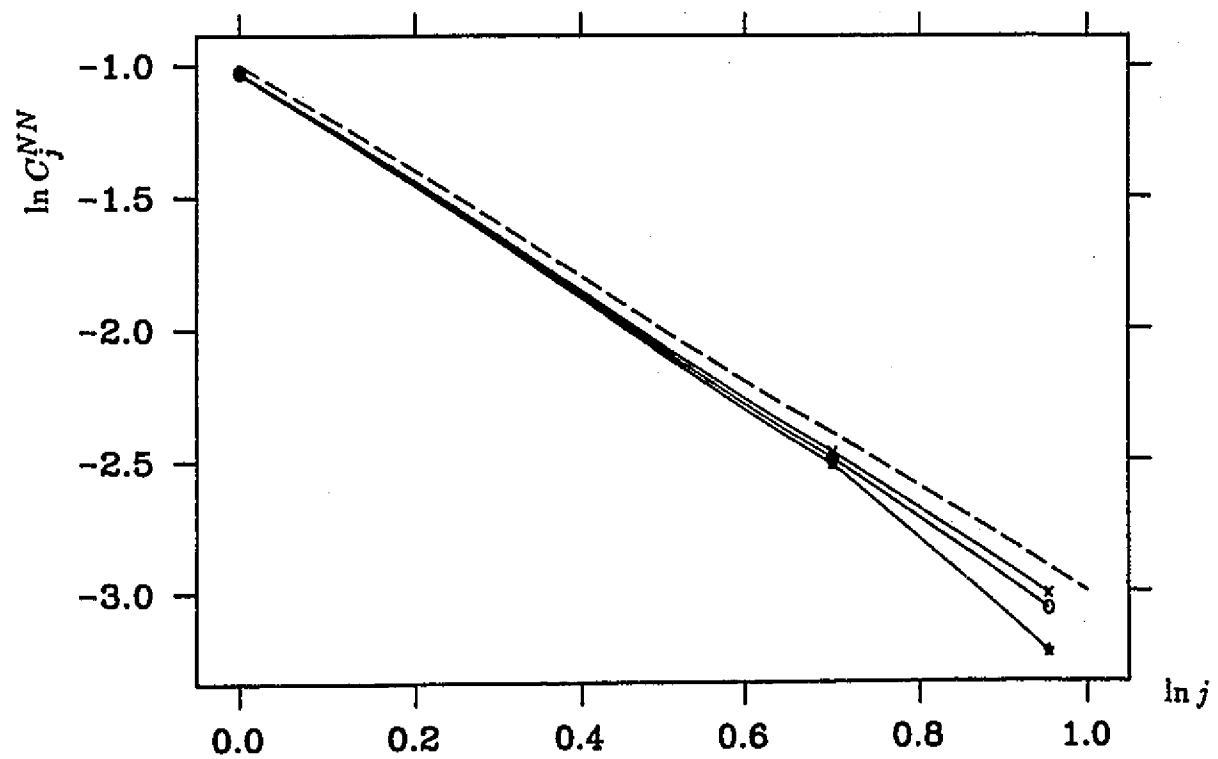


Abb. 40: Dichte-Dichte-KF bei viertel Bandfüllung (doppelt-logarithmisch)
 $N = 32, U = 2, \beta = 8, 16, 32$ (- -): Steigung -2

7.4.7. Impulsverteilung

Schließlich wurde die Einteilchendichte im Impulsraum bestimmt:

$$\langle n(q) \rangle = \langle n_{\uparrow}(q) \rangle + \langle n_{\downarrow}(q) \rangle \quad , \quad (7.13)$$

$$\langle n_{\sigma}(q) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{jk} e^{iq(k-j)} \langle c_{j\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \rangle \equiv \sum_j e^{iqj} C_{j\sigma}^N \quad (7.14)$$

$$\text{mit} \quad C_{j\sigma}^N = \frac{1}{N} \sum_i \langle c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+j,\sigma} \rangle \quad . \quad (7.15)$$

Die q -Zustände (vgl. (7.1)) diagonalisieren den ungestörten Hamiltonian (1.3). Abb. 41 zeigt die Impulsverteilung für den 32er-Ring bei $\beta = 32$ für verschiedene Werte von U bei halber Bandfüllung. Bei $U = 0$ ist eine scharfe Fermikante bei $q_F = \frac{n\pi}{2}$ zu erkennen. Mit wachsendem U "weicht" die Kante "auf", und der Sprung bei q_F wird kleiner. Bei $n = 1$ ist auch ein verschwindender Sprung Δ zu erwarten, da es sich hier um einen antiferromagnetischen Isolator handelt. Bei $n = \frac{1}{2}$ (Abb. 42) passiert aber qualitativ dasselbe. Die Wechselwirkung verkleinert den Sprung in der Impulsverteilung bei $q = q_F$. Es gibt zwar auch für $U > 0$ noch einen endlichen Sprung in $n(q)$, aber dies ist ein *finite-size-Effekt*, wie S.Sorella et.al.²⁶ zeigten. Das Verhalten bei q_F in Abhängigkeit von der Systemgröße wurde dort mit MC-Simulationen von Ringen mit bis zu 36 Gitterplätzen bei $U = 8$ untersucht. Der Sprung $\Delta(N)$ bei q_F nimmt mit der Systemgröße wie

$$\Delta(N) \sim N^{-\theta} \quad (7.16)$$

ab, was im Einklang mit RG-Rechnungen steht, die eine Singularität der Form

$$n(q) = n(q_F) + A |q_F - q|^{\theta} \text{sgn}(q_F - q) \quad (7.17)$$

vorraussagen. Auch quantitativ stimmen die Werte von θ nach Ref.26 im Rahmen Genauigkeit mit den RG-Ergebnissen überein. Die Resultate für den Fall $U \rightarrow \infty$ ²⁷ bestätigen diese Ergebnisse. Man spricht hier von einem *marginalen* Leiter im Gegensatz zum *normalen* Leiter, bei dem $\Delta(N) = \text{const.}$ gilt, d.h. $\theta = 0$. Das eindimensionale Hubbardmodell verhält sich also nicht wie eine Fermiflüssigkeit, und die Anwendbarkeit des TL-Modells scheint auch für große Werte von U gegeben.

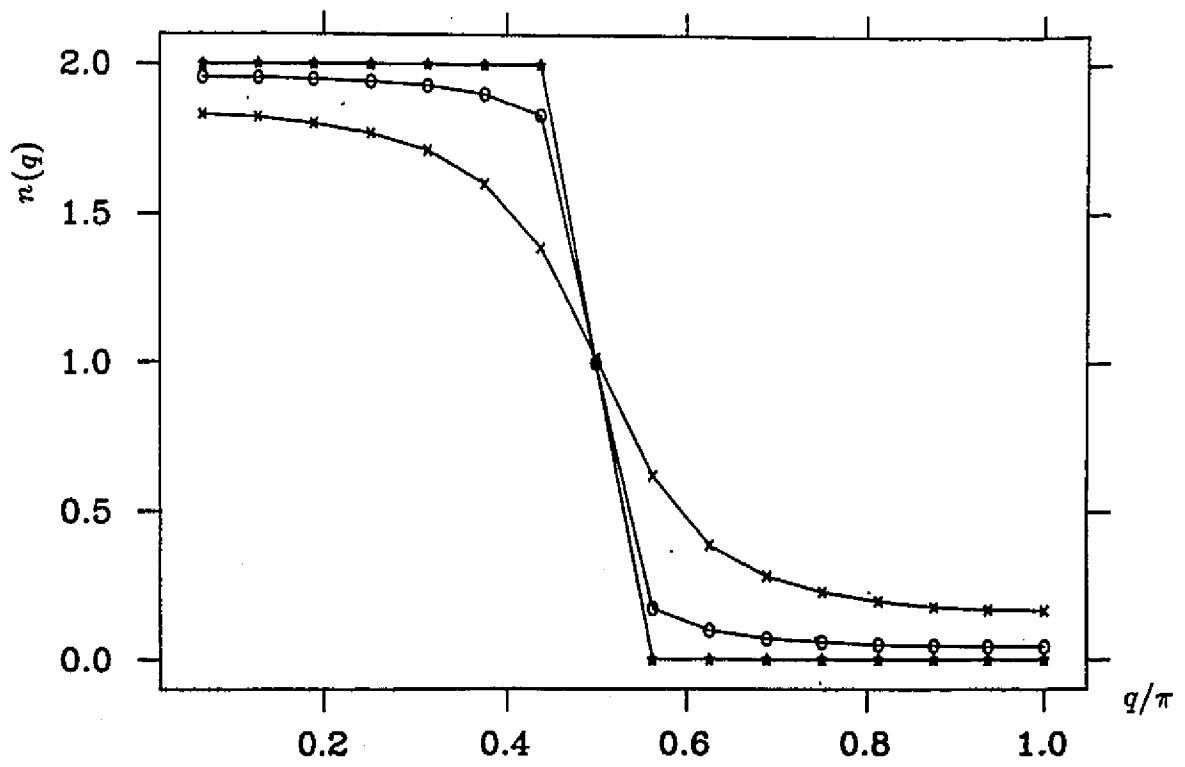


Abb. 41: Impulsverteilung bei halber Bandfüllung

$N = 32, \beta = 32$ $U = 0(\star), 2(\circ), 4(\times)$

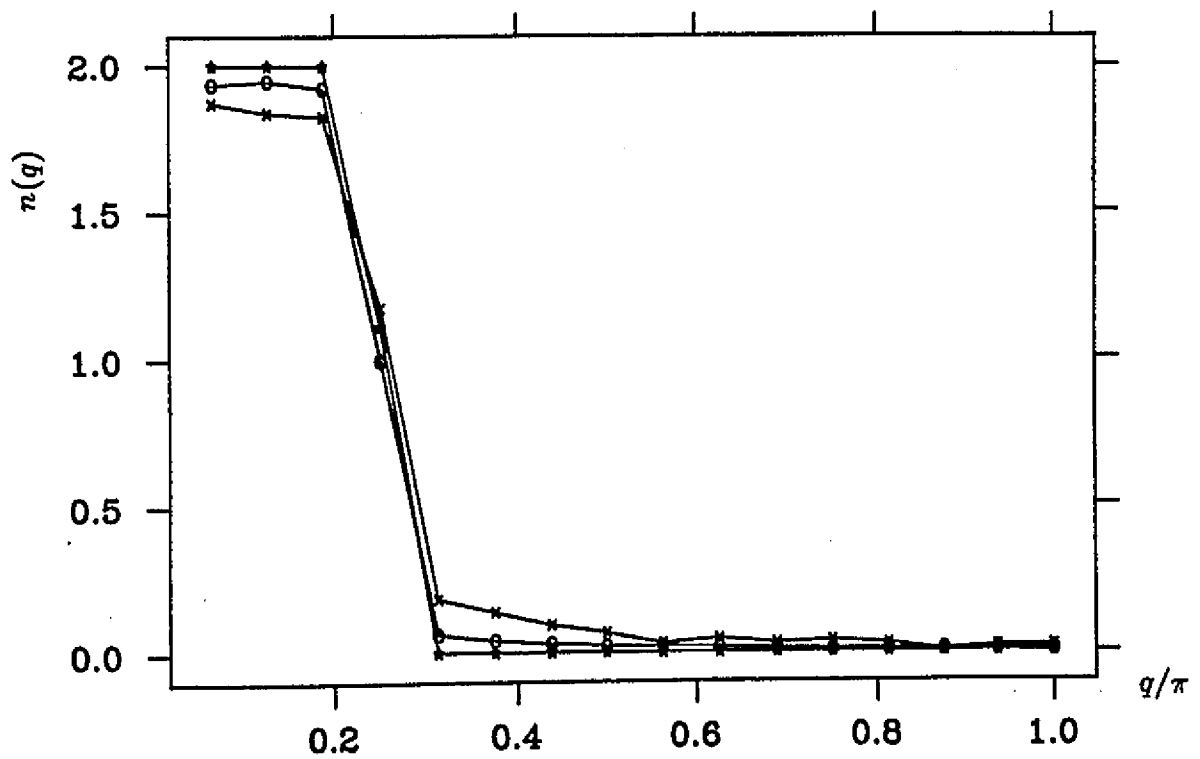


Abb. 42: Impulsverteilung bei viertel Bandfüllung

$N = 32, \beta = 32$ $U = 0(\star), 2(\circ), 4(\times)$

8. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die Entwicklung eines Monte-Carlo-Verfahrens zur Untersuchung korrelierter Fermionensysteme dargestellt. Es beruht auf der Pfadintegraldarstellung der Zustandssumme. Das d -dimensionale Quantensystem wird durch Anwendung der diskreten Hubbard-Stratonovich-Transformation¹⁴ auf ein $d+1$ -dimensionales klassisches System mit Kopplung an ein zeitabhängiges äußeres Isingspin-Feldes abgebildet. Es handelt sich dabei um ein großkanonisches Ensemble. Die gleichzeitigen Einteilchen-Greensfunktionen im Ortsraum bei festem Isingspin-Hilfsfeld G_{ij}^{σ} und daraus die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen verschiedenen Konfigurationen des Hilfsfeldes werden exakt berechnet. Die Rechenzeit steigt kubisch mit der Systemgröße. Dafür ist das Verfahren für eine große Klasse von Modellen anwendbar, im Prinzip auch auf solche mit negativen Fermionendeterminanten, wie das Hubbardmodell in $d > 1$ bei $n \neq 1$. Es erlaubt die Bestimmung der Erwartungswerte von Ein- oder Mehrteilchenoperatoren. Im Gegensatz zur *Projector-Monte-Carlo-Methode*²⁶ lassen sich auch Erwartungswerte zeitabhängiger Observable wie die staggered magnetische Suszeptibilität sowie die Temperaturabhängigkeit berechnen.

Das Verfahren wurde für das Hubbardmodell mit einem Leitungsband und on-site Wechselwirkung in $d = 1, 2$ und 3 implementiert. Erweiterungen auf mehrere Bänder oder nächste-Nachbar-Wechselwirkung sind möglich. Die Hopping-Matrix kann zu Beginn beliebig vorgegeben werden. Es liegen Routinen zur Bestimmung der Erwartungswerte verschiedener Observable, wie innere Energie, lokale Magnetisierung, Korrelationsfunktionen, magnetische Suszeptibilitäten u.a. vor. Das Programm wurde am eindimensionalen Hubbardmodell mit den Resultaten aus exakter Diagonalisierung^{5,6} für Ringe mit bis zu 6 Gitterplätzen getestet. In höheren Dimensionen wurden die Ergebnisse aus anderen MC-Simulationen zum Vergleich herangezogen. Die Übereinstimmung war im Rahmen der statistischen Fehler stets gegeben.

Zur numerischen Stabilisierung bei tiefen Temperaturen wurden Orthogonalisierungsprozeduren bei der Bestimmung von G^σ nach (2.27) und (2.32) eingefügt. Das Verfahren war bis zu einer getesteten Temperatur von $\beta = 128$ stabil. Weiterhin steigt die Zahl der Schritte L in der zusätzlichen (Trotter-)Dimension mit der inversen Temperaturen β an. Dies führt zu einem erheblichen Rechenaufwand, da L quadratisch in die Anzahl der durchzuführenden Matrizenmultiplikationen zur Bestimmung von G^σ eingeht. Diese Abhängigkeit von L konnte durch das Abspeichern von Zwischenprodukten in einer hierarchischen Struktur auf $\sim L \log L$ reduziert werden. Dies ergibt eine Beschleunigung um einen Faktor von typischerweise 5 bis 20. Das Ausnutzen der dünnen Besetzung der Matrizen bei der Multiplikation bedeutet ebenfalls eine erhebliche Steigerung der Effizienz.

Die Bestimmung von Korrelationfunktionen (KFen) und der Impulsverteilung $n(q)$ im eindimensionalen Hubbardmodell war eine Anwendung des Programms. Dabei wurden Ringe mit bis zu 48 Gitterplätzen bei $U = 2, 4$ und inversen Temperaturen bis zu $\beta = 32$ simuliert. Die Ergebnisse wurden mit Variations-⁷, Störungs-²⁷ und Renormierungsgruppenrechnungen^{23,24} sowie mit anderen MC-Simulationen²⁶ verglichen. Die Übereinstimmung der Spin-Spin-KF mit den Resultaten aus der Gutwiler-Wellenfunktion⁷ ist qualitativ und für kurze räumliche Abstände auch quantitativ recht gut. Die antiferromagnetischen Korrelationen sind aber bei den Variationsrechnungen gegenüber den MC-Resultaten unterdrückt. Dieser Unterschied wird mit wachsender Systemgröße und sinkender Temperatur bei der MC-Simulation verstärkt. Bei $n = \frac{1}{2}$ findet man in den MC-Simulationen ein Maximum in $C^{SS}(q)$ bei $q = q_F$ welches mit der Systemgröße schwach anwächst. Hier ist der Verlauf für $U \leq 2$ recht gut durch eine Störungsrechnung erster Ordnung zu beschreiben. Bei der Variationsrechnung tritt dieses Maximum dagegen nicht auf. Die Dichte-Dichte-KF ist dagegen bei der MC-Simulation gegenüber den Variationrechnungen unterdrückt. Die Abweichungen werden mit sinkender Temperatur und wachsender Systemgröße kleiner. Über das Verhalten bei $T = 0$ im thermodynamischen Limes herrscht daher noch keine Klarheit. Die Cooperpaar-KF ist im Fall $n = 1$ bis auf ein alternierendes Vorzeichen gleich der Dichte-Dichte-KF. Bei allen Bandfüllungen wird sie durch

die Wechselwirkung U stark unterdrückt. Die Bestimmung des langreichweitigen Verhaltens der KFe ist wegen der großen erforderlichen Systemlängen und der statistischen Fluktuationen schwierig. Der Abfall der KFe mit dem räumlichen Abstand scheint aber einem Potenzgesetz zu folgen. Die Exponenten konnten für $U = 2$ bestimmt werden und stimmen im Rahmen der Genauigkeit mit denen der RG-Rechnungen überein, mit Ausnahme der Dichte-Dichte-KF bei $n = 1$. Weiterhin bewirkt die Wechselwirkung U sowohl bei $n = 1$ als auch bei $n = \frac{1}{2}$ eine Verkleinerung des Sprungs Δ in der Impulsverteilung $n(q)$. Dies deutet auf ein nicht-Fermiflüssigkeits-Verhalten des eindimensionalen Hubbardmodell hin, was durch die Bestimmung der Systemgrößenabhängigkeit von Δ in Ref.26 auch quantitativ bestätigt wurde.

Die Untersuchung endlicher Systeme ist eine wertvolle Methode zur Bestimmung der Eigenschaften korrelierter Fermionen, da analytische Lösungen meistens nicht gefunden werden können, und andere Methoden unkontrollierte Näherungen enthalten. Mit den in den letzten Jahren entwickelten MC-Verfahren können Systeme mit einigen hundert Teilchen simuliert werden, was über die Möglichkeiten exakter Diagonalisierung weit hinausgeht und wohl sinnvolle finite-size-Analysen erlaubt. Die Resultate sind im Rahmen der statistischen Fluktuationen bis auf die Diskretisierung in Trotter-Richtung exakt, dieser Fehler kann aber gut kontrolliert werden. Das starke Anwachsen der Rechenzeit mit der Systemgröße sowie mit der inversen Temperatur β ist ein wichtiger Ansatzpunkt für weitere Verbesserungen des Algorithmus'. Vor allem ist aber ein besseres Verständnis des Vorzeichenproblems in der Fermionendeterminante notwendig, um die Anwendbarkeit auf große Systeme bei tiefen Temperaturen und beliebigen Bandfüllungen zu verbessern.

