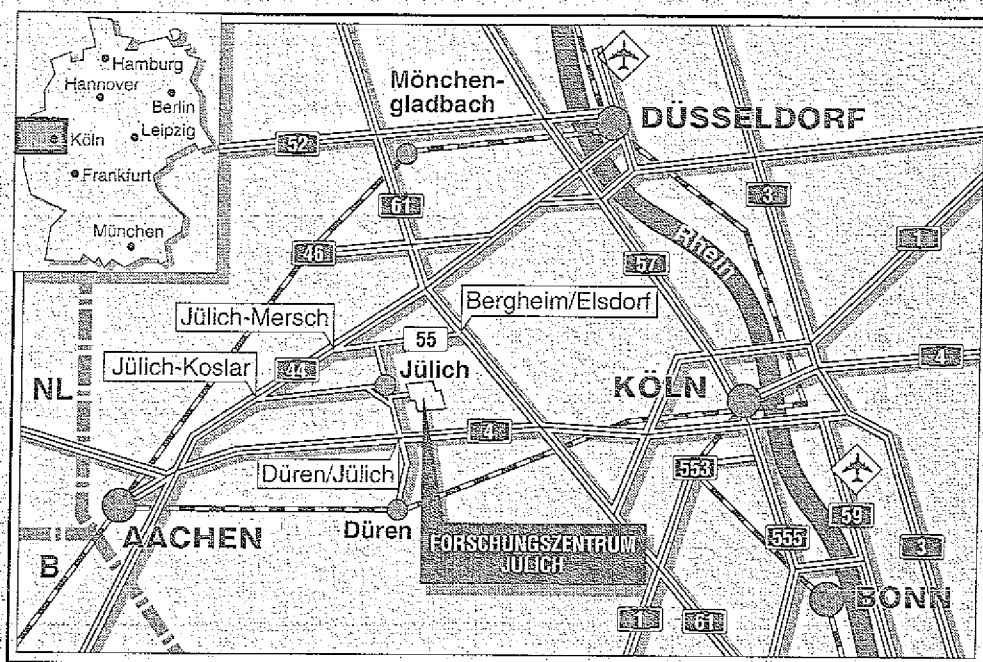


Institut für Festkörperforschung

**Phasenübergänge in stark korrelierten
Elektronensystemen**

Martin Ulmke



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3034

ISSN 0944-2952

Institut für Festkörperforschung Jüli-3034

D82 (Diss. RWTH Aachen)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

Phasenübergänge in stark korrelierten Elektronensystemen

Martin Ulmke

Handwritten text, possibly a title or header, appearing as two lines of cursive script.

Handwritten text, possibly a date or a short phrase, appearing as a single line of cursive script.

Main body of handwritten text, consisting of approximately 10-12 lines of cursive script, covering the lower half of the page.

INHALTSVERZEICHNIS

1	Einführung	5
1.1	Mikroskopische Modelle	7
1.2	Aufbau der Arbeit	10
2	Numerische Simulation fermionischer Systeme	13
2.1	Großkanonische Quanten-Monte-Carlo-Methode	14
2.1.1	Bemerkungen zur Monte-Carlo-Simulation	14
2.1.2	Trotter-Suzuki-Zerlegung	15
2.1.3	Hubbard-Stratonovich-Transformation	17
2.1.4	Berechnung von Observablen	18
2.2	Numerische Behandlung	20
2.2.1	Stabilisierung und Beschleunigung	21
2.3	Eigenschaften und Tests	24
2.3.1	Vergleich mit exakten Resultaten	24
2.3.2	Trotter-Diskretisierung	25
2.3.3	Das Vorzeichenproblem	27
2.4	Eine Anwendung: Das Hubbardmodell auf Fullerenen	32
2.5	Verwandte numerische Methoden	34
2.5.1	Projektor-Verfahren	34
2.5.2	Weltlinien-Verfahren	35
2.5.3	Quanten-Monte-Carlo-Verfahren nach Handscomb	37
2.5.4	Stochastische Diagonalisierung	38
2.6	Diskussion	38
3	Zwei-Niveau-Systeme	41
3.1	Hartree-Fock-Näherung	44
3.1.1	Berechnung der Selbstkonsistenzgleichungen	46
3.1.2	Phasenübergang zweiter Ordnung	47
3.1.3	Phasenübergang erster Ordnung	50
3.2	Monte-Carlo-Simulation	54

INHALTSVERZEICHNIS

3.2.1	Weltlinienformulierung der TLS	54
3.2.2	Homogene Phase	56
3.2.3	Gebrochene Phase	57
3.2.3.1	Ladungsdichte- vs. Spindichtewellen	58
3.2.3.2	Resultate abseits halber Bandfüllung	61
3.2.3.3	Bestimmung der kritischen Temperatur	62
3.2.4	Limes hoher Dimensionen	63
3.3	Diskussion	65
4	Limes hoher Dimensionen	67
4.1	Anderson-Hubbard-Modell	69
4.2	Freie Energie im Limes $d = \infty$	70
4.2.1	Zusammenhang mit der „coherent potential approximation“	72
4.2.2	Zusammenhang mit Störstellenmodellen	72
4.3	Selbstkonsistenzgleichungen in der gebrochenen Phase	74
4.4	Bestimmung von Suszeptibilitäten	76
4.5	Numerische Behandlung	78
4.6	Ergebnisse	82
4.6.1	Unordnungsverteilungen	82
4.6.2	Antiferromagnetisches Phasendiagramm	84
4.6.3	Metall-Isolator-Übergänge	92
4.6.4	Metallisches Verhalten in der Nähe des magnetischen Übergangs	95
4.7	Metamagnetismus im Hubbardmodell	98
4.8	Das fcc-Gitter in unendlichen Dimensionen	100
5	Zusammenfassung	103
5.1	Zu den Methoden	103
5.2	Zu den Zwei-Niveau-Systemen	104
5.3	Zur Unordnung	105
A	Zur Grassmannndarstellung der Zustandssumme	107
B	Zur numerischen Behandlung des Limes $d = \infty$	110
B.1	Glättung der diskretisierten Greenfunktion	110
B.2	Berechnung von Suszeptibilitäten	112
C	Zur Hartree-Fock-Näherung mit Unordnung	114
D	Einige Unterprogramme für die Behandlung in $d = \infty$	118

INHALTSVERZEICHNIS

Abbildungsverzeichnis	125
Abkürzungsverzeichnis	127
Literaturverzeichnis	128
Veröffentlichungen	135
Danksagung	136

INHALTSVERZEICHNIS

1. EINFÜHRUNG

Bilden Atome oder Moleküle einen Festkörper mit einer periodischen Gitterstruktur, so überlappen sich die lokalisierten elektronischen Zustände und breiten sich ähnlich wie ebene Wellen über das gesamte Gitter aus. Dieser von F. Bloch [Blo28] bereits 1928 aufgezeigte Mechanismus ist dafür verantwortlich, daß die Elektronen im Kristall „fließen“, ihn also elektrisch leitend machen können. Das resultierende Energiespektrum weist eine Bandstruktur auf, wobei man die durch sogenannte *Bandlücken* getrennten verschiedenen Energiebänder in der Regel den ursprünglichen atomaren Orbitalen zuordnen kann. Die Elektronen der energetisch tiefliegenden Orbitale bleiben wegen der hohen Energiebarriere praktisch fest gebunden, nur die Elektronen der hochliegenden Bänder sind effektiv beweglich. Diese bestimmen wesentliche Eigenschaften des Festkörpers, insbesondere sein metallisches Verhalten.

Neben dem Ladungstransport sind die beweglichen Elektronen aber auch für magnetische Eigenschaften von Festkörpern, wie dem Ferromagnetismus der $3d$ -Übergangsmetalle *Fe*, *Co* und *Ni* und dem Antiferromagnetismus von *Cr* und *Mn* in der gleichen Reihe, verantwortlich. (Für einen Überblick siehe [Mat81].) Zur Erklärung dieses *Bandmagnetismus* ist die Berücksichtigung der Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen erforderlich. Seit langem ist bekannt, daß der Magnetismus nicht durch magnetische sondern elektrostatische Wechselwirkungen in Verbindung mit dem Pauli-Prinzip hervorgerufen wird. Unter welchen Bedingungen in Systemen beweglicher Elektronen welche Art von magnetischer Ordnung auftreten kann, ist aber bis heute weitgehend unverstanden.