Literaturverzeichnis

1. M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**,159 (1963)
J.Hubbard, Proc. R. Soc. London A **276**,283 (1964)
J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**,275 (1963)
2. E.Lieb, F.Wu, Phys. Rev. Lett. **20**,1445 (1968)
3. M.Takahashi, Prog. Theor. Phys. **42**,1098 (1969); **43**,1619 (1970)
4. H.Shiba, Phys. Rev. B **6**,930 (1972);
5. H.Shiba, P.A.Pincus, Phys. Rev. B **5**,1966 (1972);
H.Shiba, Prog. Theor. Phys. **48**,2171 (1972)
6. Z.G.Soos, S.Ramasesha, Phys. Rev. B **29**,5410 (1984)
7. W.Metzner, D.Vollhardt, Phys. Rev. B **37**,7382 (1988);
F.Gebhardt, D.Vollhardt, Phys. Rev. B **38**,6911 (1988)
8. J.G.Bednorz, K.A.Müller, Z.Phys. **64**,188 (1986);
9. P.W.Anderson, Science **235**,1196 (1987);
10. J.E.Hirsch, Phys. Rev. B **26**,5033 (1982); H.Hirsch, D.J.Scalapino,
R.L.Sugar, R.Blankenbecler, Phys. Rev. B **26**,5033 (1982); H.Hirsch,
D.J.Scalapino, Phys. Rev. B **27**,7169 (1983)
11. R.Blankenbecler, D.J.Scalapino, R.L.Sugar, Phys. Rev. D **24**,2278 (1981);
D.J.Scalapino, R.L. Sugar, Phys.Rev. B **24**, 4295 (1981)
12. J.W.Negele, H.Orland, *Quantum Many Particle Systems*, Seite 30 ff,
Addison-Wesley Publishing Company, 1988
13. M.Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56**,1454 (1976)
14. J.E.Hirsch, Phys. Rev. B **25**,4059 (1983)
15. G.M.Buendia, Phys. Rev. B **33**,3519 (1986)
16. J.E.Hirsch, Phys. Rev. B **31**,4403 (1985)

17. R.T.Scalettar, D.J.Scalapino, R.L.Sugar, D.Toussaint, Phys. Rev. B **39**, 4711 (1989)
18. J.E.Hirsch, Phys. Rev. B **35**,1851 (1987)
19. S.Gottlieb, W.Liu, D.Toussaint, R.L.Renken, R.L.Sugar, Phys. Rev. D **35**, 2531 (1987)
20. S.R.White, D.J.Scalapino, R.L.Sugar, E.Y.Loh, J.E.Gubernatis, R.T.Scalettar, Phys. Rev. B **40**,506 (1989)
21. z.B. J.H.Wilkinson *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Seite 515ff und 290ff, Oxford Science Publications
22. J.Sólyom, Adv. Phys. **28**,209 (1979)
23. T.Giamarchi, H.J.Schulz,Phys. Rev. B **39**,4620 (1989)
- 24 H.J.Schulz, Phys. Rev. Lett. **64**,2831 (1990)
- 25 M.C.Gutzwiller, Phys.Rev. A **134**,923 (1964); A **137**,a126 (1965)
26. S.Sorella, A.Parola, M.Parinelli, E.Tosatti, Europhys. Lett. **12**, 721 (1990)
S.Sorella, R.Car, S.Baroni, M.Parinelli, Europhys. Lett. **8**, 663 (1989)
27. M.Ogata, H.Shiba, Phys. Rev. B **41**,2326 (1990)

Inhalt der Programmbeschreibung

1.	Hauptprogramm	1
1.1.	Laufparameter	1
1.2.	Konstanten und Felder für die MC-Simulation	2
1.3.	Mittelwerte von Observablen	3
1.4.	Programmablauf	3
2.	Unterprogramme	5
2.1.	Monte-Carlo-Prozedur	5
2.2.	Bestimmung der Erwartungswerte	18
3.	Rechenzeiten	22

Programmbeschreibung

Die folgende Programmbeschreibung bezieht sich auf das Programm **HM1D**, das zur Simulation des eindimensionalen Hubbardmodells dient. Es liegt dieser Arbeit bei. Die Änderungen für den zwei- bzw. dreidimensionalen Fall sind im Anschluß angefügt. Die maximale Anzahl von Gitterplätzen beträgt hier 65, die der Trotter-Schritte 1025. Die Grenzen sind willkürlich gewählt und können ggf. herauf- oder heruntergesetzt werden.

1. Hauptprogramm

1.1. Laufparameter

Die Laufparameter werden zu Beginn des Programmlaufs über den Fortran-kanal 4 eingelesen. Es sind

N:	Anzahl der Gitterplätze
NT:	Anzahl der Trotterschritte, entspricht L in Gl. (2.8)
U:	Größe der on-site-Wechselwirkung der Elektronen
P:	chemisches Potential (μ)
BETA:	inverse Temperatur (β)
MCST:	Anzahl der MC-Sweeps zur Thermalisierung des Systems
NMES:	Anzahl der durchzuführenden Messungen der Observablen
MCSZ:	Anzahl der MC-Sweeps zw. zwei Messungen zur Entkopplung der Zustände.
LF:	Anzahl der <i>Updatings</i> der Greensfunktionen nach (2.36) zwischen zwei vollständigen Neuberechnungen, auch gleich Anzahl der ohne Orthogonalisierung durchführbaren Matrixmultiplikationen
LMAX:	Maximaler Abstand für die Berechnung von Korrelationsfunktionen (i.d.R. gilt $LMAX = \frac{N}{2}$)

T2: Größe des Hopping-Terms für übernächste Nachbarn

1.2. Konstanten und Felder für die MC-Simulation

IS(1025,65):	Isingspin-Hilfsfeld; erster Index: Trotter-Richtung, zweiter Index: Ortsraum
HK(65,65):	Hopping-Matrix (t_{ij} in Gl.(1.3))
EK(65,65):	exponenzierte Hopping-Matrix
EKI(65,65):	Inverse der exponenzierten Hopping-Matrix
G1,G2(65,65):	gleichzeitige Einteilchen-Greensfunktionen für Elektronen mit Spin up bzw. down.
E(3):	enthält die beiden möglichen Werte in der Diagonalmatrix in Gl.(2.26) ($E(1), E(3) = \exp\{\pm\sigma\Delta\tau\lambda s_{i,l}\}$)
M(250):	Feld für den Zufallszahlengenerator R250 nach Kirckpatrick-Stoll
LE(385):	LE(j) gibt an, ob die Matrix Nr. j in der hierarchischen Struktur (Kap. 6.1) besetzt ist (1) oder nicht (0). (Dimensionierung: mindestens $3\frac{NT}{LF}$)
LB(129):	LB(k) weist dem Matrixprodukt P_k aus Gl.(6.1) einen Platz in der hierarchischen Struktur zu. (Dimensionierung: mindestens $\frac{NT}{LF}$)
NUP:	$NUP = \frac{NT}{LF}$; Anzahl abzuspeichernder Produkte P_k , gleich Anzahl der vollständigen Neuberechnungen der Greensfunktionen für einen MC-Sweep.
DT:	$DT = \frac{BETA}{NT}$; Diskretisierungsgröße in Trotter-Richtung
FL:	entspricht dem Parameter λ aus der diskreten HS-Transformation (2.21).

1.3. Mittelwerte von Observablen

SIGM:	Vorzeichen der Fermionendeterminanten (im eindimensionalen Fall gilt stets SIGM=1)
CSS0:	lokale Magnetisierung L_0 aus Gl.(3.14)
SM:	magnetischer Strukturfaktor $S(0)$ nach (3.18)
SM1,SM2:	$S(\frac{\pi}{2})$ und $S(\pi)$ (Weitere magnetische Strukturfaktoren können selbstverständlich eingeführt werde.)
CHIM:	antiferromagnetische Suszeptibilität nach (4.2)
ENM:	innere Energie nach (4.1)
RNM1:	Elektronendichte für Spin up
RNM2:	Elektronendichte für Spin down
RNM:	gesamte Elektronendichte
HM:	Lochdichte nach (7.7)
DM:	Doppelbesetzungsdichte, wird nach (7.10) berechnet
Sowie folgende Vektoren der Länge LMAX:	
CSS:	Spin-Spin-Korrelationsfunktion im Ortsraum nach (7.5) und (7.6)
CNN:	Dichte-Dichte-KF
CDD:	Doppelbesetzungs-Doppelbesetzungs-KF
CHH:	Loch-Loch-KF
CSC:	lokale Cooperpaar-KF nach (7.11)
CN:	Dichte-Korrelation nach (7.15)

1.4. Programmablauf

Die verwendeten Unterprogramme stehen in eckigen Klammern.

- Einlesen der Laufparameter

- Berechnung der Konstanten (NUP,DT,FL)
- Zu-Null-Setzen der Observablen-Erwartungswerte
- Initialisierung des Zufallszahlengenerators [*RNST*]
- Eingabe der Hopping-Matrix HK [*HOPMA*]
- Berechnung von EK und ihrer Inversen EKI [*EXPHK*]
- Initialisierung des Isingspin-Hilfsfeldes IS [*INFIELD*]
- Initialisierung der hierarchischen Struktur der Matrixprodukte [*INFIELD*]
- MC-Sweeps zur Thermalisierung (Anzahl: MCST) [*SWEEP*]
- Bestimmung der Observablen-Mittelwerte
 - MC-Sweeps zur Entkopplung der Zustände (Anzahl: MCSZ) [*SWEEP*]
 - Bestimmung des mittleren Vorzeichens der Fermionendeterminante SIG [*SWEEP*]
 - Bestimmung und Aufaddieren der aktuellen Observablenwerte
 - lokale Magnetisierung CSS0 [*LOKMAG*]
 - Strukturfaktoren SM,SM1,SM2, ... [*STRUKT*]
 - antiferromagnetische Suszeptibilität CHIM [*SUSZEP*]
 - innere Energie ENM [*ENERG*]
 - Elektronendichten RN,RN1,RN2 [*ELDICHTE*]
 - Lochdichte HM [*LODICHTE*]
 - Spin-Spin-Korrelationsfunktion CSS [*KORRSS*]
 - Dichte-Dichte-KF CNN [*KORRNN*]
 - Doppelbesetzungs-KF CDD [*KORRDD*]
 - Loch-Loch-KF CHH [*KORRHH*]
 - Cooperpaar-KF CSC [*KORRSC*]
 - Dichte-KF CN [*KORRN*]
 - ...
- Ausgabe der Laufparameter und der Observablen-Mittelwerte

2. Unterprogramme

2.1. MC-Prozedur

HOPMA

Zweck	Eingabe der Hoppingmatrix, hier: Hopping zwischen nächsten und übernächsten Nachbarn möglich
Aufruf	CALL HOPMA(HK,N,T2)
Argumente	HK: Real-Feld (NxN) mit den Einträgen der Hoppingparameter (output) N: Anzahl der Gitterplätze (input) T2: Hoppingparameter für übernächste Nachbarn (input)

EXPHK

Zweck	Exponenzierung der Hopping-Matrix, Multiplikation mit $\exp(-\Delta\tau P)$ und Invertierung
Aufruf	CALL EXPHK(HK,EK,EKI,N,DT,P)
Argumente	HK: Real-Feld (NxN), symmetrische Hopping-Matrix (input) EK: Real-Feld (NxN) mit der exponenzierten Hopping-Matrix (output) EKI: Real-Feld (NxN) mit der Inversen von EK (output) N: Anzahl der Gitterplätze (input) DT: Diskretisierungsgröße (output)

	P: chemisches Potential (input)
Routinen	RS: EISPACK-Routine zur Diagonalisierung
	LINRG: IMSL-Routine zur Matrixinversion

RS

Zweck	EISPACK-Routine zur Bestimmung der Eigenwerte und ggf. der Eigenvektoren einer reellen, symmetrischen Matrix
Aufruf	CALL RS(NM,N,A,W,MATZ,Z,FV1,FV2,IERR)
Argumente	NM: Zeilen-Dimensionierung von A (input)
	N: Ordnung von A (input)
	A: Real-Feld ($N \times N$) mit der symmetrischen Matrix (input)
	W: Real-Vektor (N) mit den Eigenwerten von A (output)
	MATZ: Integer-Variable; MATZ=0: nur Eigenwerte, MATZ $\neq$ 0: Eigenwerte und Eigenvektoren zu bestimmen (input)
	Z: Real-Feld ($N \times N$) mit den Eigenvektoren von A (output)
	FV1,FV2: Real-Vektoren (N) als Arbeitsfelder
	IERR: Fehlerindex (output)

LINRG

Zweck	IMSL-Routine zur Bestimmung der Inversen einer reellen Matrix
Aufruf	CALL LINRG(N,A,LDA,AINV,LDAINV)
Argumente	N: Ordnung von A (input)
	LDA: Zeilen-Dimensionierung von A (input)
	A: Real-Feld ($N \times N$) mit der zu invertierenden Matrix (input)

LDA: Zeilen-Dimensionierung von A (input)
 AINV: Real-Feld (NxN) mit der Inversen von A (output)
 LDAINV: Zeilen-Dimensionierung von AINV (input)

LINRT

Zweck	IMSL-Routine zur Bestimmung der Inversen einer reellen Dreiecksmatrix
Aufruf	CALL LINRT(N,R,LDR,IPATH,RINV,LDRINV)
Argumente	N: Ordnung von R (input) R: Real-Feld (NxN) mit der zu invertierenden Matrix (input) LDR: Zeilen-Dimensionierung von R (input) IPATH: Integer-Variable; IPATH=1, falls R untere Dreiecksmatrix, IPATH=2, falls R obere Dreiecksmatrix RINV: Real-Feld (NxN) mit der Inversen von R (output) LDRINV: Zeilen-Dimensionierung von RINV (input)

INFIELD

Zweck	Initialisierung des Isingspin-Hilfsfeldes
Aufruf	CALL INFIELD(IS,NT,N,M)
Argumente	IS: Integer-Feld (NTxN), Isingspin-Hilfsfeld (output) NT: Anzahl der Trotter-Schritte (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input) M: Integer-Vektor der Länge 250 aus Pseudozufallszahlen zwischen 0 und $2^{32} - 1$ (input/output)

RNST

Zweck	Cray-Routine zur Initialisierung des Zufallszahlengenerators R250
Aufruf	CALL RNST(ISEED,M,IER)
Argumente	ISEED: Integer-Variable zwischen 0 und $2^{32} - 1$ (input) M: Integer-Vektor der Länge 250 aus Pseudozufallszahlen zwischen 0 und $2^{32} - 1$ (output) IER: Fehlerindex, IER=1, wenn ISEED nicht im erlaubten Intervall liegt (output)

R250

Zweck	Cray-Routine zur Erzeugung eines Vektors von reellen Pseudo-Zufallszahlen nach dem Algorithmus von Kirckpatrick-Stoll
Aufruf	CALL R250(M,V,N)
Argumente	M: Integer-Vektor der Länge 250 aus Pseudozufallszahlen zwischen 0 und $2^{32} - 1$ (input/output) V: Real-Vektor der Länge N aus reellen Pseudozufallszahlen zwischen 0 und 1 (output) N: Anzahl der zu erzeugenden Pseudo-Zufallszahlen

SWEEP

Zweck	Ein MC-Sweep durchs "Trotter"- und Ortsgitter
Aufruf	CALL SWEEP(LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,LF,M,SIG)
Argumente	LB: Integer-Vektor (129), Ordnet den Matrizen P_k aus (6.1)

einen Platz in der hierarchischen Struktur zu (input/output)

LE: Integer-Vektor (385), LE(j) gibt an, ob die Matrix j in der hierarchischen Struktur besetzt ist (LE(j)=1) oder nicht (LE(j)=0). (input/output)

G1,G2: Real-Felder (N×N), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input/output)

IS: Integer-Feld (NT×N), Isingspin-Hilfsfeld (input/output)

EK: Real-Feld (N×N), exponenzierte Hoppingmatrix (input)

EKI: Real-Feld (N×N), Inverse von EK (input)

E: Real-Vektor (3), Boltzmannfaktoren (input)

N: Anzahl der Gitterplätze (input)

NT: Anzahl der Trotter-Schritte (input)

LF: Anzahl der möglichen Matrixmultiplikationen ohne Orthogonalisierung (input)

M: Integer-Vektor der Länge 250 aus Pseudozufallszahlen zwischen 0 und $2^{32} - 1$ (input/output)

SIG: Real-Variable, mittleres Vorzeichen der Fermionendeterminanten (output)

Routinen

UPDATE: Exaktes Updating der Greensfunktionen nach (2.36) bei Übergang zum nächsten Trotter-Schritt

GITTER: Ein MC-Sweep durchs Ortsgitter mit Anpassung der Greensfunktionen nach (2.20)

BPROP: Neuberechnung eines Blocks aus B-Matrizen nach (6.1), Neuorganisation der hierarchischen Struktur und Berechnung der Greensfunktionen

UPDATE

Zweck	Exaktes Updating der Greensfunktionen nach (2.36) bei Übergang zum nächsten Trotter-Schritt
Aufruf	CALL UPDATE(G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,L)
Argumente	G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input/output) IS: Integer-Feld ($NT \times N$), Isingspin-Hilfsfeld (input/output) EK: Real-Feld ($N \times N$), exponenzierte Hoppingmatrix (input) EKI: Real-Feld ($N \times N$), Inverse von EK (input) E: Real-Vektor (3), Boltzmannfaktoren (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input) NT: Anzahl der Trotter-Schritte (input) L: aktueller Trotter-Schritt (input)
Routinen	MULSP: Multiplikationen zweier quadratischer Matrizen, eine voll besetzt, die andere streifendiagonal

GITTER

Zweck	Ein MC-Sweep durchs Ortsgitter; Anpassung der Greensfunktionen nach (2.20)
Aufruf	CALL GITTER(G1,G2,IS,E,N,L,M,SIG)
Argumente	G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input/output) IS: Integer-Feld ($NT \times N$), Isingspin-Hilfsfeld (input/output) E: Real-Vektor (3), Boltzmannfaktoren (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input)

	L: aktueller Trotter-Schritt (input)
	M: Integer-Vektor der Länge 250 aus Pseudozufallszahlen zwischen 0 und $2^{32} - 1$ (input/output)
	SIG: Real-Variable, mittleres Vorzeichen der Fermionendeterminanten (output)
Routinen	R250: CRAY-Routine zur Erzeugung reeller Pseudo-Zufallszahlen zwischen 0 und 1

BINIT

Zweck	Initialisierung der hierarchischen Struktur aus Matrixprodukten; Abspeichern der Matrixprodukte über Fortran-Kanal 16
Aufruf	CALL BINIT(LB,LE,G1,G2,IS,EK,E,N,LF,NUP)
Argumente	LB: Integer-Vektor (129), Ordnet den Matrizen P_k aus Gl.(6.1) einen Platz in der hierarchischen Struktur zu (output) LE: Integer-Vektor (385), LE(j) gibt an, ob die Matrix j in der hierarchischen Struktur besetzt ist (LE(j)=1) oder nicht (LE(j)=0). (input/output) G1,G2: Real-Felder (NxN), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (output) IS: Integer-Feld (NTxN), Isingspin-Hilfsfeld (input) EK: Real-Feld (NxN), exponenzierte Hoppingmatrix (input) E: Real-Vektor (3), Boltzmannfaktoren (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input) LF: Anzahl der möglichen Matrixmultiplikationen ohne Orthogonalisierung (input) NUP: Anzahl der Matrixprodukte ($NUP \leq 128$) (input)

Routinen	QDRDEK: QDR-Zerlegung einer reellen Matrix LINRT: IMSL-Routine zur Inversion einer reellen Dreiecksmatrix MULSP: Multiplikationen zweier quadratischer Matrizen, eine voll besetzt, die andere streifendiagonal MULQDR: Multiplikation zweier QDR-zerlegter Matrizen, Ergebnis wieder QDR-zerlegt BSHIFT: Verschieben der hierarchischen Struktur nach je NUP/2 Ausführungen von BPROP
----------	--