Im Bereich der Transporteigenschaften ist insbesondere das Verschwinden der Leitfähigkeit, der *Metall-Isolator-Übergang* von Interesse¹. Während im oben skizzierten Bändermodell bei ungerader Anzahl von Elektronen pro Elementarzelle wegen des nur teilweise gefüllten Leitungsbandes stets ein Metall vorliegt, ist dies in realen Substanzen, nicht immer der Fall. Beispiele sind die Legierungen *NiO*, welches unterhalb von 250°C zu einem antiferromagnetischen Isolator wird, und *VO₂*, das in Abhängigkeit vom Druck und der Temperatur einen wechselwirkungsinduzierten Metall-Isolator-Übergang, den sog. *Mott-Hubbard-Übergang*, zeigt. (Eine Übersicht über verschiedene Metall-Isolator-Übergänge

¹Das Wort *Isolator* wird hier im Sinne von *Nicht-Metall* gebraucht. Es schließt daher auch *Halbleiter* ein, bei denen die Leitfähigkeit erst im Grundzustand verschwindet, bei endlichen Temperaturen aber exponentiell unterdrückt ist.

gibt [Mott90].) Auch hochtemperatur-supraleitende Materialien, die im undotierten Fall antiferromagnetische Isolatoren sind, reihen sich hier ein. Der Metall-Isolator-Übergang durch die antiferromagnetische Instabilität ist einfach zu verstehen, da hier durch die Symmetriebrechung die Brillouin-Zone halbiert, und das Leitungsband aufgespalten wird. Liegt die Fermienergie innerhalb der Bandlücke, ist das System isolierend. Symmetriebrechungen können durch die Wechselwirkung der Elektronen untereinander oder durch Kopplung an die Ionen des Kristalls, d.h. an phononische Freiheitsgrade, vermittelt werden. Beide Mechanismen für Symmetriebrechung sowie der Mott-Hubbard-Übergang sind Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

Weiter kann das metallische Verhalten durch *Unordnung* zerstört werden [And58]. Ausgehend vom perfekten Kristall unterscheidet man zwei Typen von Unordnung: Zum einen *topologische Unordnung*, bei der die Periodizität in den Bindungen gestört ist. Beispiele hierfür sind amorphe Metalle und Gläser. Zum anderen *Besetzungsunordnung*, bei der verschiedene Atom- oder Molekülsorten zufällig auf den Gitterplätzen verteilt sind, wie es in Legierungen der Fall ist. In beiden Fällen gilt das Theorem von Bloch durch den Verlust der Periodizität nicht mehr; die elektronischen Wellenfunktionen verlieren durch Streuprozesse ihre Phasenkohärenz, bleiben bei schwacher Unordnung aber ausgedehnt. Diese Streuung, die in allen Festkörpern mehr oder weniger stark vorhanden ist, führt zu einer diffusiven Elektronenbewegung und ist dafür verantwortlich, daß die Leitfähigkeit in Metallen auch im Grundzustand endlich bleibt. Bei hinreichend starker Unordnung werden die Wellenfunktionen dagegen *lokalisiert*. Dabei werden mit wachsender Unordnungsstärke die Zustände von den Bandkanten aus zur Mitte des Bandes hin lokalisiert. Erreicht der lokalisierte Bereich die Fermieenergie, findet ein Metall-Isolator-Übergang, der *Anderson-Übergang*, statt. (Eine Übersicht zum Lokalisierungsproblem in elektronischen Systemen findet sich in [Lee85].)

Nun ist auch in ungeordneten Substanzen stets die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen vorhanden und kann im allgemeinen nicht vernachlässigt werden. Auf der anderen Seite sind die meisten Legierungen, die einen Metall-Isolator-Übergang aufweisen, ungeordnet, so daß ein reiner Mott-Hubbard-Übergang ebenfalls nicht zu erwarten ist. Vielmehr liegt in realen Substanzen elektronische Wechselwirkung und Unordnung gleichzeitig vor, und es ist oft schwierig bzw. unmöglich, beide Effekte voneinander zu trennen. Ihr Zusammenspiel ist Gegenstand intensiver Forschungen. Der theoretische Zugang besteht in erster Linie in der Abbildung des Problems auf eine Feldtheorie und anschließender Anwendung von Methoden der Renormierungsgruppe [Fin83, Cas84]. Ein schwerwiegendes Problem ist hier das Auftreten eines magnetischen Übergangs vor Erreichen des Metall-Isolator-Übergangs, das zu Instabilitäten in der Renormierungsgruppen-Behandlung führt [Cas84a, Fin84, Cas87]. Die Anwendbarkeit des obigen Ansatzes bei mittleren und star-

ken Wechselwirkungen in der Nähe der halben Bandfüllung ist daher sehr fraglich. Eine aktuelle Übersicht über den Metall-Isolator-Übergang in ungeordneten, wechselwirkenden Systemen wird in [Bel94] gegeben. In der vorliegenden Arbeit wird das Problem im Rahmen des *Anderson-Hubbardmodells* (s.u.) im „mean-field“-Limes hoher Dimensionen untersucht.

1.1. Mikroskopische Modelle

Die Untersuchung wechselwirkender Elektronen stellt ebenso wie die ungeordneter elektronischer Systeme ein hochinteressantes aber ebenso komplexes Problem dar. Umso mehr gilt dies bei gleichzeitiger Anwesenheit von Wechselwirkung und Unordnung. Ein möglicher Zugang besteht in der Behandlung stark vereinfachender mikroskopischer Modelle. Diese können natürlich nicht die Eigenschaften konkreter Materialien quantitativ beschreiben, sondern sollen vielmehr zu einem besseren Verständnis grundlegender qualitativer Phänomene beitragen.

Das einfachste Modell wechselwirkender Elektronen auf dem Gitter ist das *Hubbardmodell* [Gut63, Hub63, Kan63]. Es lautet in der üblichen Darstellung in zweiter Quantisierung:

$$\hat{H}_{Hub} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \quad (1.1)$$

Dabei erzeugt bzw. vernichtet $\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}$ bzw. $\hat{c}_{i\sigma}$ ein Elektron mit Spin σ im *Wannierzustand* (siehe z.B. [Ric88]) am Gitterplatz R_i . Der Operator $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i\sigma}$ zählt die Elektronen mit Spin σ am Ort R_i , und μ ist das chemische Potential. Der erste Beitrag beschreibt Hüpfen von Elektronen zwischen Gitterplätzen und damit die kinetische Energie der Elektronen. Die spitzen Klammern deuten dabei an, daß nur über benachbarte Gitterplätze summiert wird. Der kinetische Anteil wird durch Fouriertransformation im Impulsraum diagonal. Für ein d -dimensionales einfach kubisches Gitter mit N Plätzen erhalten wir:

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} = \sum_{q\sigma} \varepsilon_q \hat{n}_{q\sigma} \quad (1.2)$$

mit $\hat{n}_{q\sigma} = \hat{a}_{q\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{q\sigma}$ und

$$\varepsilon_q = -2t \sum_{j=1}^d \cos q_j, \quad \hat{a}_{q\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{iqR_j} \hat{c}_{j\sigma}. \quad (1.3)$$

(q_i sind die Komponenten des Impulsvektors q .) (1.1) wurde zur Erklärung des oben erwähnten Magnetismus in $3d$ -Übergangsmetallen eingeführt und auch zur Untersuchung des Metall-Isolator-Übergangs herangezogen. d -Bänder sind schmal, d.h. das Verhältnis von Wechselwirkungsstärke und Bandbreite ist groß, weshalb Korrelationseffekte durch die

Wechselwirkung wichtig werden. Weiter sind die d -Orbitale räumlich nicht sehr ausgeht, ihr Überlapp ist daher gering. Deshalb ist einerseits die Coulomb-Wechselwirkung kurzreichweitig – im Hubbardmodell wird sie als rein lokal angenommen –, andererseits können längerreichweitige Hüpfprozesse vernachlässigt werden. Als wesentliche Vereinfachung ignoriert (1.1) die Entartung der d -Orbitale und beschränkt sich auf ein einziges Band (s -Band).

Das Hubbardmodell wie insgesamt die Physik stark korrelierter Fermionen erfreut sich heute wieder größter Beliebtheit. Es wurde über den ursprünglichen Anwendungsbereich hinaus u.a. auch zur Beschreibung der Eigenschaften sogenannter *schwerer Fermionen*-Verbindungen (f -Übergangsmetallegierungen) [Czy86] sowie der Hochtemperatur-Supraleiter [And87] herangezogen.