BPROP

Zweck	Neuberechnung eines Blocks aus B-Matrizen nach (6.1), Neuorganisation der hierarchischen Struktur und Berechnung der Greensfunktionen; Abspeichern und Lesen der Matrixprodukte über Fortran-Kanal 16
Aufruf	CALL BPROP(LB,LE,G1,G2,IS,EK,E,N,LF,NUP,IB)
Argumente	LB: Integer-Vektor (129), Ordnet den Matrizen P_k aus Gl.(6.1) einen Platz in der hierarchischen Struktur zu (input/output) LE: Integer-Vektor (385), LE(j) gibt an, ob die Matrix j in der hierarchischen Struktur besetzt ist (LE(j)=1) oder nicht (LE(j)=0). (input/output) G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input/output) IS: Integer-Feld ($N \times N$), Isingspin-Hilfsfeld (input) EK: Real-Feld ($N \times N$), exponenzierte Hoppingmatrix (input) E: Real-Vektor (3), Boltzmannfaktoren (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input)

	LF: Anzahl der möglichen Matrixmultiplikationen ohne Orthogonalisierung (input)
	NUP: Anzahl der Matrixblöcke ($NUP \leq 128$) (input)
	IB: Nummer des zu berechnenden Matrixprodukts (input)
Routinen	QDRDEK: QDR-Zerlegung einer reellen Matrix
	LINRT: IMSL-Routine zur Inversion einer reellen Dreiecksmatrix
	MULSP: Multiplikationen zweier quadratischer Matrizen, eine voll besetzt, die andere streifendiagonal
	MULQDR: Multiplikation zweier QDR-zerlegter Matrizen, Ergebnis wieder QDR-zerlegt
	BSHIFT: Verschieben der hierarchischen Struktur nach je $NUP/2$ Ausführungen von BPROP

BSHIFT

Zweck	Verschiebung der Produkte aus B-Matrizen in der hierarchischen Struktur nach je $NUP/2$ Ausführungen von BPROP, Abspeichern und Lesen der Matrixprodukte über Fortran-Kanal 16
Aufruf	CALL BSHIFT(LB,LE,NUP,N)
Argumente	LB: Integer-Vektor (129), Ordnet den Matrizen P_k aus Gl.(6.1) einen Platz in der hierarchischen Struktur zu (input/output) LE: Integer-Vektor (385), LE(j) gibt an, ob die Matrix j in der hierarchischen Struktur besetzt ist (LE(j)=1) oder nicht (LE(j)=0). (input/output) NUP: Anzahl der Matrixblöcke ($NUP \leq 128$) (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input)

MULSP

Zweck	Multiplikation zweier quadratischer Matrizen, eine davon streifen-diagonal, die andere voll besetzt. Es werden hier zwei Nebendiagonalen berücksichtigt.
Aufruf	CALL MULSP(A,LDA,B,LDB,C,LDC,N,NI)
Argumente	A: quadratisches Real-Feld (input) LDA: Dimensionierung von A (input) B: quadratisches Real-Feld (input) LDB: Dimensionierung von B (input) C: quadratisches Real-Feld, Produktmatrix $C=A \cdot B$ (output) LDC: Dimensionierung von C (input) N: Ordnung der Matrizen (input) NI: NI=0: A streifendiagonal, NI $\neq$ 0: B streifendiagonal (input)

MULQDR

Zweck	Multiplikation zweier QDR-zerlegter Matrizen, Ergebnis ebenfalls QDR-zerlegt
Aufruf	CALL MULQDR(N,LDU,U,D,R,UR,DR,RR)
Argumente	N: Ordnung der Matrizen (input) LDU: Dimensionierung der Matrizen (input) U: Real-Feld ($LDU \times LDU$), Orthogonale Matrix des linken Faktors sowie des Produktes (input/output) D: Real-Vektor (LDU), enthält die Diagonalelemente des linken Faktors sowie des Produkts (input/output)

	R: Real-Feld ($\text{LDU} \times \text{LDU}$), Obere Dreiecksmatrix des linken Faktors sowie des Produktes (input/output)
	UR: Real-Feld ($\text{LDU} \times \text{LDU}$), Orthogonale Matrix rechts (input)
	DR: Real-Vektor (LDU), Diagonalelemente rechts (input)
	RR: Real-Feld ($\text{LDU} \times \text{LDU}$), Obere Dreiecksmatrix rechts (input)
Routinen	QDRDEK: QDR-Zerlegung einer reellen Matrix

MULP

Zweck	Multiplikation zweier QDR-zerlegter Matrizen, Ergebnis nicht QDR-zerlegt
Aufruf	CALL MULP(N,LDU,U,D,R,UR,DR,RR,P,LDP)
Argumente	N: Ordnung der Matrizen (input) LDU: Dimensionierung der Matrizen (input) U: Real-Feld ($\text{LDU} \times \text{LDU}$), Orthogonale Matrix des linken Faktors sowie des Produktes (input) D: Real-Vektor (LDU), enthält die Diagonalelemente des linken Faktors sowie des Produkts (input) R: Real-Feld ($\text{LDU} \times \text{LDU}$), Obere Dreiecksmatrix des linken Faktors sowie des Produktes (input) UR: Real-Feld ($\text{LDU} \times \text{LDU}$), Orthogonale Matrix rechts (input) DR: Real-Vektor (LDU), Diagonalelemente rechts (input) RR: Real-Feld ($\text{LDU} \times \text{LDU}$), Obere Dreiecksmatrix rechts (input) P: Real-Feld ($\text{LDP} \times \text{LDP}$), Produktmatrix (output) LDP: Dimensionierung der Matrix P (input)
Routinen	QDRDEK: QDR-Zerlegung einer reellen Matrix

QDRDEK

Zweck	Zerlegung einer Matrix in ein Produkt aus einer orthogonalen, einer diagonalen Matrix und einer oberen Dreiecksmatrix
Aufruf	CALL QDRDEK(N,A,LDA,U,LDU,D,LDD,R,LDR)
Argumente	N: Ordnung der Matrix A (input) A: Real-Feld, zu zerlegende Matrix (input) LDA: Zeilen-Dimensionierung von A (input) U: Real-Feld, orthogonale Matrix (output) LDU: Zeilen-Dimensionierung von U (input) D: Real-Vektor, N Diagonalelemente (output) LDD: Dimensionierung von D (input) R: Real-Feld, obere Dreiecksmatrix (output) LDR: Zeilen-Dimensionierung von R (input)
Routinen	LQRRR: IMSL-Routine zur QR-Zerlegung einer reellen Matrix mittels Householder Transformationen LQERR: IMSL-Routine zur Berechnung der orthogonalen Matrix aus dem output von LQRRR

LQRRR

Zweck	IMSL-Routine zur QR-Zerlegung einer reellen Matrix mittels householder Transformationen
Aufruf	CALL LQRRR(NRA,NCA,A,LDA,PIVOT,IPVT, QR,LDQR,... ... QRAUX,CONORM)
Argumente	NRA: Anzahl der Spalten von Matrix A (input)

NCA: Anzahl der Zeilen von Matrix A (input)
 A: Real-Feld, zu zerlegende Matrix (input)
 LDA: Zeilen-Dimensionierung von A (input)
 PIVOT: Logical-Variable, PIVOT=.TRUE. : Zeilenpivotierung,
 PIVOT=.FALSE. : ohne Zeilenpivotierung (input)
 IPV: Real-Vektor der Länge NCA, enthält ggf. Informationen
 über die pivotierten Zeilen (output)
 QR: Real-Feld, enthält Informationen über die QR-Zerlegung;
 oberer, rechter Teil enthält die Dreiecksmatrix (output)
 LDQR: Zeilen-Dimensionierung von QR (input)
 QRAUX: Real-Vektor der Länge NCA, enthält Informationen
 über den orthogonalen Teil (output)
 CONORM: Real-Vektor der Länge NCA, enthält die Norm der
 Zeilen von A (output)

LQERR

Zweck	LQERR: IMSL-Routine zur Berechnung der orthogonalen Matrix aus dem output von LQRRR
Aufruf	CALL LQERR(NRQR,NCQR,QR,LDQR,QRAUX,Q,LDQ)
Argumente .	NRQR: Anzahl der Spalten von Matrix QR (input) NCQR: Anzahl der Zeilen von Matrix QR (input) QR: Real-Feld, enthält Informationen über die QR-Zerlegung; oberer, rechter Teil enthält die Dreiecksmatrix (input) LDQR: Zeilen-Dimensionierung von QR (input) QRAUX: Real-Vektor der Länge NCQR, enthält Informationen über den orthogonalen Teil (input)

Q: Real-Feld, enthält die orthogonale Matrix (output)
LDQ: Zeilen-Dimensionierung von Q (input)

2.2. Bestimmung der Erwartungswerte

LOKMAG

Zweck Berechnung der lokalen Magnetisierung nach Gl.(3.14)
Aufruf CALL LOKMAG(G1,G2,N,RL)
Argumente G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input)
 N: Anzahl der Gitterplätze (input)
 RL: Wert der lokalen Magnetisierung (output)

STRUKT

Zweck Berechnung magnetischer Strukturfaktoren nach Gl.(3.18)
Aufruf CALL STRUKT(G1,G2,N,S,Q)
Argumente G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input)
 N: Anzahl der Gitterplätze (input)
 S: Wert des magnetischen Strukturfaktors (output)
 Q: Phase des magnetischen Strukturfaktors (input)

SUSZEP

Zweck	Berechnung der q-abhängigen magnetischen Suszeptibilität nach (4.2)
Aufruf	CALL SUSZEP(LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,LF,NUP,CHI,Q)
Argumente	LB: Integer-Vektor (129), Ordnet den Matrizen P_k aus Gl.(6.1) einen Platz in der hierarchischen Struktur zu (input) LE: Integer-Vektor (385), LE(j) gibt an, ob die Matrix j in der hierarchischen Struktur besetzt ist (LE(j)=1) oder nicht (LE(j)=0). (input) G1,G2: Real-Felder (N×N), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input) IS: Integer-Feld (NT×N), Isingspin-Hilfsfeld (input) EK: Real-Feld (N×N), exponenzierte Hoppingmatrix (input) EKI: Real-Feld (N×N), Inverse von EK (input) E: Real-Vektor (3), Boltzmannfaktoren (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input) LF: Anzahl der möglichen Matrixmultiplikationen ohne Orthogonalisierung (input) NUP: Anzahl der Matrixblöcke ($NUP \leq 128$) (input) CHI: q-abh. magnetische Suszeptibilität (output) Q: Phase für die magnetische Suszeptibilität (input)
Routinen	QDRDEK: QDR-Zerlegung einer reellen Matrix MULSP: Multiplikationen zweier quadratischer Matrizen, eine voll besetzt, die andere streifendiagonal MULQDR: Multiplikation zweier QDR-zerlegter Matrizen, Ergebnis wieder QDR-zerlegt

MULP: Multiplikation zweier QDR-zerlegter Matrizen, Ergebnis nicht QDR-zerlegt

BPROP: Neuberechnung eines Blocks aus B-Matrizen nach (6.1), Neuorganisation der hierarchischen Struktur und Berechnung der Greensfunktionen

ENERG

Zweck	Berechnung inneren Energie nach Gl.(4.1)
Aufruf	CALL ENERG(G1,G2,HK,N,U,EN)
Argumente	G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input) HK: Real-Feld ($N \times N$), symmetrische Hopping-Matrix (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input) U: Größe der on-site Wechselwirkung der Elektronen (input) EN: Wert der inneren Energie (output)

ELDICHTE

Zweck	Berechnung der mittleren Elektronenzahl pro Gitterplatz für Spin up bzw. down nach Gl.(3.6)
Aufruf	CALL ELDICHTE(G1,G2,N,D1,D2)
Argumente	G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), Einteilchen-Greensfunktionen (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input) D1: Elektronendichte für Spin up (output) D2: Elektronendichte für Spin down (output)

LODICHTTE

Zweck	Berechnung der mittleren Zahl von Löchern pro Gitterplatz nach Gl.(7.6b), (7.7) und (3.6)
Aufruf	CALL LODICHTE(G1,G2,N,H)
Argumente	G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input) H: Lochdichte (output)

KORRN

Zweck	Berechnung der Dichte-Korrelation für Gitterplätze mit gegebenem Abstand nach Gl.(7.15)
Aufruf	CALL KORRN(G1,G2,N,C,LD)
Argumente	G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input) N: Anzahl der Gitterplätze (input) C: Dichte-Korrelation (output) LD: Abstand der Gitterplätze (input)

KORRSS

Zweck	Berechnung der Spin-Spin-Korrelation für Gitterplätze mit gegebenem Abstand nach Gl.(7.5) und (7.6a)
Aufruf	CALL KORRSS(G1,G2,N,C,LD)

Argumente	G1,G2: Real-Felder ($N \times N$), equal-time Einteilchen-Greensfunktionen (input)
	N: Anzahl der Gitterplätze (input)
	C: Spin-Spin-Korrelation (output)
	LD: Abstand der Gitterplätze (input)

Die Routinen für die weiteren Korrelationsfunktionen nach Gln.(7.5), (7.6) und (7.12) (**KORRNN**, **KORRDD**, **KORRHH** sowie **KORSC**) werden aufgerufen wie **KORRSS**.

3. Rechenzeiten

Die Berechnung der Greensfunktionen nach jedem Isingspin-Flip (siehe Gl. (2.34)) erfordert für jeden Gitterplatz N^2 Multiplikationen, d.h. die Rechenzeit wächst insgesamt kubisch mit N . Bei tiefen Temperaturen wird allerdings der größte Teil der Rechenzeit für die Orthogonalisierung der Matrizen verwendet, die ja ebenfalls ein N^3 -Prozeß ist. Bei Temperaturen unterhalb etwa $T = 0.25$ bringt die hierarchische Speicherstruktur einen Gewinn gegenüber dem einfachen Aufmultiplizieren. Dann geht die inverse Temperatur β über die Zahl der Trotter-Schritte L im wesentlichen linear in die Rechenzeit ein. Die Programmläufe wurden auf dem Computer **CRAY X-MP** des Forschungszentrums Jülich durchgeführt. Ein vollständiger MC-Sweep beansprucht hier z.B. für den Ring aus $N = 32$ Gitterplätzen bei $\beta = 16$, $m = 8$ und $\Delta\tau = \frac{1}{8}$ etwa 1.7, bei $\beta = 32$ etwa 3.5 Sekunden. Für $N = 100$ und $\beta = 16$ erhöht sich die Rechenzeit auf 25 Sekunden. Die Rechenzeit skaliert offensichtlich nicht mit N^3 , was an der unterschiedlich guten Vektorisierung liegt. Die Zahl der Operationen pro Sekunde beträgt bei $N = 32$ etwa 50 MFLOPS (*million floating-point operations*); bei $N = 100$ sind es dagegen gut 100 MFLOPS. Die zeitintensivsten Routinen im dem Programm - das

sind QR-Zerlegungen, Matrixmultiplikationen und die Berechnung der Greensfunktionen nach (2.34) - sind sehr gut vektorisierbar. Dennoch sind, wie man sieht, zur Bestimmung eines Meßpunktes (N, n, U, P und T fest) bei einigermaßen großen Systemen und tiefen Temperaturen Programmläufe von mehreren Stunden notwendig, wenn man eine gute Statistik verlangt (z.B. 1000 unabhängige Messungen).


```

      DIMENSION CHH(65)
      DIMENSION CSC(65)
      DIMENSION CN(65)
C
      LREC = 40*65*65
      OPEN(16,FILE='BAUM',ACCESS='DIRECT',RECL=LREC)
C
C
C *****
C *****      UNTERPROGRAMME :      *****
C *****
C *****      FUER DIE MC-PROZEDUR :      *****
C **
C **      HOPMA(HK,N,T2):      **
C ** BESETZUNG DER HOPPING-MATRIX HK      **
C ** QUADRATISCHES GITTER, BELIEBIGE RANDBEDINGUNGEN      **
C ** DEFAULT: PERIODISCHE RANDBEDINGUNGEN      **
C **
C **      EXPHK(HK,EK,EKI,N,DT,P):      **
C ** BERECHNET DIE EXPONENZIERTER HOPPING-MATRIX EK AUS HK IN      **
C ** ABHAENGIGKEIT VOM "ZEIT"-INTERVALL DT UND DEM CHEMISCHEN      **
C ** POTENTIAL P GEM. GLEICHUNG (2.14) SOWIE IHRER INVERSEN EKI.      **
C **
C **      INFELD(IS,NT,N,M):      **
C ** VERTEILT ZUFAELLIG DIE WERTE +1,-1 AUF DAS ISINGSPIN-HILSFELD.      **
C **
C **      SWEEP(LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,LF,M,SIG):      **
C ** ERZEUGT EINEN MC-SWEEP DURCHS ORTS- UND "ZEIT" - GITTER.      **
C **
C **      UPDATE(G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,L):      **
C ** EXAKTES UPDATING DER GREENSFUNKTIONEN NACH EINEM MC-SWEEP      **
C ** DURCHS ORTSGITTER (BEI UEBERGANG VOM "ZEIT"- SCHRITT L-1 ZU L).      **
C ** NACH GL. (2.36).      **
C **
C **      GITTER(G1,G2,IS,E,N,L,M,SIG):      **
C ** ERZEUGT EINEN MC-SWEEP DURCHS ORTSGITTER .      **
C **
C **      BINIT(LB,LE,G1,G2,IS,EK,E,N,LF,NUP)      **
C ** BERECHNUNG DER MATRIXPRODUKTE P(K) NACH GLEICHUNG (6.1) UND      **
C ** DERER PRODUKTE, ABSPEICHERN DER PRODUKTE IN HIERARCHISCHER      **
C ** FORM UND BERECHNUNG DER GREENSFUNKTIONEN G1 UND G2.      **
C **
C **      BPROP(LB,LE,G1,G2,IS,EK,E,N,LF,NUP,IB)      **
C ** BERECHNUNG DES MATRIXPRODUKTS P(IB), UMSTELLEN DER HIERARCHI-      **
C ** SCHEN STRUKTUR UND BERECHNUNG DER VON P(IB) ABHAENGIGEN      **
C ** PRODUKTE SOWIE DER GREENSFUNKTIONEN G1 UND G2.      **
C **
C **      BSHIFT(LB,LE,NUP,N)      **
C ** SHIFTEN DER HIERARCHISCHEN STRUKTUR NACH JEWEILS NUP/2 AUS-      **
C ** FUEHRUNGEN VON BPROP.      **
C **
C **      MULSP(A,LDA,B,LDB,C,LDC,N,NS)      **
C ** MULTIPLIKATION EINER VOLLBESETZTEN MATRIX MIT EINER STREIFEN-      **
C ** DIAGONALEN MATRIX      **
C **
C **      MULQDR(N,LDU,U,D,R,UR,DR,RR)      **
C ** MULTIPLIKATION ZWEIER QDR-ZERLEGTER MATRIZEN. ERGEBNIS IST      **
C ** WIEDER QDR-ZERLEGT : U,D,R      **
C **
C **      MULD(N,LDU,U,D,R,UR,DR,RR,P,LDP)      **
C ** MULTIPLIKATION ZWEIER QDR-ZERLEGTER MATRIZEN. ERGEBNIS IST      **
C ** NICHT QDR-ZERLEGT : P      **
C **
C **      QDRDEK(N,A,LDA,U,LDU,D,LDD,R,LDR)      **