Trotz seiner einfachen Form ist die Behandlung dieses quantenmechanischen Vielteilchenproblems sehr schwierig und es liegen nur wenige exakte Resultate über das Hubbardmodell vor. Hier sollen nur einige für die vorliegende Arbeit wichtige Resultate wiedergegeben werden. Eine Sammlung von Originalarbeiten findet sich in [Mon92]; eine schöne Einführung in die Physik des Hubbardmodells wird in [vDon90] gegeben.

- Die exakte Lösung für den eindimensionalen Fall wurde von Lieb und Wu durch die Bethe-Ansatz-Methode gefunden [Lieb68]. Der Grundzustand ist bei halber Bandfüllung (mittlere Dichte $n = 1$) für jedes positive U ein Isolator mit algebraisch abfallenden antiferromagnetischen Korrelationen. Für $n \neq 1$ ist das System ein paramagnetischer Leiter.
- Das Theorem von Mermin und Wagner [Mer66] schließt im ein- und zweidimensionalen Fall für isotropen Spin magnetische Ordnung bei endlichen Temperaturen aus.
- Im Fall $U/t \rightarrow \infty$ ist nach dem Nagaoka-Theorem der Grundzustand im halb gefüllten Band mit einem zusätzlichen Elektron ein voll polarisierter Ferromagnet [Nag66]. (Dazu ausführlicher in Kapitel 4.8.)
- Lieb konnte weiter den Spin im Grundzustand bei halber Bandfüllung und $U > 0$ auf beliebigen paaren Gittern² mit gerader Anzahl von Gitterplätzen bestimmen [Lieb89]. Er ist gerade gleich der halben Differenz der Mächtigkeit der beiden Untergitter. Speziell ist der Grundzustand auf dem einfach kubischen und dem bcc -Gitter im thermodynamischen Limes ein Singlett.

²Ein paares Gitter (engl.: bipartite lattice) besteht aus zwei Untergittern, wobei benachbarte Gitterplätze stets zu verschiedenen Untergittern gehören.

- Schließlich kann das Hubbardmodell im Limes starker Kopplung durch eine kanonische Transformation [Har67] störungstheoretisch auf das sogenannte t - J -Modell abgebildet werden, dessen Hamiltonoperator lautet:

$$\hat{H}_{t-J} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i \hat{S}_j \quad (1.4)$$

Dabei ist $J = t^2/U$ eine antiferromagnetische Kopplung zwischen benachbarten Spins. Sie entsteht durch virtuelles Hüpfen eines Elektrons auf einen besetzten Gitterplatz, was zu dem Energienenner U führt. Die nächsthöhere Korrektur ist von der Ordnung $\mathcal{O}(t^3/U^2)$. Die Spins $\hat{S}_i$ haben die drei Komponenten

$$\hat{S}_i^{\alpha} = \sum_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha} \hat{c}_{i\sigma'} \quad (1.5)$$

mit den Pauli-Matrizen τ^{α} und $\alpha \in \{x, y, z\}$. Die Fermionen-Operatoren sind hierbei im Unterraum der einfach besetzten Gitterplätze zu betrachten. Die Darstellung (1.4) ist genaugenommen nur für kleine Löcherkonzentration gültig. Verschwindet diese ganz, also im Fall der halben Bandfüllung, sind reale Hüpfprozesse unmöglich, weshalb der kinetische Anteil entfällt, und (1.4) sich auf das antiferromagnetische Heisenbergmodell reduziert. Tatsächlich zeigt sich, daß das Hubbardmodell, obwohl vor allem für den Band-Ferromagnetismus eingeführt, auch bei schwacher Wechselwirkung eine starke Neigung zum Antiferromagnetismus zeigt.

Das Hubbardmodell ist natürlich offen für Erweiterungen, wie Hüpfprozesse zu übernächsten Nachbarn, längerreichweitige Wechselwirkungen, zusätzliche Ankopplung an äußere Freiheitsgrade (z.B. Phononen) und vieles mehr.