```

```

C ** ZERLEGUNG EINER MATRIX A IN EINE ORTHOGONALE MATRIX U, EINE **
C ** DIAGONALE MATRIX A UND EINE NORMIERTE OBERE DREIECKSMATRIX R. **
C ****
C **
C **** FUEER DIE OBSERVABLEN : ****
C **
C ** LOKMAG(G1,G2,N,RL): **
C ** BERECHNET AUS G1 UND G2 DAS LOKALE MAGNETISCHE MOMENT RL **
C ** NACH GLEICHUNG (3.14). **
C **
C ** STRUKT(G1,G2,N,S,Q): **
C ** BERECHNET DEN MAGNETISCHEN STRUKTURFAKTOR S(QX,QY) NACH (3.18). **
C **
C ** SUSZEP(LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,LF,NUP,CHI,Q): **
C ** BERECHNET DIE (STAGGERED) SUSZEPTIBILITAET CHI(Q) NACH (4.2). **
C **
C ** ENERG(G1,G2,HK,N,U,EN): **
C ** BERECHNET DIE SUMME AUS KINETISCHER UND POTENTIELLER **
C ** ENERGIE NACH (4.1). **
C **
C ** ELDICHTE(G1,G2,N,D1,D2): **
C ** BERECHNET DIE DICHTEN DER ELEKTRONEN MIT SPIN UP (D1) BZW. **
C ** SPIN DOWN (D2) NACH (7.6A) UND (7.7). **
C **
C ** LODICHTE(G1,G2,N,D1,D2): **
C ** BERECHNET DIE DICHTEN DER LOECHER NACH (7.6D) UND (7.7). **
C **
C ** KORRN(G1,G2,N,C,LD): **
C ** BERECHNET DIE DICHTEN-DICHTE-KORRELATION FUEER GITTERPLAETZE IM **
C ** ABSTAND L NACH (7.5) UND (7.6B). **
C **
C ** KORRSS(G1,G2,N,C,LD): **
C ** BERECHNET DIE SPIN-SPIN-KORRELATION FUEER GITTERPLAETZE IM **
C ** ABSTAND L NACH (7.5) UND (7.6A). **
C **
C ** KORRNN(G1,G2,N,C,LD): **
C ** BERECHNET DIE DICHTEN-DICHTE-KORRELATION FUEER GITTERPLAETZE IM **
C ** ABSTAND L NACH (7.5) UND (7.6B). **
C **
C ** KORRDD(G1,G2,N,C,LD): **
C ** BERECHNET DIE DOPPELBESETZUNGS-KORRELATION FUEER GITTERPLAETZE **
C ** IM ABSTAND L NACH (7.5) UND (7.6C). **
C **
C ** KORRHH(G1,G2,N,C,LD): **
C ** BERECHNET DIE LOCH-LOCH-KORRELATION FUEER GITTERPLAETZE IM **
C ** ABSTAND L NACH (7.5) UND (7.6D). **
C **
C ** KORRSC(G1,G2,N,C,LD): **
C ** BERECHNET DIE COOPERPAAR-KORRELATION FUEER GITTERPLAETZE IM **
C ** ABSTAND L NACH (7.11). **
C ****
C
C
C
C **** LAUF-PARAMETER : ****
C **** N : ANZAHL DER GITTERPLAETZE ****
C **** NT : ZAHL DER "ZEIT"-SCHRITTE ****
C **** U : ABSTOSSUNGSPARAMETER ****
C **** P : CHEM. POTENTIAL DER ELEKTRONEN ****
C **** BETA: INVERSE TEMPERATUR ****
C **** MCST: ZAHL DER MONTE-CARLO SWEEPS ****
C **** ZUR THERMALISIERUNG ****

```

```

C ***** NMES:  ANZAHL DER MESSUNGEN *****
C ***** MCSZ:  ZAHL DER MONTE-CARLO SWEEPS *****
C *****      ZW. 2 OBSERVABLENBESTIMMUNGEN *****
C ***** (TOTALE ANZAHL MCSWEEPS: MCST + NMES * MCSZ) *****
C ***** LF :  ZAHL DER UPDATINGS ZWISCHEN ZWEI NEUBERECH- *****
C *****      NUNGEN DER GREENSFUNKTIONEN, *****
C *****      GLEICH ZAHL DER MATRIXMULTIPLIKATIONEN, DIE *****
C *****      OHNE QDR-ZERLEGUNG DURCHGEFUEHRT WERDEN *****
C ***** LMAX:  ABSTAND, BIS ZU DEM KORRELATIONSFUNKTIONEN *****
C *****      ZU BERECHNEN SIND (I.D.R. LMAX=N/2) *****
C ***** T2 :  PARAMETER FUER NEXT-NEAREST-NEIGHBOR HOPPING *****
C ***** ENERGIESKALA ; T  (BANDLUECKE) *****
C *****
C
C
C EINLESEN DER LAUFFPARAMETER
C   READ (4,*)  N,NT,U,P,BETA,MCST,NMES,MCSZ,LF,LMAX,T2
C
C   NUP  = NT/LF
C
C *****      OBSERVABLE      *****
C
C MITTELWERT DER LOKALEN MAGNETISIERUNG =
C   CSS0 = 0.
C
C MITTELWERT DES MAGNETISCHEN STRUKTURFAKTORS S(0)=
C   SM = 0.
C
C MITTELWERT DES MAGNETISCHEN STRUKTURFAKTORS S(PI/2)=
C   SM1 = 0.
C
C MITTELWERT DES MAGNETISCHEN STRUKTURFAKTORS S(PI)=
C   SM2 = 0.
C
C MITTELWERT DES ANTIFERROMAGNETISCHEN SUSZEPTIBILITAET X(PI)=
C   CHIM= 0.
C
C MITTELWERT DER INNEREN ENERGIE      =
C   ENM = 0.
C
C MITTELWERT DER ELEKTONENDICHTE FUER SPIN UP BZW. DOWN  =
C   RNM1 = 0.
C   RNM2 = 0.
C
C MITTELWERT DER GESAMTEN ELEKTONENDICHTE =
C   RNM = 0.
C
C MITTELWERT DER LOCHDICHTE  =
C   HM = 0.
C
C MITTELWERT DER DOPPELBESETZUNGSDICHTE  =
C   DM = 0.
C
C MITTELWERTE DER KORRELATIONSFUNKTIONEN  =
C   DO 1 L=1,LMAX
C     CSS(L) = 0.
C     CDD(L) = 0.
C     CNN(L) = 0.
C     CHH(L) = 0.
C     CSC(L) = 0.
C     CN(L)  = 0.
C   1 CONTINUE
C

```

```
C MITTELWERT DES VORZEICHENS DES DETERMINANTENPRODUKTES
  SIGM = 0.
C
C   U.S.W.
C
C
C *****
C
C
C GROESSE DER "ZEIT"-SCHRITTE =
  DT = BETA/DFLOAT(NT)
C
C PARAMETER DT*LAMBDA := FL  NACH GL.(2.7)
  X = .5*DT*U
  FL = DLOG(DEXP(X)+DSQRT(DEXP(2.*X)-1.))
C
C "BOLTZMANN" - FAKTOREN
  E(1) = DEXP(-FL)
  E(2) = 1.
  E(3) = DEXP( FL)
C
C
C INITIALISIERUNG DES ZUFALLSZAHLGENERATORS
C
C ENTWEDER:
C   ISEED = 3727493
C   CALL INR250(M,ISEED)
C
C ODER:
C   ISEED = 0
C   CALL RNST(ISEED,M,IER)
C
C EINGABE DER HOPPING-MATRIX HK
C
C   CALL HOPMA(HK,N,T2)
C
C BERECHNUNG DER EXP. HOPPING-MATRIX EK UND IHRER INVERSEN EKI
C
C   CALL EXPHK(HK,EK,EKI,N,DT,P)
C
C EINGABE DES ANFANGS-SPINFELDES
C
C   CALL INFIELD (IS,NT,N,M)
C
C INITIALISIERUNG DES MULTIPLIKATIONSBAUMS
C
C   CALL BINIT(LB,LE,G1,G2,IS,EK,E,N,LF,NUP)
C
C
C
C LOOP: ***** THERMALISIERUNG *****
C
C   DO 10 I=1,MGST
C   CALL SWEEP (LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,LF,M,SIG)
10  CONTINUE
C
C *****
C
C
C
C
C LOOP: ***** BESTIMMUNG DER OBSERVABLEN-MITTELWERTE *****
C
C   DO 20 I=1,NMES
```

```
C
C
C
C LOOP: ***** MC-SWEEPS ZUR ENTKOPPLUNG DER ZUSTAENDE *****
C
      DO 30 J=1,MCSZ-1
      CALL SWEEP (LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,LF,M,SIG)
30    CONTINUE
C
C AKTUELLER MITTELWERT DES VORZEICHENS
      SIG = 0.
C
      CALL SWEEP (LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,LF,M,SIG)
C
C NORMIERUNG VON SIG AUF EINEN ISINGSPIN-FLIP
      SIG = SIG/DFLOAT(N*NT)
      SIGM=SIGM+SIG
C
C *****
C
C
C BESTIMMUNG DER AKTUELLEN OBSERVABLEN-WERTE
C
      PI = DACOS(-1.D0)
C
      CALL LOKMAG(G1,G2,N,RL)
      CSS0 = CSS0+RL*SIG
C
      Q = 0.
      CALL STRUKT(G1,G2,N,S,Q)
      SM = SM+S*SIG
C
      Q = PI/2.
      CALL STRUKT(G1,G2,N,S,Q)
      SM1= SM1+S*SIG
C
      Q = PI
      CALL STRUKT(G1,G2,N,S,Q)
      SM2= SM2+S*SIG
C
      Q = PI
      CALL SUSZEP(LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,LF,NUP,CHI,Q)
      CHIM=CHIM+CHIG
C
      CALL ENERG(G1,G2,HK,N,U,EN)
      ENM = ENM+EN*SIG
C
      CALL ELDICHTE(G1,G2,N,RN1,RN2)
      RNM1 = RNM1+RN1*SIG
      RNM2 = RNM2+RN2*SIG
C
      CALL LODICHTE(G1,G2,N,H)
      HM = HM+H*SIG
C
      DO 2 L=1,LMAX
      CALL KORRSS (G1,G2,N,C,L)
      CSS(L) = CSS(L)+C*SIG
      CALL KORRDD (G1,G2,N,C,L)
      CDD(L) = CDD(L)+C*SIG
      CALL KORRNN (G1,G2,N,C,L)
      CNN(L) = CNN(L)+C*SIG
      CALL KORRHH (G1,G2,N,C,L)
      CHH(L) = CHH(L)+C*SIG
```

```

      CALL KORRSC (G1,G2,N,C,L)
      CSC(L) = CSC(L)+C*SIG
      CALL KORRN (G1,G2,N,C,L)
      CN(L) = CN(L)+C*SIG
2    CONTINUE
C
C      U.S.W.
C
C *****
C
20   CONTINUE
C
C  NORMIERUNG DER KORRELATIONSFUNKTIONEN
      RNM = (RNM1+RNM2)/SIGM
      HM  = HM/SIGM
      DM  = RNM+HM-1.
C
      DO 3 L=1,LMAX
      CSS(L) = CSS(L)/SIGM
      CDD(L) = CDD(L)/SIGM-DM*DM
      CNN(L) = CNN(L)/SIGM-RNM*RNM
      CHH(L) = CHH(L)/SIGM-HM*HM
      CSC(L) = CSC(L)/SIGM
      CN(L)  = CN(L)/SIGM
3    CONTINUE
C
C *****
C
C      AUSGABE DER DATEN
C
      WRITE(30,*) 'INPUT '
      WRITE(30,*) ' '
      WRITE(30,*) 'ANZAHL GITTERPLAETZE      N = ',N
      WRITE(30,*) 'INVERSE TEMPERATUR      BETA = ',BETA
      WRITE(30,*) 'ABSTOSSUNGSPARAMETER      U = ',U
      WRITE(30,*) 'CHEMISCHES POTENTIAL      P = ',P
      WRITE(30,*) '"ZEIT"-SCHRITT      DT = ',DT
      WRITE(30,*) 'SWEEPS ZUR THERMALISIERUNG : ',MCST
      WRITE(30,*) 'ZAHL DER MESSUNGEN      : ',NMES
      WRITE(30,*) 'SWEEPS ZW. 2 MESSUNGEN      : ',MCSZ
      WRITE(30,*) 'UPDATING-RATE      : ',LF
      WRITE(30,*) 'NEXT-NEAREST-NEIGHBOR-HOP. : ',T2
      WRITE(30,*) ' '
      WRITE(30,*) 'OUTPUT '
      WRITE(30,*) ' '
      WRITE(30,*) 'LOK. MAGNETISIERUNG      M = ',CSS0/SIGM
      WRITE(30,*) 'INNERE ENERGIE      E = ',ENM/SIGM
      WRITE(30,*) 'STRUKTURFAKTOR      S(0) = ',SM/SIGM
      WRITE(30,*) 'STRUKTURFAKTOR      S(PI/2)= ',SM1/SIGM
      WRITE(30,*) 'STRUKTURFAKTOR      S(PI) = ',SM2/SIGM
      WRITE(30,*) 'STAGGERED SUSZEPT. X(PI) = ',CHIM/SIGM
      WRITE(30,*) 'DICHT ELEC. SPIN UP      N1 = ',RNM1/SIGM
      WRITE(30,*) 'DICHT ELEC. SPIN DOWN    N2 = ',RNM2/SIGM
      WRITE(30,*) 'GESAMTE ELEKTRONENDICHTE N = ',RNM
      WRITE(30,*) 'DOPPELBESETZUNGSDICHTE D = ',DM
      WRITE(30,*) 'LOCHDICHTE      H = ',HM
      WRITE(30,*) 'MITTELWERT DES VORZEICHENS = ',SIGM/DFLOAT(NMES)
C
      WRITE(30,*) ' '
      WRITE(30,1001)
      DO 4 L=1,LMAX
      WRITE(30,1000) L,CSS(L),CNN(L),CDD(L),CHH(L),CSC(L)
4    CONTINUE

```



```

C      WRITE(30,*) ' '
      WRITE(30,1003)
      DO 7 L=1,LMAX
      WRITE(30,1002) L,CN(L)
7     CONTINUE
C
C      1000 FORMAT(1X,I2,5(' ',E12.6))
      1001 FORMAT(1X,'J',8X,'CSS',11X,'CNN',11X,'CDD',11X,'CHH',11X,'CSC')
      1002 FORMAT(1X,I2,' ',E12.6)
      1003 FORMAT(1X,'J',8X,'CN')
C
      WRITE(6,*) '***** PROGRAMM-ENDE *****'
C
C *****
      CLOSE(16)
C
      STOP
      END
C *****
C
C *****
C *****      HOPMA      (22.02.90)      *****
C *****      EINGABE DER SYMMETRISCHEN HOPPING-MATRIX      *****
C *****      HK(N,N).      *****
C *****      (DEFAULT: PERIOD. RANDBEDINGUNGEN)      *****
C *****      *****
C *****      ARGUMENTE      *****
C *****      N :ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM      *****
C *****      (INPUT)      *****
C *****      HK :HOPPING-MATRIX (NXN)      (OUTPUT)      *****
C *****      T2 :NEXT-NEAREST-NEIGHBOR HOPPING (INPUT)      *****
C *****
C
      SUBROUTINE HOPMA(HK,N,T2)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION HK(N,N)
C
      DO 10 I=1,N
      DO 10 J=1,N
      HK(I,J) = 0.0
10     CONTINUE
C
      DO 20 I=1,N
C
C      BESTIMMUNG DER HOPPING-NACHBARN J VOM GITTERPLATZ I
C      HIER: NAECHSTE- UND UEBERNAECHSTE-NACHBAR HOPPING
C
      J = I+1
      J2 = I+2
C
C      PERIODISCHE RANDBEDINGUNGEN
      IF (I.EQ.N) J = 1
      IF (I.EQ.N) J2 = 2
      IF (I.EQ.N-1) J2 = 1
C
C      OFFENE RANDBEDINGUNGEN
C      IF (I.EQ.N) J = I-1
C
      HK(I,J) = 1.
      HK(J,I) = 1.
      HK(I,J2) = T2

```

```

      HK(J2,I) = T2
C
C 20 CONTINUE
C
      RETURN
      END
C
C *****
C *****      EXPHK      (20.07.90)      *****
C ***** BESTIMMUNG DER EXPONENZIERTEN HOPPING-MATRIX *****
C ***** EK AUS DER HOPPING-MATRIX HK DURCH DIAGONA- *****
C ***** LISIERUNG, EXPONENZIERUNG DER EIGENWERTE UND *****
C ***** ANSCHLESSENDE RUECKTRANSFORMATION. *****
C ***** DIE DIAGONALISIERUNG GESCHIEHT MIT HILFE DER *****
C ***** EISPACK-ROUTINE RS. *****
C ***** ANSCHLIESSEND WIRD DIE MATRIX EK NACH (2.14) *****
C ***** MIT DEM FAKTOR EXP(-DT*P) MULTIPLIZIERT. *****
C *****
C ***** BENUTZTE ROUTINEN: *****
C *****
C ***** LINRG *****
C ***** IMSL-ROUTINE ZUR INVERSION EINER ALLGEMEINEN *****
C ***** REELEN MATRIX *****
C *****
C *****      ARGUMENTE *****
C ***** HK :HOPPING-MATRIX (INPUT) *****
C ***** EK :EXPONENTIERTER HOPPING-MATRIX (OUTPUT) *****
C ***** EKI:INVERSE VON EK (OUTPUT) *****
C ***** N :ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** DT :GROESSE DER TROTTER-SCHRITTE (INPUT) *****
C ***** P :CHEMISCHES POTENTIAL (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE EXPHK(HK,EK,EKI,N,DT,P)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION HK(N,N)
      DIMENSION EK(N,N) , EKI(N,N)
      DIMENSION EV(N,N) , EW(N) , WS1(65) , WS2(65)
C
C BESTIMMUNG DER EIGENWERTE EW UND DER EIGENVEKTORMATRIX EV
C
      CALL RS(N,N,HK,EW,1,EV,WS1,WS2,IERR)
C
C EXPONENZIERUNG DER DIAGONALELEMENTE
C
      DO 10 I=1,N
      EW(I) = DEXP(DT*EW(I))
      10 CONTINUE
C
C RUECKTRAFO DER EXP. EIGENWERTMATRIX: EK = EV*EXP(EW)*EV(TRANSPOSE)
C
      DO 20 J=1,N
      DO 30 I=1,N
      EK(I,J) = 0.0
      30 CONTINUE
      DO 20 K=1,N
      DO 20 I=1,N
      EK(I,J) = EK(I,J)+EV(I,K)*EV(J,K)*EW(K)
      20 CONTINUE
C
C ANTEIL DURCH DAS CHEMISCHE POTENTIAL (NACH GL. (2.2))
C

```

```

      DO 40 J=1,N
      DO 40 I=1,N
      EK(I,J) = EK(I,J)*DEXP(-DT*P)
40  CONTINUE
C
C BERECHNUNG DER INVERSEN VON EK
C
      CALL LINRG(N,EK,N,EKI,N)
C
      RETURN
      END
C
C *****
C *****      INFIELD      (02.01.90)      *****
C ***** ZUFAELLIGE VERTEILUNG DER WERTE +1 UND -1      *****
C ***** IN DAS FELD ISINGSPIN-HILFSFELD IS(NT,N).      *****
C *****      *****
C ***** DIE SUBROUTINE "R250(M,R,L)" ERZEUGT EINEN      *****
C ***** VEKTOR R DER LAENGE L AUS PSEUDO-ZUFALLS-      *****
C ***** ZAHLEN ZW. 0 UND 1 NACH DEM ALGORITHMUS VON      *****
C ***** VON KIRCKPATRICK-STOLL.      *****
C *****      *****
C *****      ARGUMENTE      *****
C ***** IS: ISING-SPINFELD, WERTE +1 U. -1 FUER JEDEN      *****
C ***** ORTS- UND ZEITGITTERPUNKT      (OUTPUT)      *****
C ***** NT: ZAHL DER TROTTER-SCHRITTE      (INPUT)      *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM      *****
C *****      (INPUT)      *****
C ***** M : STARTFELD FUER DEN ZUFALLSGENERATOR      *****
C *****      (INPUT/OUTPUT)      *****
C *****
C
      SUBROUTINE INFIELD(IS,NT,N,M)
      DIMENSION IS(1025,65), RND(100000)
      DIMENSION M(250)
C
      CALL R250(M,RND,NT*N)
C
      DO 10 I=1,NT
      DO 10 J=1,N
      IS(I,J)=1
      IF (RND(I+N*(J-1)).LT.0.5) IS(I,J)=-1
10  CONTINUE
C
      RETURN
      END
C
C *****
C *****      SWEEP      (23.05.90)      *****
C ***** EIN MONTE-CARLO-SWEEP DURCHS "ZEIT"- UND      *****
C ***** ORTSGITTER      *****
C *****      *****
C ***** BENUTZTE ROUTINEN:      *****
C *****      *****
C ***** UPDATE :      *****
C ***** EXAKTES UPDATING DER GREENSFUNKTIONEN BEI      *****
C ***** UEBERGANG VON TROTTERSCHRITT L ZU L+1 (2.36)      *****
C *****      *****
C ***** GITTER:      *****
C ***** EIN SWEEP DURCHS ORTSGITTER MIT ANPASSUNG      *****
C ***** DER GREENSFUNKTIONEN NACH (2.20)      *****
C *****      *****
C ***** BPROP:      *****

```

```

C ***** BERECHNUNG DES BETREFFENDEN MATRIXPRODUKTS P *****
C ***** NACH (6.1) UND DER GREENSFUNKTIONEN *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** LB: ZEIGER FUER DIE PRODUKTE P(K) AUS (6.1) *****
C ***** (INPUT/OUTPUT) *****
C ***** LE: LE(J) GIBT AN, OB DIE MATRIX J IN DER *****
C ***** HIERARCH. STRUKTUR BESETZT IST (1) ODER *****
C ***** NICHT (0). (INPUT/OUTPUT) *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER *****
C ***** ELEKTRONEN MIT SPIN UP (DOWN) *****
C ***** (INPUT/OUTPUT) *****
C ***** IS: ISING-SPINFELD, WERTE +1 U. -1 FUER *****
C ***** JEDEN ORTS- UND ZEITGITTERPUNKT *****
C ***** (INPUT/OUTPUT) *****
C ***** EK: EPONENZIIERTE HOPPING-MATRIX (INPUT) *****
C ***** EKI: INVERSE VON EK (INPUT) *****
C ***** E : BOLTSMANNFAKTOREN (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** NT: ZAHL DER TROTTER-SCHRITTE (INPUT) *****
C ***** LF :UPDATING-RATE (LF =1 : KEIN UPDATING *****
C ***** NUR NEUBERECHNUNGEN DER GREENSFUNKTION *****
C ***** MIT "NEUBER") (INPUT) *****
C ***** M : STARTFELD FUER DEN ZUFALLSGENERATOR *****
C ***** (INPUT/OUTPUT) *****
C ***** SIG: MITTLERES VORZEICHEN DER FERMIONEN- *****
C ***** DETERMINANTE (OUTPUT) *****
C *****
C
C SUBROUTINE SWEEP (LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,LF,M,SIG)
C IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C DIMENSION IS(1025,65) , M(250)
C DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N) , EK(N,N) , EKI(N,N)
C DIMENSION E(3)
C DIMENSION B1(65,65) , B2(65,65)
C DIMENSION LB(129) , LE(385)
C
C NUP = NT/LF
C IF ((NUP*LF).NE.NT) THEN
C WRITE(30,*) 'PARAMETERFEHLER IM UNTERPROGRAMM SWEEP'
C STOP
C ENDIF
C
C LOOP : "ZEIT"-SCHRITTE
C
C DO 10 IB=1,NUP
C
C DO 20 IU=1,LF
C L = (IB-1)*LF+IU
C
C ANPASSUNG DER GREENSFKT.
C CALL UPDATE (G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,L-1)
C
C EIN SWEEP DURCHS ORTSGITTER
C CALL GITTER (G1,G2,IS,E,N,L,M,SIG)
C
C 20 CONTINUE
C
C UMSTELLEN DER BAUMSTRUKTUR, NEUBERECHNUNG VON G
C CALL BPROP (LB,LE,G1,G2,IS,EK,E,N,LF,NUP,IB)
C
C 10 CONTINUE

```

```

C
      RETURN
      END
C
C
C *****
C *****      UPDATE      (17.01.90)      *****
C ***** ANPASSUNG DER GREENSFUNKTIONEN G1 UND G2 BEI *****
C ***** BEI UEBERGANG VOM "ZEIT"-SCHRITT L NACH L+1 *****
C ***** NACH GL.(2.36). *****
C ***** *****
C ***** BENUTZTE ROUTINEN: *****
C ***** *****
C ***** MULSP: *****
C ***** MULTIPLIKATION EINER VOLLBESETZTEN MATRIX *****
C ***** MIT EINER STREIFENDIAGONALEN MATRIX VON *****
C ***** LINKS ODER RECHTS *****
C ***** *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER *****
C ***** ELEKTRONEN MIT SPIN UP (DOWN) *****
C ***** (INPUT/OUTPUT) *****
C ***** IS: ISING-SPINFELD, WERTE +1 U. -1 FUER *****
C ***** JEDEN ORTS- UND ZEITGITTERPUNKT *****
C ***** (INPUT/OUTPUT) *****
C ***** EK: EPONENZIERTER HOPPING-MATRIX (INPUT) *****
C ***** EKI: INVERSE VON EK (INPUT) *****
C ***** E : BOLTSMANNFAKTOREN (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** NT: ZAHL DER TROTTER-SCHRITTE (INPUT) *****
C ***** L : NUMMER DES TROTTER-SCHRITTS, FUER DEN *****
C ***** TROTTER-SCHRITT L+1 SIND DIE GREENS- *****
C ***** FUNKTIONEN ZU BESTIMMEN (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE UPDATE (G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,NT,L)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION IS(1025,65)
      DIMENSION E(3)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N) , EK(N,N) , EKI(N,N)
      DIMENSION A1(65,65) , A2(65,65)
      DIMENSION B1(65,65) , B2(65,65)
      DIMENSION C1(65,65) , C2(65,65)
C
      LDA = 65
      LS=L+1
      IF (LS.GT.NT) LS=LS-NT
C
C
C B := B(L+1) , C := B(L+1)**(-1)
C
      DO 10 I=1,N
      E1 = E(2+IS(LS,I))
      E2 = E(2-IS(LS,I))
      F1 = 1./E(2+IS(LS,I))
      F2 = 1./E(2-IS(LS,I))
      DO 10 J=1,N
      B1(I,J)=E1*EK(I,J)
      B2(I,J)=E2*EK(I,J)
      C1(J,I)=F1*EKI(J,I)
      C2(J,I)=F2*EKI(J,I)
10  CONTINUE

```

```

C
C A := B*G(L)      = B(L+1)*G(L)
C
      CALL MULSP(B1,LDA,G1,N,A1,LDA,N,0)
      CALL MULSP(B2,LDA,G2,N,A2,LDA,N,0)
C
C G(L+1) := A*C    = B(L+1)*G(L)*B(L+1)**(-1)
C
      CALL MULSP(A1,LDA,C1,LDA,G1,N,N,1)
      CALL MULSP(A2,LDA,C2,LDA,G2,N,N,1)
C
      RETURN
      END
C
C
C *****
C *****  GITTER      (08.01.90) *****
C *****  EIN MC-SWEEP DURCH DAS ORTSGITTER *****
C *****  ANPASSUNG DER GREENSFUNKTION NACH (2.20) *****
C *****
C *****  BENUTZTE ROUTINEN: *****
C *****
C *****  R250: *****
C *****  ERZEUGT EINEN VEKTOR AUS PSEUDO-ZUFALLS- *****
C *****  ZAHLEN ZW. 0 UND 1 NACH DEM ALGORITHMUS VON *****
C *****  KIRCKPATRICK-STOLL. *****
C *****
C *****  ARGUMENTE *****
C *****  G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER *****
C *****  ELEKTRONEN MIT SPIN UP (DOWN) *****
C *****  (INPUT/OUTPUT) *****
C *****  IS: ISING-SPINFELD, WERTE +1 U. -1 FUER *****
C *****  JEDEN ORTS- UND ZEITGITTERPUNKT *****
C *****  (INPUT/OUTPUT) *****
C *****  E : BOLTSMANNFAKTOREN (INPUT) *****
C *****  N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C *****  (INPUT) *****
C *****  L : TROTTER-SCHRITT (INPUT) *****
C *****  M : STARTFELD FUER DEN ZUFALLSGENERATOR *****
C *****  (INPUT/OUTPUT) *****
C *****  SIG: MITTLERES VORZEICHEN DER FERMIONEN- *****
C *****  DETERMINANTE (OUTPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE GITTER (G1,G2,IS,E,N,L,M,SIG)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION IS(1025,65)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
      DIMENSION E(3) , F(3)
      DIMENSION CL1(65) , CR1(65)
      DIMENSION CL2(65) , CR2(65)
      REAL RND(1025)
      DIMENSION M(250)
C
      F(1) = E(1)*E(1) - 1.
      F(3) = E(3)*E(3) - 1.
C
C ZUFALLSZAHLEN
      CALL R250(M,RND,2*N)
C
      DO 10 I=1,N
C
C EIN MC-STEP

```

```

C
  JN = RND(I)*N+1
  IN = IS(L,JN)
  R1 = (1.-G1(JN,JN))*F(2-IN) + 1.
  R2 = (1.-G2(JN,JN))*F(2+IN) + 1.
  PS = R1*R2
  SIG= SIG+SIGN(1.,PS)
  PS = ABS(PS)
  PS = PS/(1+PS)
  PV = RND(I+N)
  IF (PS.GT.PV) THEN
C
C ***** FLIP AKZEPTIERT *****
  IS(L,JN) = -IN
C
C CL(J) := G(J,JN) , CR(J) := G(JN,J) - DELTA(JN,J)
C
  DO 30 J=1,N
    CL1(J) = G1(J,JN)
    CL2(J) = G2(J,JN)
    CR1(J) = G1(JN,J)
    CR2(J) = G2(JN,J)
  30 CONTINUE
    CR1(JN) = CR1(JN) - 1.
    CR2(JN) = CR2(JN) - 1.
C
C ANPASSUNG DER GREENSFUNKTIONEN G1 UND G2 NACH GL.(2.20)
  FK1 = F(2-IN)/R1
  FK2 = F(2+IN)/R2
C
  DO 20 K=1,N
    DO 20 J=1,N
      G1(J,K) = G1(J,K)+FK1*CL1(J)*CR1(K)
      G2(J,K) = G2(J,K)+FK2*CL2(J)*CR2(K)
  20 CONTINUE
C *****
  ENDIF
C
  10 CONTINUE
  RETURN
  END
C
C
C *****
C ***** BINIT (01.06.90) *****
C ***** INITIALISIERUNG DER HIERARCHISCHEN STRUKTUR *****
C ***** AUS PRODUKTEN VON B-MATRIZEN NACH GL.(6.1) *****
C ***** UND BERECHNUNG DER GREENSFUNKTIONEN G1 UND G2. *****
C *****
C ***** BENUTZTE ROUTINEN: *****
C *****
C ***** QDRDEK(N,A,LDA,U,LDU,D,LDD,R,LDR) BESTIMMT DIE *****
C ***** QDR-ZERLEGUNG EINER MATRIX A IN U*D*R. *****
C *****
C ***** LINRT (N,R,LDR,2,RINV,LRINV) BERECHNET DIE *****
C ***** INVERSE RINV EINER OBEREN DREIECKSMATRIX R. *****
C ***** (IMSL-ROUTINE) *****
C *****
C ***** MULSP (A,LDA,B,LDB,C,LDC,N,NV,NS) *****
C ***** MULTIPLIZIERT EINE DUENN BESETZTE MIT EINER *****
C ***** VOLL BESETZTEN MATRIX. *****
C *****
C ***** MULQDR(N,LDA,U,D,R,UR,DR,RR) *****

```

```

C ***** MULTIPLIZIERT ZWEI QDR-ZERLEGTE MATRIX MIT- *****
C ***** EINANDER, ERGEBNIS U,D,R WIEDER QDR-ZERLEGT. *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** LB: ZEIGER FUR DIE B-MATRIXPRODUKTE (IN/OUTPUT) *****
C ***** LE: LE(K) GIBT AN, OB P1(.,.,K) UND P2(.,.,K) *****
C ***** BESETZT SIND (1) ODER NICHT (0) (IN/OUTPUT) *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (IN/OUTPUT) *****
C ***** IS : ISING-SPINFELD, WERTE +1 U. -1 FUER JEDEN *****
C ***** ORTS- UND ZEITGITTERPUNKT (IN/OUTPUT) *****
C ***** EK : EPONENZIERTER HOPPING-MATRIX (INPUT) *****
C ***** E : BOLTSMANNFAKTOREN (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM (INPUT) *****
C ***** LF : ZAHL DER UPDATINGS NACH GL(2.22) (INPUT) *****
C ***** NUP: ZAHL DER B-MATRIX-BLOECKE (NT/LF) (INPUT) *****
C ***** NV : NAECHSTE-NACHBER MATRIX (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE BINIT(LB,LE,G1,G2,IS,EK,E,N,LF,NUP)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION LB(129) , LE(385)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N) , EK(N,N) , E(3)
      DIMENSION IS(1025,65)
      DIMENSION A1(65,65) , A2(65,65)
      DIMENSION B1(65,65) , B2(65,65)
      DIMENSION BL1(65,65), BL2(65,65)
      DIMENSION U1(65,65) , D1(65) , R1(65,65)
      DIMENSION U2(65,65) , D2(65) , R2(65,65)
      DIMENSION UR1(65,65), DR1(65), RR1(65,65)
      DIMENSION UR2(65,65), DR2(65), RR2(65,65)

C
      LDA = 65
C
C ANZAHL VON EBENEN = 2*LOG(NUP)
      NEBEN = ANINT(LOG(FLOAT(NUP))/LOG(2.))
      IF (2**NEBEN.NE.NUP) THEN
        WRITE(30,*) 'PARAMETERFEHLER NEBEN IM UNTERPROGRAMM BINIT'
        STOP
      ENDIF
C
C ----- LOOP UEBER DIE ERSTE EBENE -----
      DO 10 IB=1,NUP
C
C ***** BERECHNUNG DES BLOCKS B(IB) *****
C L = (IB-1)*LF+1,.....,IB*LF
C
      L1 = (IB-1)*LF+1
C
C B := B(L1)
      DO 30 I=1,N
        E1 = E(2+IS(L1,I))
        E2 = E(2-IS(L1,I))
        DO 30 J=1,N
          B1(I,J) = E1*EK(I,J)
          B2(I,J) = E2*EK(I,J)
        30 CONTINUE
C
      DO 20 IL=1,LF-1
        L = L1+IL
C
C BL := B(L)
      DO 40 I=1,N

```



```

      E1 = E(2+IS(L,I))
      E2 = E(2-IS(L,I))
      DO 40 J=1,N
      BL1(I,J) = E1*EK(I,J)
      BL2(I,J) = E2*EK(I,J)
40    CONTINUE
C
C A := BL*B
      CALL MULSP(BL1,LDA,B1,LDA,A1,LDA,N,0)
      CALL MULSP(BL2,LDA,B2,LDA,A2,LDA,N,0)
C
C B := A
      DO 50 J=1,N
      DO 50 I=1,N
      B1(I,J) = A1(I,J)
      B2(I,J) = A2(I,J)
50    CONTINUE
C
20    CONTINUE
C ***** ENDE BERECHNUNG VON B(IB) *****
C
C NUMMER DER MATRIX IM BAUM
      K = 2*IB-1
      LE(K) = 1
      LB(IB)= K
C
C QDR- ZERLEGUNG VON B
      CALL QDRDEK(N,B1,LDA,U1,LDA,D1,LDA,R1,LDA)
      CALL QDRDEK(N,B2,LDA,U2,LDA,D2,LDA,R2,LDA)
C
C P(K) := U,D,R
      WRITE(16,REC=K) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
10    CONTINUE
C
C DIE WEITEREN MATRIZEN DER ERSTEN EBENE WERDEN ZU 1 GESETZT.
      DO 70 IP=NUP+1,3*NUP/2
      K = 2*IP-1
      LE(K) = 0
70    CONTINUE
C
C ----- ENDE LOOP UEBER DIE ERSTE EBENE -----
C
C ----- LOOP UEBER DIE WEITEREN EBENEN -----
      DO 80 IE=2,NEBEN
C
C ABSTAND ZW. VORLAEUFER- UND NACHFOLGER-MATRIX
      NAB = 2**(IE-2)
C
C GESAMTZAHL DER MATRIZEN IN DER EBENE IE
      NMAT= (3*NUP)/(4*NAB)
C
C ZAHL DER BESETZTEN MATRIZEN IN DER EBENE IE
      LGR = NUP/(2*NAB)
C
C LOOP UEBER DIE MATRIZEN EINER EBENE
      DO 90 L=1,NMAT
C
C NUMMER DER MATRIX UND DER VORLAEUFER-MATRIZEN
      K = 2*NAB*(2*L-1)
      KL = K+NAB
      KR = K-NAB
C

```

```

      IF (L.LE.LGR) THEN
        LE(K) = 1
      C
      C ----- P(K) := P(KL)*P(KR) -----
      C -      U,D,R := P(KL) ; UR,DR,RR := P(KR)
        READ(16,REC=KL) U1,D1,R1,U2,D2,R2
        READ(16,REC=KR) UR1,DR1,RR1,UR2,DR2,RR2
      C
      C -      UDR := UDR*(UR*DR*RR)
        CALL MULQDR(N,LDA,U1,D1,R1,UR1,DR1,RR1)
        CALL MULQDR(N,LDA,U2,D2,R2,UR2,DR2,RR2)
      C
      C -      P(K) := U,D,R
        WRITE(16,REC=K) U1,D1,R1,U2,D2,R2
      C
      ELSE
        LE(K) = 0
      ENDIF
      C
      90 CONTINUE
      C
      80 CONTINUE
      C ----- ENDE LOOP UEBER DIE EBENEN -----
      C
      C ***** BERECHNUNG DER GREENSFUNKTION *****
        K1 = NUP/2
        K2 = 3*K1
      C
      C ----- UDR := P(K2)*P(K1) -----
      C
      C -      U,D,R := P(K2) ; UR,DR,RR := P(K1)
        READ(16,REC=K2) U1,D1,R1,U2,D2,R2
        READ(16,REC=K1) UR1,DR1,RR1,UR2,DR2,RR2
      C
      C -      UDR := UDR*(UR*DR*RR)
        CALL MULQDR(N,LDA,U1,D1,R1,UR1,DR1,RR1)
        CALL MULQDR(N,LDA,U2,D2,R2,UR2,DR2,RR2)
      C
      C ----- G := (1+UDR)**(-1) -----
      C
      C RR := R**(-1)
        CALL LINRT(N,R1,LDA,2,RR1,LDA)
        CALL LINRT(N,R2,LDA,2,RR2,LDA)
      C
      C B := U(TR)*RR+D      (RR OBERE DREIECKSMATRIX !)
        DO 200 J=1,N
          DO 210 I=1,N
            B1(I,J) = 0.
            B2(I,J) = 0.
          210 CONTINUE
            B1(J,J) = D1(J)
            B2(J,J) = D2(J)
            DO 200 K=1,J
              DO 200 I=1,N
                B1(I,J) = B1(I,J)+U1(K,I)*RR1(K,J)
                B2(I,J) = B2(I,J)+U2(K,I)*RR2(K,J)
            200 CONTINUE
          C
          C QDR- ZELEGUNG VON B = UR*DR*RR
            CALL QDRDEK(N,B1,LDA,UR1,LDA,DR1,LDA,RR1,LDA)
            CALL QDRDEK(N,B2,LDA,UR2,LDA,DR2,LDA,RR2,LDA)
          C
          C A := U*UR

```

```

      DO 220 J=1,N
      DO 230 I=1,N
      A1(I,J) = 0.
      A2(I,J) = 0.
230  CONTINUE
      DO 220 K=1,N
      DO 220 I=1,N
      A1(I,J) = A1(I,J)+U1(I,K)*UR1(K,J)
      A2(I,J) = A2(I,J)+U2(I,K)*UR2(K,J)
220  CONTINUE
C
C B := RR*R      (OBERE DREIECKSMATRIZEN !)
      DO 240 J=1,N
      DO 250 I=1,N
      B1(I,J) = 0.
      B2(I,J) = 0.
250  CONTINUE
      DO 240 K=1,J
      DO 240 I=1,K
      B1(I,J) = B1(I,J)+RR1(I,K)*R1(K,J)
      B2(I,J) = B2(I,J)+RR2(I,K)*R2(K,J)
240  CONTINUE
C
C R := B**(-1)
      CALL LINRT(N,B1,LDA,2,R1,LDA)
      CALL LINRT(N,B2,LDA,2,R2,LDA)
C
C B := R*DR**(-1) (OBERE DREIECKSMATRIX !)
      DO 260 J=1,N
      RD1 = 1./DR1(J)
      RD2 = 1./DR2(J)
      DO 260 I=1,J
      B1(I,J) = R1(I,J)*RD1
      B2(I,J) = R2(I,J)*RD2
260  CONTINUE
C
C G := B*A(TR)   (B OBERE DREIECKSMATRIX !)
      DO 270 J=1,N
      DO 280 I=1,N
      G1(I,J) = 0.
      G2(I,J) = 0.
280  CONTINUE
      DO 270 K=1,N
      DO 270 I=1,K
      G1(I,J) = G1(I,J)+B1(I,K)*A1(J,K)
      G2(I,J) = G2(I,J)+B2(I,K)*A2(J,K)
270  CONTINUE
C
C ***** ENDE DER BERECHNUNG VON G *****
C
      RETURN
      END
C
C
C *****
C ***** BPROP      (01.06.90) *****
C ***** NEUBERECHNUNG EINES BLOCKS AUS B-MATRIZEN, *****
C ***** NEUORGANISATION DES BAUMS UND BESTIMMUNG *****
C ***** DER GREENSFUNKTIONEN. *****
C ***** *****
C ***** BENUTZTE ROUTINEN: *****
C ***** *****
C ***** QDRDEK(N,A,LDA,U,LDU,D,LDD,R,LDR) BESTIMMT DIE *****

```

```

C ***** QDR-ZERLEGUNG EINER MATRIX A IN U*D*R. *****
C *****
C ***** LINRT (N,R,LDR,2,RINV,LDRINV) BERECHNET DIE *****
C ***** INVERSE RINV EINER OBEREN DREIECKSMATRIX R. *****
C ***** (IMSL-ROUTINE) *****
C *****
C ***** MULSP (A,LDA,B,LDB,C,LDC,N,NV,NS) *****
C ***** MULTIPLIZIERT EINE DUENN BESETZTE MIT EINER *****
C ***** VOLL BESETZTEN MATRIX. *****
C *****
C ***** MULQDR(N,LDA,U,D,R,UR,DR,RR) *****
C ***** MULTIPLIZIERT ZWEI QDR-ZERLEGTE MATRIX MIT- *****
C ***** EINANDER, ERGEBNIS U,D,R WIEDER QDR-ZERLEGT. *****
C *****
C ***** BSHIFT(P1,P2,LB,LE,NUP,N) *****
C ***** SHIFTEN DER HIERARCHISCHEN STRUKTUR NACH JE *****
C ***** NUP/2 AUSFUEHRUNGEN VON BPROP. *****
C *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** LB: ZEIGER FUR DIE B-MATRIXPRODUKTE (IN/OUTPUT) *****
C ***** LE: LE(K) GIBT AN, OB P1(.,.,K) UND P2(.,.,K) *****
C ***** BESETZT SIND (1) ODER NICHT (0) (IN/OUTPUT) *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (IN/OUTPUT) *****
C ***** IS : ISING-SPINFELD, WERTE +1 U. -1 FUER JEDEN *****
C ***** ORTS- UND ZEITGITTERPUNKT (IN/OUTPUT) *****
C ***** EK : EPONENZIERTER HOPPING-MATRIX (INPUT) *****
C ***** E : BOLTSMANNFAKTOREN (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM (INPUT) *****
C ***** LF : ZAHL DER UPDATINGS NACH GL(2.22) (INPUT) *****
C ***** NUP: ZAHL DER B-MATRIX-BLOECKE (NT/LF) (INPUT) *****
C ***** IB : NUMMER DES ZU BERECHNENDEN BLOCKS (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE BPROP (LB,LE,G1,G2,IS,EK,E,N,LF,NUP,IB)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION IS(1025,65)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N) , EK(N,N)
      DIMENSION A1(65,65) , A2(65,65) , E(3)
      DIMENSION B1(65,65) , B2(65,65)
      DIMENSION BL1(65,65) , BL2(65,65)
      DIMENSION U1(65,65) , D1(65) , R1(65,65)
      DIMENSION U2(65,65) , D2(65) , R2(65,65)
      DIMENSION UR1(65,65), DR1(65), RR1(65,65)
      DIMENSION UR2(65,65), DR2(65), RR2(65,65)
      DIMENSION LB(129) , LE(385)

C
      LDA = 65
C ANZAHL VON EBENEN = 2LOG(NUP)
      NEBEN = ANINT(LOG(FLOAT(NUP))/LOG(2.))
      IF (2**NEBEN.NE.NUP) THEN
        WRITE(30,*) 'PARAMETERFEHLER IM UNTERPROGRAMM BPROP'
        STOP
      ENDIF

C
C ***** BERECHNUNG DES BLOCKS B(IB) *****
C L = (IB-1)*LF+1,.....,IB*LF
C
      L1 = (IB-1)*LF+1
C
C B := B(L1)
      DO 20 I=1,N

```

```

      E1 = E(2+IS(L1,I))
      E2 = E(2-IS(L1,I))
      DO 20 J=1,N
      B1(I,J) = E1*EK(I,J)
      B2(I,J) = E2*EK(I,J)
20   CONTINUE
C
      DO 10 IL=1,LF-1
      L = L1+IL
C
C BL := B(L)
      DO 30 I=1,N
      E1 = E(2+IS(L,I))
      E2 = E(2-IS(L,I))
      DO 30 J=1,N
      BL1(I,J) = E1*EK(I,J)
      BL2(I,J) = E2*EK(I,J)
30   CONTINUE
C
C A := BL*B
      CALL MULSP(BL1,LDA,B1,LDA,A1,LDA,N,0)
      CALL MULSP(BL2,LDA,B2,LDA,A2,LDA,N,0)
C
C B := A
      DO 40 J=1,N
      DO 40 I=1,N
      B1(I,J) = A1(I,J)
      B2(I,J) = A2(I,J)
40   CONTINUE
C
10   CONTINUE
C ***** ENDE BERECHNUNG VON B(IB) *****
C
C ***** UMORGANISATION DES BAUMS *****
C
C SHIFT VON B(IB) UM NUP PLAETZE NACH LINKS
C
      KR = LB(IB)
      LE(KR) = 0
      LB(IB) = LB(IB)+NUP*2
      KL = LB(IB)
      LE(KL) = 1
C
C QDR- ZERLEGUNG VON B
      CALL QDRDEK(N,B1,LDA,U1,LDA,D1,LDA,R1,LDA)
      CALL QDRDEK(N,B2,LDA,U2,LDA,D2,LDA,R2,LDA)
C
C P(KL) := U,D,R
      WRITE(16,REC=KL) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
C PROPAGATION DER AENDERUNG DURCH DEN BAUM
C
C LOOP DURCH DIE EBENEN
      DO 50 IE=2,NEBEN
C
C ABSTAND ZWISCHEN VORRAUSGEHENDEM UND NACHFOLGENDEM BLOCK
      NAB = 2**(IE-2)
C
      KR = KR+NAB
      KL = KL+NAB
      IF (MOD(KR,4*NAB).EQ.0) KR=KR-2*NAB
      IF (MOD(KL,4*NAB).EQ.0) KL=KL-2*NAB
      KRR= KR-NAB

```

```

      KRL= KR+NAB
      KLR= KL-NAB
      KLL= KL+NAB
C
      IF (LE(KRL).EQ.1) THEN
        LE(KR) = 1
        IF (LE(KRR).EQ.1) THEN
C ----- P(KR) := P(KRL)*P(KRR) -----
C -      U,D,R := P(KRL) ; UR,DR,RR := P(KRR)
          READ(16,REC=KRL) U1,D1,R1,U2,D2,R2
          READ(16,REC=KRR) UR1,DR1,RR1,UR2,DR2,RR2
C
C -      UDR := UDR*(UR*DR*RR)
          CALL MULQDR(N,LDA,U1,D1,R1,UR1,DR1,RR1)
          CALL MULQDR(N,LDA,U2,D2,R2,UR2,DR2,RR2)
C
C -      P(KR) := U,D,R
          WRITE(16,REC=KR) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
          ELSE
C ----- P(KR) := P(KRL) -----
          READ(16,REC=KRL) U1,D1,R1,U2,D2,R2
          WRITE(16,REC=KR) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
          ENDIF
        ELSE
          IF (LE(KRR).EQ.1) THEN
            LE(KR) = 1
C ----- P(KR) := P(KRR) -----
            READ(16,REC=KRR) U1,D1,R1,U2,D2,R2
            WRITE(16,REC=KR) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
          ELSE
C ----- P(KR) := 1 -----
            LE(KR) = 0
          ENDIF
        ENDIF
C
      IF (LE(KLL).EQ.1) THEN
        LE(KL) = 1
        IF (LE(KLR).EQ.1) THEN
C ----- P(KL) := P(KLL)*P(KLR) -----
C -      U,D,R := P(KLL) ; UR,DR,RR := P(KLR)
          READ(16,REC=KLL) U1,D1,R1,U2,D2,R2
          READ(16,REC=KLR) UR1,DR1,RR1,UR2,DR2,RR2
C
C -      UDR := UDR*(UR*DR*RR)
          CALL MULQDR(N,LDA,U1,D1,R1,UR1,DR1,RR1)
          CALL MULQDR(N,LDA,U2,D2,R2,UR2,DR2,RR2)
C
C -      P(KL) := U,D,R
          WRITE(16,REC=KL) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
          ELSE
C ----- P(KL) := P(KLL) -----
          READ(16,REC=KLL) U1,D1,R1,U2,D2,R2
          WRITE(16,REC=KL) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
          ENDIF
        ELSE
          IF (LE(KLR).EQ.1) THEN
            LE(KL) = 1
C ----- P(KL) := P(KLR) -----

```

```

      READ(16,REC=KLR) U1,D1,R1,U2,D2,R2
      WRITE(16,REC=KL) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
      ELSE
C ----- P(KL) := 1 -----
      LE(KL) = 0
      ENDIF
    ENDIF
C
    50 CONTINUE
C ***** ENDE DER UMORGANISATION *****
C
C ***** BESTIMMUNG DER GREENSFKT. *****
      K1 = NUP/2
      K2 = 3*K1
      K3 = 5*K1
C
      IF (LE(K3).EQ.1) THEN
C ----- U,D,R := P(K3)*P(K2) -----
C -      U,D,R := P(K3) ; UR,DR,RR := P(K2)
      READ(16,REC=K3) U1,D1,R1,U2,D2,R2
      READ(16,REC=K2) UR1,DR1,RR1,UR2,DR2,RR2
C
C -      UDR := UDR*(UR*DR*RR)
      CALL MULQDR(N,LDA,U1,D1,R1,UR1,DR1,RR1)
      CALL MULQDR(N,LDA,U2,D2,R2,UR2,DR2,RR2)
C
      ELSE
C ----- U,D,R := P(K2) -----
      READ(16,REC=K2) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
      ENDIF
C
C --- U,D,R := (UDR)*P(K1) -----
C
      IF (LE(K1).EQ.1) THEN
C ----- UR,DR,RR := P(K1) -----
      READ(16,REC=K1) UR1,DR1,RR1,UR2,DR2,RR2
C
C -      UDR := UDR*(UR*DR*RR)
      CALL MULQDR(N,LDA,U1,D1,R1,UR1,DR1,RR1)
      CALL MULQDR(N,LDA,U2,D2,R2,UR2,DR2,RR2)
C
      ENDIF
C
C ----- G := (1+UDR)**(-1) -----
C
C RR := R**(-1)
      CALL LINRT(N,R1,LDA,2,RR1,LDA)
      CALL LINRT(N,R2,LDA,2,RR2,LDA)
C
C B := U(TR)*RR+D            (RR OBERE DREIECKSMATRIX !)
      DO 260 J=1,N
      DO 270 I=1,N
      B1(I,J) = 0.
      B2(I,J) = 0.
270 CONTINUE
      B1(J,J) = D1(J)
      B2(J,J) = D2(J)
      DO 260 K=1,J
      DO 260 I=1,N
      B1(I,J) = B1(I,J)+U1(K,I)*RR1(K,J)
      B2(I,J) = B2(I,J)+U2(K,I)*RR2(K,J)

```

```

260 CONTINUE
C
C QDR- ZELEGUNG VON B = UR*DR*RR
      CALL QDRDEK(N,B1,LDA,UR1,LDA,DR1,LDA,RR1,LDA)
      CALL QDRDEK(N,B2,LDA,UR2,LDA,DR2,LDA,RR2,LDA)
C
C A := U*UR
      DO 280 J=1,N
      DO 290 I=1,N
        A1(I,J) = 0.
        A2(I,J) = 0.
290 CONTINUE
      DO 280 K=1,N
      DO 280 I=1,N
        A1(I,J) = A1(I,J)+U1(I,K)*UR1(K,J)
        A2(I,J) = A2(I,J)+U2(I,K)*UR2(K,J)
280 CONTINUE
C
C B := RR*R      (OBERE DREIECKSMATRIZEN !)
      DO 300 J=1,N
      DO 310 I=1,N
        B1(I,J) = 0.
        B2(I,J) = 0.
310 CONTINUE
      DO 300 K=1,J
      DO 300 I=1,K
        B1(I,J) = B1(I,J)+RR1(I,K)*R1(K,J)
        B2(I,J) = B2(I,J)+RR2(I,K)*R2(K,J)
300 CONTINUE
C
C R := B**(-1)
      CALL LINRT(N,B1,LDA,2,R1,LDA)
      CALL LINRT(N,B2,LDA,2,R2,LDA)
C
C B := R*DR**(-1) (OBERE DREIECKSMATRIX !)
      DO 320 J=1,N
        RD1 = 1./DR1(J)
        RD2 = 1./DR2(J)
      DO 320 I=1,J
        B1(I,J) = R1(I,J)*RD1
        B2(I,J) = R2(I,J)*RD2
320 CONTINUE
C
C G := B*A(TR)    (B OBERE DREIECKSMATRIX !)
      DO 330 J=1,N
      DO 340 I=1,N
        G1(I,J) = 0.
        G2(I,J) = 0.
340 CONTINUE
      DO 330 K=1,N
      DO 330 I=1,K
        G1(I,J) = G1(I,J)+B1(I,K)*A1(J,K)
        G2(I,J) = G2(I,J)+B2(I,K)*A2(J,K)
330 CONTINUE
C
C ***** ENDE DER BESTIMMUNG VON G *****
C
C EVTL. SHIFT DES BAUMS UM 1/3 NUP
      IF ((IB.EQ.NUP/2).OR.(IB.EQ.NUP)) THEN
        CALL BSHIFT(LB,LE,NUP,N)
      ENDIF
C
      RETURN

```


END

```

C
C
C *****
C ***** BSHIFT      (01.06.90) *****
C ***** SHIFT DES BAUMS AUS B-MATRIXBLOECKEN NACH JE *****
C ***** NUP/2 AUSFUEHRUNGEN VON BPROP. *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** LB: ZEIGER FUR DIE B-MATRIXPRODUKTE (IN/OUTPUT) *****
C ***** LE: LE(K) GIBT AN, OB P1(.,.,K) UND P2(.,.,K) *****
C ***** BESETZT SIND (1) ODER NICHT (0) (IN/OUTPUT) *****
C ***** NUP: ZAHL DER B-MATRIX-BLOECKE (NT/LF) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE BSHIFT(LB,LE,NUP,N)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION LB(129) , LE(385)
      DIMENSION U1(65,65), D1(65), R1(65,65)
      DIMENSION U2(65,65), D2(65), R2(65,65)
C
C ANZAHL EBENEN = 2LOG(NUP)
      NEBEN = ANINT(LOG(FLOAT(NUP))/LOG(2.))
      IF (2**NEBEN.NE.NUP) THEN
        WRITE(30,*) 'PARAMETERFEHLER IM UNTERPROGRAMM BSHIFT'
        STOP
      ENDIF
C
C ***** LOOP DURCH DIE EBENEN *****
      DO 10 IE=1,NEBEN
        IP = 2**(IE-1)
C
C ZAHL DER BESETZTEN MATRIZEN IN DER EBENE IE
        NM = NUP/IP
C
C LOOP UEBER DIE MATRIZEN DER EBENE
        DO 10 L=1,NM
          K = IP*(2*L-1)
          LE(K) = 1
          KP = K+NUP
          LE(KP) = 0
C
C SHIFT VON MATRIX P(K+NUP) NACH P(K)
          READ(16,REC=KP) U1,D1,R1,U2,D2,R2
          WRITE(16,REC=K) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
        10 CONTINUE
C ***** ENDE LOOP DURCH DIE EBENEN *****
C
C SHIFT DER MATRIXZEIGER LB
      DO 30 I=1,NUP
        LB(I) = LB(I)-NUP
      30 CONTINUE
C
      RETURN
      END
C
C *****
C ***** MULSP      (19.06.90) *****
C ***** MULTIPLIKATION EINER VOLLBESETZTEN MATRIX MIT *****
C ***** EINER DUENN BESETZTEN MATRIX; ES WERDEN NUR *****
C ***** EINTRAEGE ZWISCHEN NEACHSTEN-NACHBAR-PLAETZEN *****

```

```

C ***** UND AUF DER HAUPTDIAGONALEN BERUECKSICHTIGT. *****
C ***** DIES ENTSPRICHT EINER VERNACHLAESSIGUNG VON *****
C ***** TERMEN DER GROESSENORDNUNG DT**2 IN DER EXPO- *****
C ***** NENZIERTEN HOPPING-MATRIX. *****
C ***** ERGEBNIS C := A*B *****
C ***** *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** A : MATRIX LINKS (INPUT) *****
C ***** LDA: DIMENSION VON A (INPUT) *****
C ***** B : MATRIX RECHTS (INPUT) *****
C ***** LDB: DIMENSION VON B (INPUT) *****
C ***** C : PRODUKTMATRIX (OUTPUT) *****
C ***** LDC: DIMENSION VON C (INPUT) *****
C ***** N : ORDNUNG DER MATRIZEN (INPUT) *****
C ***** NI : NS= 0 : A DUENN BESETZT *****
C ***** NS= 1 : B DUENN BESETZT (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE MULSP(A,LDA,B,LDB,C,LDC,N,NI)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION A(LDA,LDA) , B(LDB,LDB) , C(LDC,LDC)
C
      DO 20 J=1,N
      DO 20 I=1,N
      C(I,J) = 0.
20  CONTINUE
C
      DO 10 J=1,N
      JP = J+1
      JPP= J+2
      JM = J-1
      JMM= J-2
      IF (JP.GT.N) JP=1
      IF (JPP.GT.N) JPP=JPP-N
      IF (JM.LT.1) JM=N
      IF (JMM.LT.1) JMM=JMM+N
C
      IF (NI.EQ.0) THEN
      DO 30 I=1,N
      C(J,I) = C(J,I)+A(J,J)*B(J,I)
      C(J,I) = C(J,I)+A(J,JP)*B(JP,I)
      C(J,I) = C(J,I)+A(J,JPP)*B(JPP,I)
      C(J,I) = C(J,I)+A(J,JM)*B(JM,I)
      C(J,I) = C(J,I)+A(J,JMM)*B(JMM,I)
30  CONTINUE
      ELSE
      DO 40 I=1,N
      C(I,J) = C(I,J)+A(I,J)*B(J,J)
      C(I,J) = C(I,J)+A(I,JP)*B(JP,J)
      C(I,J) = C(I,J)+A(I,JPP)*B(JPP,J)
      C(I,J) = C(I,J)+A(I,JM)*B(JM,J)
      C(I,J) = C(I,J)+A(I,JMM)*B(JMM,J)
40  CONTINUE
      ENDIF
C
      10 CONTINUE
C
      RETURN
      END
C
C
C *****
C ***** MULQDR (31.05.90) *****

```

```

C ***** MULTIPLIKATION ZWEIER QDR-ZERLEGTER MATRIZEN *****
C ***** ERGEBNIS WIEDERUM QDR-ZELEGT *****
C *****
C ***** BENUTZTE ROUTINEN: *****
C ***** QDRDEK(N,A,LDA,U,LDU,D,LDD,R,LDR) BESTIMMT DIE *****
C ***** QDR-ZERLEGUNG EINER MATRIX A IN U*D*R. *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** N : ORDNUNG DER MATRIZEN (INPUT) *****
C ***** LDU: DIMENSIONIERUNG DER MATRIZEN (INPUT) *****
C ***** U : ORTHOGONALE MATRIX (INPUT/OUTPUT) *****
C ***** D : DIAGONALE MATRIX RECHTS (INPUT/OUTPUT) *****
C ***** R : NORMIERTE OBERE DREIECKSMATRIX (IN/OUTPUT) *****
C ***** UR : ORTHOGONALE MATRIX (INPUT) *****
C ***** DR : DIAGONALE MATRIX RECHTS (INPUT) *****
C ***** RR : NORMIERTE OBERE DREIECKSMATRIX (INPUT) *****
C *****
C
C SUBROUTINE MULQDR(N,LDU,U,D,R,UR,DR,RR)
C IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C DIMENSION U(LDU,LDU) , D(LDU) , R(LDU,LDU)
C DIMENSION UR(LDU,LDU), DR(LDU), RR(LDU,LDU)
C DIMENSION A(65,65) , B(65,65)
C
C LDA = 65
C
C A := R*UR (R OBERE DREIECKSMATRIX !)
C DO 10 J=1,N
C DO 20 I=1,N
C A(I,J) = 0.
C 20 CONTINUE
C DO 10 K=1,N
C DO 10 I=1,K
C A(I,J) = A(I,J)+R(I,K)*UR(K,J)
C 10 CONTINUE
C
C A := D*A*DR
C DO 30 J=1,N
C DO 30 I=1,N
C A(I,J) = D(I)*A(I,J)*DR(J)
C 30 CONTINUE
C
C QDR- ZERLEGUNG VON A : UR*D*B
C CALL QDRDEK(N,A,LDA,UR,LDU,D,LDU,B,LDA)
C
C A := U
C DO 50 J=1,N
C DO 50 I=1,N
C A(I,J) = U(I,J)
C 50 CONTINUE
C
C U := A*UR
C DO 60 J=1,N
C DO 70 I=1,N
C U(I,J) = 0.
C 70 CONTINUE
C DO 60 K=1,N
C DO 60 I=1,N
C U(I,J) = U(I,J)+A(I,K)*UR(K,J)
C 60 CONTINUE
C
C R := B*RR (OBERE DREIECKSMATRIZEN !)
C DO 80 J=1,N

```

```

      DO 90 I=1,N
      R(I,J) = 0.
90    CONTINUE
      DO 80 K=1,J
      DO 80 I=1,K
      R(I,J) = R(I,J)+B(I,K)*RR(K,J)
80    CONTINUE
C
      RETURN
      END
C
C *****
C *****      MULP      (06.06.90)      *****
C *****      MULTIPLIKATION ZWEIER QDR-ZERLEGTER MATRIZEN*****
C *****      ERGEBNIS NICHT QDR-ZELEGT      *****
C *****
C
      SUBROUTINE MULP(N,LDU,U,D,R,UR,DR,RR,P,LDP)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION U(LDU,LDU) , D(LDU) , R(LDU,LDU)
      DIMENSION UR(LDU,LDU), DR(LDU), RR(LDU,LDU)
      DIMENSION P(LDP,LDP)
      DIMENSION A(65,65) , B(65,65) , C(65,65) , DIA(65)
C
      LDA = 65
C
C A := D*R      (OBERE DREIECKSMATRIX !)
      DO 10 J=1,N
      DO 10 I=1,J
      A(I,J) = D(I)*R(I,J)
10    CONTINUE
C
C B := UR*DR
      DO 20 J=1,N
      DO 20 I=1,N
      B(I,J) = UR(I,J)*DR(J)
20    CONTINUE
C
C P := A*B      (A OBERE DREIECKSMATRIX !)
      DO 30 J=1,N
      DO 40 I=1,N
      P(I,J) = 0.
40    CONTINUE
      DO 30 K=1,N
      DO 30 I=1,K
      P(I,J) = P(I,J)+A(I,K)*B(K,J)
30    CONTINUE
C
C QDR- ZERLEGUNG VON P : A*DIA*B
      CALL QDRDEK(N,P,LDP,A,LDA,DIA,LDA,B,LDA)
C
C P := U*A
      DO 60 J=1,N
      DO 70 I=1,N
      P(I,J) = 0.
70    CONTINUE
      DO 60 K=1,N
      DO 60 I=1,N
      P(I,J) = P(I,J)+U(I,K)*A(K,J)
60    CONTINUE
C
C A := P*DIA
      DO 50 J=1,N

```

```

      DO 50 I=1,N
      A(I,J) = P(I,J)*DIA(J)
50    CONTINUE
C
C C := B*RR      (OBERE DREIECKSMATRIZEN !)
      DO 80 J=1,N
      DO 90 I=1,N
      C(I,J) = 0.
90    CONTINUE
      DO 80 K=1,J
      DO 80 I=1,K
      C(I,J) = C(I,J)+B(I,K)*RR(K,J)
80    CONTINUE
C
C P := A*C      (C OBERE DREIECKSMATRIX !)
      DO 100 J=1,N
      DO 110 I=1,N
      P(I,J) = 0.
110   CONTINUE
      DO 100 K=1,J
      DO 100 I=1,N
      P(I,J) = P(I,J)+A(I,K)*C(K,J)
100   CONTINUE
C
      RETURN
      END
C
C
C *****
C ***** QDRDEK      (31.05.90) *****
C ***** ZERLEGUNG EINER MATRIX A IN EINE ORTHOGONALE *****
C ***** MATRIX U, EINE DIAGONALMATRIX D UND EINE *****
C ***** NORMIERTE OBERE DREIECKSMATRIX R. *****
C ***** *****
C ***** DIE IMSL-ROUTINEN LQRRR UND LQERR ERZEUGEN *****
C ***** EINE QR-ZERLEGUNG. R WIRD DURCH DIE DIAGONALE *****
C ***** MATRIX D SO NORMIERT, DASS DIE ELEMENTE DER *****
C ***** HAUPTDIAGONALEN GLEICH 1 SIND. *****
C ***** *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** N : ORDNUNG DER MATRIZEN (INPUT) *****
C ***** A : ZU ZERLEGENDE MATRIX (INPUT) *****
C ***** LDA: DIMENSIONIERUNG VON A (INPUT) *****
C ***** U : ORTHOGONALE MATRIX (OUTPUT) *****
C ***** LDU: DIMENSIONIERUNG VON U (INPUT) *****
C ***** D : DIAGONALE MATRIX RECHTS (OUTPUT) *****
C ***** LDD: DIMENSIONIERUNG VON D (INPUT) *****
C ***** R : NORMIERTE OBERE DREIECKSMATRIX (OUTPUT) *****
C ***** LDR: DIMENSIONIERUNG VON R (INPUT) *****
C ***** *****
C
      SUBROUTINE QDRDEK(N,A,LDA,U,LDU,D,LDD,R,LDR)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION A(LDA,LDA) , U(LDU,LDU) , D(LDD) , R(LDR,LDR)
      DIMENSION QRAUX(65) , CONORM(65)
      DIMENSION IPVT(65)
      LOGICAL PIVOT
C
      PIVOT = .FALSE.
C
C QR ZERLEGUNG VON A
      CALL LQRRR(N,N,A,LDA,PIVOT,IPVT,R,LDR,QRAUX,CONORM)
C

```

```

C BESTIMMUNG DER ORTHOGONALEN MATRIX U
  CALL LQERR(N,N,R,LDR,QRAUX,U,LDU)

```

```

C
C BESTIMMUNG VON D UND R

```

```

  DO 20 I=1,N
    D(I) = R(I,I)
    RD = 1./D(I)
    DO 30 J=1,I-1
      R(I,J) = 0.
30  CONTINUE
    DO 20 J=I,N
      R(I,J) = R(I,J)*RD
20  CONTINUE

```

```

C
  RETURN
END

```

```

C
C *****
C ***** LOKMAG (08.01.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE LOKALE MAGNETISIERUNG RL NACH (3.14). *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** RL : LOKALE MAGNETIESIERUNG (OUTPUT) *****
C *****

```

```

C
  SUBROUTINE LOKMAG (G1,G2,N,RL)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)

```

```

C
  RL = 0.
C
  DO 10 I=1,N
    S1 = G1(I,I)
    S2 = G2(I,I)
    S3 = S1+S2-2.*S1*S2
    RL = RL+S3
10  CONTINUE

```

```

C
  RL = RL/DFLOAT(N)*.75
C
  RETURN
END

```

```

C
C *****
C ***** STRUKT (02.01) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DEN MAGNETISCHE STRUKTURFAKTOR S(Q) *****
C ***** NACH GLEICHUNGEN (3.3), (3.4) UND (3.9). *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** Q : PHASE (INPUT) *****
C ***** S : MAGN. STRUKTURFAKTOR (OUTPUT) *****
C *****

```

```

C
      SUBROUTINE STRUKT (G1,G2,N,S,Q)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
C
      S = 0.
      RMAX = 0.5*DFLOAT(N)
C
      DO 10 J=1,N
      DO 20 I=1,N
C
        RIJ = DABS(DFLOAT(I-J))
C
C PERIODISCHE RANDBEDINGUNGEN
      IF (RIJ.GT.RMAX) RIJ = DFLOAT(N)-RIJ
C
      PHASE = DCOS(RIJ*Q)
      RI = G2(I,I)-G1(I,I)
      RJ = G2(J,J)-G1(J,J)
      P1 = G1(J,I)*G1(I,J)
      P2 = G2(J,I)*G2(I,J)
      S = S+(RI*RJ-P1-P2)*PHASE
20  CONTINUE
      S = S+G1(J,J)+G2(J,J)
10  CONTINUE
C
      S = S/DFLOAT(N)
C
      RETURN
      END
C
C
C *****
C *****  SUSZEPT      (03.06.90) *****
C *****  BERECHNUNG DER (STAGERRED) SUSZEPTIBILITAET *****
C *****  CHI(PHI). *****
C *****  BEMERKUNG: ZUR BERECHNUNG VON CHI(0) IST *****
C *****  DIE SUBROUTINE STRUKT VORZUZIEHEN, DA *****
C *****  LETZTERE NICHT SO ZEITAUFWENDIG IST. *****
C *****  ES GILT : CHI(0) = 1/TEMP * S(0) *****
C ***** *****
C *****  PARAMETER *****
C *****  N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C *****  (INPUT) *****
C *****  NT: ZAHL DER TROTTER-SCHRITTE      (INPUT) *****
C *****  LREF: UPDATING-RATE                (INPUT) *****
C *****  E : BOLTSMANNFAKTOREN              (INPUT) *****
C *****  EK: EPONENZIERTE N.N.-MATRIX      (INPUT) *****
C *****  IS: ISING-SPINFELD, WERTE +1 U. -1 FUEER *****
C *****  JEDEN ORTS- UND ZEITGITTERPUNKT *****
C *****  (INPUT) *****
C *****  G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUEER *****
C *****  ELEKTRONEN MIT SPIN UP (DOWN) *****
C *****  Q : PHASENFAKTOR                    (INPUT) *****
C *****  CHI: MAGN. SUSZEPTIBILITAET        (OUTPUT) *****
C ***** *****
C
      SUBROUTINE SUSZEP(LB,LE,G1,G2,IS,EK,EKI,E,N,LF,NUP,CHI,Q)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION IS(1025,65)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N) , EK(N,N) , EKI(N,N) , E(3)
      DIMENSION LE(385) , LB(129)
      DIMENSION G01(65,65), G02(65,65)

```

```

      DIMENSION S1(65,65) , S2(65,65)
      DIMENSION T1(65,65) , T2(65,65)
      DIMENSION US1(65,65), DS1(65), RS1(65,65)
      DIMENSION US2(65,65), DS2(65), RS2(65,65)
      DIMENSION UT1(65,65), DT1(65), RT1(65,65)
      DIMENSION UT2(65,65), DT2(65), RT2(65,65)
      DIMENSION UG1(65,65), DG1(65), RG1(65,65)
      DIMENSION UG2(65,65), DG2(65), RG2(65,65)
      DIMENSION U1(65,65) , D1(65) , R1(65,65)
      DIMENSION U2(65,65) , D2(65) , R2(65,65)
      DIMENSION B1(65,65) , BM1(65,65) , C1(65,65)
      DIMENSION B2(65,65) , BM2(65,65) , C2(65,65)

C
      CHI = 0.0
      LDA = 65

C
      RMAX= 0.5*RL

C
C QDR-ZERLEGUNG VON G : UG,DG,RG
      CALL QDRDEK(N,G1,N,UG1,LDA,DG1,LDA,RG1,LDA)
      CALL QDRDEK(N,G2,N,UG2,LDA,DG2,LDA,RG2,LDA)

C
C S := G ; T := 1-G ; G0 := G
      DO 10 J=1,N
      DO 20 I=1,N
      S1(I,J) = G1(I,J)
      S2(I,J) = G2(I,J)
      T1(I,J) = -G1(I,J)
      T2(I,J) = -G2(I,J)
      G01(I,J)= G1(I,J)
      G02(I,J)= G2(I,J)
20  CONTINUE
      T1(J,J) = T1(J,J)+1.
      T2(J,J) = T2(J,J)+1.
10  CONTINUE

C
C ++++++ LA=1 ... NUP ++++++
      DO 30 LA=1,NUP

C
C ----- LI=1 ... LF -----
      DO 40 LI=1,LF

C
      L = (LA-1)*LF+LI

C
C --- S:= B(L)*S ; T:= T*B(L)**(-1) ; G:= B(L)*G*B(L)**(-1) ---
C
C B := B(L) , BM := B(L)**(-1)
      DO 50 I=1,N
      E1 = E(2+IS(L,I))
      E2 = E(2-IS(L,I))
      F1 = 1./E(2+IS(L,I))
      F2 = 1./E(2-IS(L,I))
      DO 50 J=1,N
      B1(I,J) = EK(I,J)*E1
      B2(I,J) = EK(I,J)*E2
      BM1(J,I)= EKI(J,I)*F1
      BM2(J,I)= EKI(J,I)*F2
50  CONTINUE

C
C C := B*S
      CALL MULSP(B1,LDA,S1,LDA,C1,LDA,N,0)
      CALL MULSP(B2,LDA,S2,LDA,C2,LDA,N,0)

C

```



```

C S := C
      DO 60 J=1,N
      DO 60 I=1,N
      S1(I,J) = C1(I,J)
      S2(I,J) = C2(I,J)
60  CONTINUE
C
C C := T*BM
      CALL MULSP(T1,LDA,BM1,LDA,C1,LDA,N,0)
      CALL MULSP(T2,LDA,BM2,LDA,C2,LDA,N,0)
C
C T := C
      DO 70 J=1,N
      DO 70 I=1,N
      T1(I,J) = C1(I,J)
      T2(I,J) = C2(I,J)
70  CONTINUE
C
C C := B*G
C
      CALL MULSP(B1,LDA,G1,N,C1,LDA,N,0)
      CALL MULSP(B2,LDA,G2,N,C2,LDA,N,0)
C
C G := C*BM
C
      CALL MULSP(C1,LDA,BM1,LDA,G1,N,N,1)
      CALL MULSP(C2,LDA,BM2,LDA,G2,N,N,1)
C
C ***** SUMME UEBER PAARE *****
C
      DO 120 J=1,N
      DO 120 I=1,N
C
      RIJ = DABS(DFLOAT(I-J))
C
C PERIODISCHE RANDBEDINGUNGEN
      IF (RIJ.GT.RMAX) RIJ = DFLOAT(N)-RIJ
C
      PHASE = DCOS(RIJ*Q)
C
      DUM = (G1(I,I)-G2(I,I))*(G01(J,J)-G02(J,J))
      DUM = DUM+T1(I,J)*S1(J,I)
      DUM = DUM+T2(I,J)*S2(J,I)
C
      CHI = CHI+DUM*PHASE
C
120  CONTINUE
C *****
C
40  CONTINUE
C -----
C
C PROPAGATION DER GREENSFUNKTION
      CALL BPROP(LB,LE,G1,G2,IS,EK,E,N,LF,NUP,LA)
C
      K1 = NUP/2
      K2 = 3*K1
      K3 = 5*K1
C
      IF (LA.NE.NUP) THEN
      IF ((LA*2).LT.NUP) THEN
C
C -      US,DS,RS:= P(K3) ; UT,DT,RT:= P(K2) ; U,D,R:= P(K1)

```

```

      READ(16,REC=K3) US1,DS1,RS1,US2,DS2,RS2
      READ(16,REC=K2) UT1,DT1,RT1,UT2,DT2,RT2
      READ(16,REC=K1) U1,D1,R1,U2,D2,R2
C
C -      UT,DT,RT := (UT*DT*RT)*UDR
      CALL MULQDR(N,LDA,UT1,DT1,RT1,U1,D1,R1)
      CALL MULQDR(N,LDA,UT2,DT2,RT2,U2,D2,R2)
C
      ENDIF
C
      IF ((LA*2).GT.NUP) THEN
C
C -      US,DS,RS:= P(K3) ; U,D,R:= P(K2) ; UT,DT,RT:= P(K1)
      READ(16,REC=K3) US1,DS1,RS1,US2,DS2,RS2
      READ(16,REC=K2) U1,D1,R1,U2,D2,R2
      READ(16,REC=K1) UT1,DT1,RT1,UT2,DT2,RT2
C
C -      US,DS,RS := (US*DS*RS)*UDR
      CALL MULQDR(N,LDA,US1,DS1,RS1,U1,D1,R1)
      CALL MULQDR(N,LDA,US2,DS2,RS2,U2,D2,R2)
C
      ENDIF
C
      IF ((LA*2).EQ.NUP) THEN
C
C -      US,DS,RS:= P(K2) ; UT,DT,RT:= P(K1)
      READ(16,REC=K2) US1,DS1,RS1,US2,DS2,RS2
      READ(16,REC=K1) UT1,DT1,RT1,UT2,DT2,RT2
C
      ENDIF
C
C -      S := (US*DS*RS)*(UG*DG*RG)
      CALL MULP(N,LDA,US1,DS1,RS1,UG1,DG1,RG1,S1,LDA)
      CALL MULP(N,LDA,US2,DS2,RS2,UG2,DG2,RG2,S2,LDA)
C
C -      T := (UG*DG*RG)*(UT*DT*RT)
      CALL MULP(N,LDA,UG1,DG1,RG1,UT1,DT1,RT1,T1,LDA)
      CALL MULP(N,LDA,UG2,DG2,RG2,UT2,DT2,RT2,T2,LDA)
C
      ENDIF
C
      30 CONTINUE
C ++++++
C
      CHI = CHI/DFLOAT(N)
C
      RETURN
      END
C
C *****
C *****  ENERG    (22.02.90)    *****
C *****  BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2    *****
C *****  DIE INNERE ENERGIE DER ELEKTRONEN NACH    *****
C *****  (4.11) UND (3.3).    *****
C *****    *****
C *****  ARGUMENTE    *****
C *****  G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK-    *****
C *****            TRONEN MIT SPIN UP (DOWN)    (INPUT)    *****
C *****  HK: HOPPING-MATRIX                            (INPUT)    *****
C *****  N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM    *****
C *****            (INPUT)    *****
C *****  U : ON-SITE ABSTOSSUNG                        (INPUT)    *****
C *****  EN: INNERE ENERGIE                            (OUTPUT)    *****

```

```

C *****
C
      SUBROUTINE ENERG (G1,G2,HK,N,U,EN)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
      DIMENSION HK(N,N)

C
      EN = 0.0
C
      DO 10 I=1,N
C
C      POTENTIELLE ENERGIE
      EN = EN + U*(1.-G1(I,I))*(1.-G2(I,I))
C
      DO 10 J=1,N
C
C      KINETISCHE ENERGIE
      EN = EN + (G1(J,I)+G2(J,I))*HK(I,J)
C
10  CONTINUE
C
      EN = EN/DFLOAT(N)
C
      RETURN
      END
C
C
C *****
C ***** ELDICHTE (09.07.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE ELEKTRONENDICHTE D1 BZW. D2 FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP BZW. DOWN NACH (3.3). *****
C ***** *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** D1 : DICHTE SPIN UP (OUTPUT) *****
C ***** D2 : DICHTE SPIN DOWN (OUTPUT) *****
C ***** *****
C
      SUBROUTINE ELDICHTE(G1,G2,N,D1,D2)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
C
      D1 = 0.
      D2 = 0.
C
      DO 10 I=1,N
      D1 = D1+G1(I,I)
      D2 = D2+G2(I,I)
10  CONTINUE
C
      D1 = 1.-D1/DFLOAT(N)
      D2 = 1.-D2/DFLOAT(N)
C
      RETURN
      END
C
C
C *****
C ***** LODICHTE (05.03.90) *****

```

```

C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE LOCHDICHTHE D. *****
C ***** *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** H : LOCHDICHTHE (OUTPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE LODICHTE(G1,G2,N,H)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)

C
      H = 0.

C
      DO 10 I=1,N
      H = H+G1(I,I)*G2(I,I)
10  CONTINUE

C
      H = H/DFLOAT(N)

C
      RETURN
      END

C
C
C *****
C ***** KORRN (28.09.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE LOKALE DICHTHE-KORRELATIONSFUNKTION *****
C ***** FUER GITTERPLAETZE IM ABSTAND LD NACH (7.15). *****
C ***** *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** C : KORRELATIONSFUNKTION (OUTPUT) *****
C ***** LD : RAEUMLICHER ABSTAND (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE KORRN (G1,G2,N,C,LD)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)

C
      C = 0.

C
      DO 10 J=1,N
      K = J+LD
      IF (K.GT.N) K=K-N

C
      C = C-G1(J,K)-G2(J,K)

C
10  CONTINUE

C
      C = C/DFLOAT(N)

C
      RETURN
      END

C
C
C *****

```

```

C ***** KORRSS (06.07.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE SPIN-SPIN-KORRELATIONSFUNKTION FUER *****
C ***** GITTERPLAETZE IM ABSTAND LD NACH GL. (7.5). *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** C : KORRELATIONFUNKTION (OUTPUT) *****
C ***** LD : RAEUMLICHER ABSTAND (INPUT) *****
C *****

```

```

C
      SUBROUTINE KORRSS(G1,G2,N,C,LD)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)

C
      C = 0.

C
      DO 10 J=1,N
      K = J+LD
      IF (K.GT.N) K=K-N

C
      C1 = G2(J,J)-G1(J,J)
      C2 = G2(K,K)-G1(K,K)
      C3 = G1(K,J)*G1(J,K)+G2(K,J)*G2(J,K)
      C = C+C1*C2-C3

C
10  CONTINUE

C
      C = C/DFLOAT(N)

C
      RETURN
      END

```

```

C
C *****
C ***** KORRDD (09.07.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE DOPPELBESETZUNGS-KORRELATIONSFKT. FUER *****
C ***** GITTERPLAETZE IM ABSTAND LD NACH GL. (7.5). *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** C : KORRELATIONFUNKTION (OUTPUT) *****
C ***** LD : RAEUMLICHER ABSTAND (INPUT) *****
C *****

```

```

C
      SUBROUTINE KORRDD (G1,G2,N,C,LD)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)

C
      C = 0.

C
      DO 10 J=1,N
      K = J+LD
      IF (K.GT.N) K=K-N

C
      C1 = (1.-G1(J,J))*(1.-G1(K,K))-G1(K,J)*G1(J,K)

```

```

      C2 = (1.-G2(J,J))*(1.-G2(K,K))-G2(K,J)*G2(J,K)
      C = C+C1*C2
C
  10 CONTINUE
C
      C = C/DFLOAT(N)
C
      RETURN
      END
C
C *****
C ***** KORRNN (09.07.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE DICHTE-DICHTE-KORRELATIONSFUNKTION FUER *****
C ***** GITTERPLAETZE IM ABSTAND LD NACH GL. (7.5). *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** C : KORRELATIONSFUNKTION (OUTPUT) *****
C ***** LD : RAEUMLICHER ABSTAND (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE KORRNN (G1,G2,N,C,LD)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
C
      C = 0.
C
      DO 10 J=1,N
      K = J+LD
      IF (K.GT.N) K=K-N
C
      C1 = G1(J,J)+G2(J,J)-2.
      C2 = G1(K,K)+G2(K,K)-2.
      C3 = G1(K,J)*G1(J,K)+G2(K,J)*G2(J,K)
      C = C+C1*C2-C3
C
  10 CONTINUE
C
      C = C/DFLOAT(N)
C
      RETURN
      END
C
C *****
C ***** KORRHH (09.07.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE LOCH-LOCH-KORRELATIONSFUNKTION FUER *****
C ***** GITTERPLAETZE IM ABSTAND LD NACH GL. (7.5). *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** C : KORRELATIONSFUNKTION (OUTPUT) *****
C ***** LD : RAEUMLICHER ABSTAND (INPUT) *****
C *****

```

```

C
  SUBROUTINE KORRRH (G1,G2,N,C,LD)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
C
  C = 0.
C
  DO 10 J=1,N
    K = J+LD
    IF (K.GT.N) K=K-N
C
    G1 = G1(J,J)*G1(K,K)-G1(K,J)*G1(J,K)
    G2 = G2(J,J)*G2(K,K)-G2(K,J)*G2(J,K)
    C = C+C1*C2
C
  10 CONTINUE
C
  C = C/DFLOAT(N)
C
  RETURN
  END
C
C
C *****
C ***** KORRSC (09.07.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE LOKALE SINGLET-COOPERPAAR-KORRELATIONS- *****
C ***** FUNKTION FUER GITTERPLAETZE IM ABSTAND LD *****
C ***** NACH GL. (7.11). *****
C ***** *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** C : KORRELATIONSFUNKTION (OUTPUT) *****
C ***** LD : RAEUMLICHER ABSTAND (INPUT) *****
C *****
C
  SUBROUTINE KORRSC (G1,G2,N,C,LD)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
C
  C = 0.
C
  DO 10 J=1,N
    K = J+LD
    IF (K.GT.N) K=K-N
C
    C = C-G1(J,K)*G2(J,K)
C
  10 CONTINUE
C
  C = C/DFLOAT(N)
C
  RETURN
  END
C
C
C *****
C * DIE FOLGENDEN ROUTINEN MUESSEN BEI DER ANWENDUNG AUF *
C * QUADRATISCHE BZW. KUBISCHE GITTER GEAENDERT WERDEN *

```

```

C *****
C
C *****
C * 1. QUADRATISCHE GITTER *
C *****
C
C *****
C *****      HOPMA      (22.02.90)      *****
C ***** EINGABE DER SYMMETRISCHEN HOPPING- *****
C ***** MATRIX HK(N,N). *****
C ***** HIER: NUR NEXT NEAREST NEIGHBORS *****
C ***** *****
C *****      ARGUMENTE *****
C ***** N :ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C *****      (INPUT) *****
C ***** HK :HOPPING-MATRIX (NXN)      (OUTPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE HOPMA(HK,N)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION HK(N,N)
C
      L = INT(DSQRT(DFLOAT(N)))
      IF ((L*L).NE.N) THEN
        WRITE(6,*) 'ZAHL DER GITTERPLAETZE IST KEINE QUADRATZAHL '
        STOP
      ENDIF
C
      DO 10 I=1,N
        DO 10 J=1,N
          HK(I,J) = 0.0
        10 CONTINUE
C
      DO 20 I=1,N
C
C BESTIMMUNG DER HOPPING-NACHBARN IX,IY VOM GITTERPLATZ I
C HIER: NAECHSTE-NACHBAR HOPPING IN X- UND Y-RICHTUNG
C
        IX = I+1
        IY = I+L
C
C PERIODISCHE RANDBEDINGUNGEN
        IF (MOD(I,L).EQ.0) IX = IX-L
        IF (IY.GT.N) IY = IY-N
C
C SCHRAUBENFOERMIGE RANDBEDINGUNGEN
        IF (I.EQ.N) IX = 1
        IF (IY.GT.N) IY = IY-N-1
        IF (IY.EQ.0) IY = L
C
        HK(I,IX) = 1.0
        HK(IX,I) = 1.0
        HK(I,IY) = 1.0
        HK(IY,I) = 1.0
C
      20 CONTINUE
C
      RETURN
      END
C
C
C
C *****

```



```

C ***** STRUKT      (02.02) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DEN MAGNETISCHE STRUKTURFAKTOR S(QX,QY) *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER *****
C ***** ELEKTRONEN MIT SPIN UP (DOWN) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** S : MAGN. STRUKTURFAKTOR (OUTPUT) *****
C ***** QX : PHASE IN X-RICHTUNG (INPUT) *****
C ***** QY : PHASE IN Y-RICHTUNG (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE STRUKT (G1,G2,N,S,QX,QY)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
      DIMENSION SF(400)
C
      S = 0.0
C
      DO 15 I=1,N
      SF(I) = 0.0
15  CONTINUE
C
      RL= DSQRT(DFLOAT(N))
      L = INT(RL)
      RMAX= 0.5*RL
C
C ----- SUMME UEBER GITTERPLAETZE -----
      DO 10 J=1,N
      JX = MOD(J-1,L)
      JY = (J-1)/L
C
      DO 20 I=1,N
      IX = MOD(I-1,L)
      IY = (I-1)/L
C
C ABSTAND IN X-RICHTUNG
      RX = DABS(DFLOAT(IX-JX))
      IF (RX.GT.RMAX) RX = RL-RX
C
C ABSTAND IN Y-RICHTUNG
      RY = DABS(DFLOAT(IY-JY))
      IF (RY.GT.RMAX) RY = RL-RY
C
      PHASE = DCOS(RX*QX+RY*QY)
      RI = G2(I,I)-G1(I,I)
      RJ = G2(J,J)-G1(J,J)
      P1 = G1(J,I)*G1(I,J)
      P2 = G2(J,I)*G2(I,J)
      SF(I) = SF(I)+(RI*RJ-P1-P2)*PHASE
20  CONTINUE
      SF(J) = SF(J)+G1(J,J)+G2(J,J)
10  CONTINUE
C -----
C
      DO 30 I=1,N
      S = S+SF(I)
30  CONTINUE
C
      S = S/DFLOAT(N)
C

```

RETURN
END

```

C
C *****
C * BEM.: DIE "SUMME UEBER GITTERPLAETZE" IN DER ROUTINE *
C * "SUSZEP" IST IDENTISCH MIT DER IN "STRUKT". *
C * SIE WIRD DAHER NICHT NOCHMAL AUFGEFUEHRT. *
C *****
C
C
C *****
C ***** KORSS (06.07.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE SPIN-SPIN-KORRELATIONSFUNKTION FUER *****
C ***** GITTERPLAETZE IM ABSTAND LD NACH GL. (7.5). *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** N : ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** C : KORRELATIONSFUNKTION (OUTPUT) *****
C ***** LX : ABSTAND IN X-RICHTUNG (INPUT) *****
C ***** LY : ABSTAND IN Y-RICHTUNG (INPUT) *****
C *****
C
SUBROUTINE KORSS(G1,G2,N,S,LX,LY)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)

C
C = 0.

C
L = INT(DSQRT(DFLOAT(N)))

C
DO 10 I=1,N
IX = MOD(I-1,L)+1
IY = (I-1)/L+1

C
KX = IX+LX
KY = IY+LY
IF (KX.GT.L) KX=KX-L
IF (KY.GT.L) KY=KY-L
K = (KY-1)*L+KX

C
RI = G2(I,I)-G1(I,I)
RK = G2(K,K)-G1(K,K)
P1 = G1(K,I)*G1(I,K)
P2 = G2(K,I)*G2(I,K)
S = S+(RI*RK-P1-P2)

C
10 CONTINUE

C
C = S/DFLOAT(N)

C
RETURN
END

C
C *****
C * BEM.: DIE WEITEREN KORRELATIONSFUNKTIONEN WERDEN *
C * VOLLKOMMEN ANALOG BERECHNET. DIE ROUTINEN *
C * WERDEN DAHER NICHT NOCHMAL AUFGEFUEHRT. *
C *****
C

```

```

C
C *****
C * 2. KUBISCHE GITTER *
C *****
C
C *****
C *****      HOPMA      (22.02.90)      *****
C *****      EINGABE DER SYMMETRISCHEN HOPPING-      *****
C *****      MATRIX HK(N,N).      *****
C *****      HIER: NUR NEXT NEAREST NEIGHBORS      *****
C *****      *****
C *****      ARGUMENTE      *****
C *****      N :ZAHL DER GITTERPLAETZE IM ORTSRAUM *****
C *****      (INPUT)      *****
C *****      HK :HOPPING-MATRIX (NXN) (OUTPUT)      *****
C *****
C
      SUBROUTINE HOPMA(HK,N,KN)
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION HK(N,N)
C
      MN = KN*KN
C
      DO 10 I=1,N
      DO 10 J=1,N
      HK(I,J) = 0.0
10  CONTINUE
C
      DO 20 I=1,N
C
C BESTIMMUNG DER HOPPING-NACHBARN IX,IY,IZ VOM GITTERPLATZ I
C HIER: NAECHSTE-NACHBAR HOPPING IN X-, Y- UND Z-RICHTUNG
C
      IX = I+1
      IY = I+KN
      IZ = I+MN
C
      ISCH = (I-1)/MN
C
C PERIODISCHE RANDBEDINGUNGEN
      IF (MOD(I,KN).EQ.0) IX = IX-KN
      IF ((IY-ISCH*MN).GT.MN) IY = IY-MN
      IF (IZ.GT.N) IZ = IZ-N
C
      HK(I,IX) = 1.0
      HK(IX,I) = 1.0
      HK(I,IY) = 1.0
      HK(IY,I) = 1.0
      HK(I,IZ) = 1.0
      HK(IZ,I) = 1.0
C
20  CONTINUE
C
      RETURN
      END
C
C *****
C *****      STRUKT      (02.02)      *****
C *****      BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2      *****
C *****      DEN MAGNETISCHE STRUKTURFAKTOR S(QX,QY)      *****
C *****      NACH (3.2) BIS (3.5).      *****
C *****      *****

```

```

C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER *****
C ***** ELEKTRONEN MIT SPIN UP (DOWN) *****
C ***** KN: KANTENLAENGE DES ORTSRAUMGITTERS *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** S : MAGN. STRUKTURFAKTOR (OUTPUT) *****
C ***** QX : PHASE IN X-RICHTUNG (INPUT) *****
C ***** QY : PHASE IN Y-RICHTUNG (INPUT) *****
C ***** QZ : PHASE IN Z-RICHTUNG (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE STRUKT (G1,G2,KN,S,QX,QY,QZ)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
      DIMENSION SF(400)

C
      S = 0.

C
      RL = FLOAT(KN)
      RMAX= 0.5*RL
      WN=KN*KN

C
C
C ----- SUMME UEBER GITTERPLAETZE -----
C
      DO 10 I=1,N
      IX = MOD(I-1,KN)
      IY = MOD(((I-1)/KN),KN)
      IZ = (I-1)/WN
      DO 20 J=1,N
      JX = MOD(J-1,KN)
      JY = MOD(((J-1)/KN),KN)
      JZ = (J-1)/WN

C
C ABSTAND IN X-RICHTUNG
      RX = DABS(DFLOAT(IX-JX))
      IF (RX.GT.RMAX) RX = RL-RX

C
C ABSTAND IN Y-RICHTUNG
      RY = DABS(DFLOAT(IY-JY))
      IF (RY.GT.RMAX) RY = RL-RY

C
C ABSTAND IN Z-RICHTUNG
      RZ = DABS(DFLOAT(IZ-JZ))
      IF (RZ.GT.RMAX) RZ = RL-RZ

C
      PHASE = DCOS(RX*QX+RY*QY+RZ*QZ)

C
      RI = G2(I,I)-G1(I,I)
      RJ = G2(J,J)-G1(J,J)
      P1 = G1(J,I)*G1(I,J)
      P2 = G2(J,I)*G2(I,J)
      SF(I) = SF(I)+(RI*RJ-P1-P2)*PHASE
20  CONTINUE
      SF(J) = SF(J)+G1(J,J)+G2(J,J)
10  CONTINUE

C
C -----
C
C
      DO 30 I=1,N
      S = S+SF(I)
30  CONTINUE
C

```

```

      S = S/DFLOAT(N)
C
      RETURN
      END
C
C *****
C * BEM.: DIE "SUMME UEBER GITTERPLAETZE" IN DER ROUTINE *
C *       "SUSZEP" IST IDENTISCH MIT DER IN "STRUKT". *
C *       SIE WIRD DAHER NICHT NOCHMAL AUFGEFUEHRT. *
C *****
C
C *****
C ***** KORSS (06.07.90) *****
C ***** BERECHNET AUS DEN GREENSFUNKTIONEN G1, G2 *****
C ***** DIE SPIN-SPIN-KORRELATIONSFUNKTION FUER *****
C ***** GITTERPLAETZE IM ABSTAND LD NACH GL. (7.5). *****
C *****
C ***** ARGUMENTE *****
C ***** G1(G2): EQUAL-TIME-GREENSFUNKTION FUER ELEK- *****
C ***** TRONEN MIT SPIN UP (DOWN) (INPUT) *****
C ***** KN: KANTENLAENGE DES ORTSRAUMGITTERS *****
C ***** (INPUT) *****
C ***** C : KORRELATIONSFUNKTION (OUTPUT) *****
C ***** LX : ABSTAND IN X-RICHTUNG (INPUT) *****
C ***** LY : ABSTAND IN Y-RICHTUNG (INPUT) *****
C ***** LZ : ABSTAND IN Z-RICHTUNG (INPUT) *****
C *****
C
      SUBROUTINE KORSS(G1,G2,N,S,LX,LY,LZ)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION G1(N,N) , G2(N,N)
C
      C = 0.
      WN=KN*KN
C
      DO 10 I=1,N
      IX = MOD(I-1,KN)
      IY = MOD((I-1)/KN),KN)
      IZ = (I-1)/WN
C
      KX = IX+LX
      KY = IY+LY
      KZ = IZ+LZ
      IF (KX.GT.KN) KX=KX-KN
      IF (KY.GT.KN) KY=KY-KN
      K = (KZ-1)*WN+(KY-1)*KN+KX
C
      RI = G2(I,I)-G1(I,I)
      RK = G2(K,K)-G1(K,K)
      P1 = G1(K,I)*G1(I,K)
      P2 = G2(K,I)*G2(I,K)
      S = S+(RI*RK-P1-P2)
C
10  CONTINUE
C
      C = S/DFLOAT(N)
C
      RETURN
      END
C
C *****
C * BEM.: DIE WEITEREN KORRELATIONSFUNKTIONEN WERDEN *

```

```
C *          VOLLKOMMEN ANALOG BERECHNET. DIE ROUTINEN          *
C *          WERDEN DAHER NICHT NOCHMAL AUFGEFUEHRT.          *
C *****
C
C *****
C *          E N D E      D E S      P R O G R A M M S          *
C *****
```

Jül-2417

Januar 1991

ISSN 0366-0885