Das zweite elementare Modell, das Gegenstand dieser Arbeit ist, ist das Andersonmodell der Unordnung [And58]:

$$\hat{H}_{And} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} (\epsilon_i - \mu) \hat{n}_{i\sigma} \quad (1.6)$$

Der erste Beitrag liefert wieder die kinetische Energie, wobei die Hüpfparameter jetzt durch die Unordnung einer Zufallsverteilung unterliegen. Außerdem sind die atomaren Potentiale zufällig verteilt, wie es z.B. in einer ungeordneten Legierung der Fall ist. Wir haben dabei noch die Freiheit, die Art der Verteilungen zu wählen. So entspricht eine zweiwertige Verteilung der lokalen Potentiale z.B. einer binären Legierung. Wie bereits oben erwähnt führt eine hinreichende starke Unordnung zu einer Lokalisierung von vormals ausgedehnten elektronischen Zuständen und schließlich zu einem Metall-Isolator-Übergang, wenn die Zustände an der Fermikante lokalisiert werden. Dies ist ein Ergebnis der Skalentheorie

der Unordnung [Abr79], die für den ein- und den zweidimensionalen Fall eine vollständige Lokalisierung bei beliebig schwacher Unordnung vorhersagt. Ein anderer, älterer Zugang zu ungeordneten Systemen ist die „coherent potential approximation“ (CPA), die sehr erfolgreich auf Legierungen und Kristalle mit Störstellen angewandt worden ist (siehe [Ell74, Zim79]). Da die CPA eine *lokale Näherung*, ist, kann sie keine Andersonlokalisierung beschreiben, alle Zustände bleiben ausgedehnt. Dennoch beschreibt sie, angewandt etwa auf Modell (1.6), Metall-Isolator-Übergänge, bei denen nicht die Ladungsträger immobil werden, sondern ihre Konzentration aufgrund einer unordnungsinduzierten Bandlücke verschwindet. Auf die CPA wird im Kapitel 4 im Zusammenhang mit dem Limes hoher Dimensionen noch zurückgekommen werden.

Eine Kombination von Modell (1.1) und (1.6), das *Anderson-Hubbardmodell*, stellt das einfachste mikroskopische elektronische Modell dar, das Korrelationen sowohl durch die elektronische Wechselwirkung als auch durch Unordnung enthält. Der Hamiltonoperator sei der Vollständigkeit halber noch einmal explizit angegeben:

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} (\epsilon_i - \mu) \hat{n}_{i\sigma}. \quad (1.7)$$

In der vorliegenden Arbeit werden wir uns auf Unordnung in den lokalen Potentialen ϵ_i , *diagonale Unordnung* genannt, beschränken.

1.2. Aufbau der Arbeit

Die Arbeit hat drei inhaltliche Schwerpunkte. In Kapitel 2 wird ein Verfahren zur Simulation endlicher Systeme stark korrelierter Fermionen vorgestellt. Es handelt sich dabei um das sog. *Großkanonische Quanten-Monte-Carlo-Verfahren* (GQMC) [Bla81, Scp81, Hir83], welches Eigenschaften bei endlichen Temperaturen berechnet. Es wird ein effizienter und numerisch stabiler Algorithmus zur Berechnung von Einteilchen-Greenfunktionen dargestellt. Das Verfahren wurde gegen exakte Diagonalisierung und vollständige Summation der Hilfsfeld-Konfigurationen getestet. Es werden die Beschränkungen von Fermionensimulationen in Systemgröße und inverser Temperatur, insbesondere das Vorzeichenproblem, diskutiert, und schließlich werden verwandte numerischen Methoden skizziert und mit dem GQMC verglichen.

Kapitel 3 beschäftigt sich mit einer Erweiterung des Hubbardmodells durch Ankopplung an lokale Zwei-Niveau-Systeme. Das Modell wird im Rahmen einer Hartree-Fock-Näherung sowie mit einem erweiterten GQMC-Verfahren behandelt. Schwerpunkt der Untersuchungen ist dabei die Symmetriebrechung durch Bildung einer kommensurablen Ladungsdichtewelle bei halber Bandfüllung mit einem einhergehenden Metall-Isolator-Übergang.

In Kapitel 4 betrachten wir das Anderson-Hubbardmodell im Limes hoher Dimensionen. Dieser liefert eine dynamische „mean-field“-Theorie; das selbstkonsistente lokale Problem wird wiederum mittels einer Monte-Carlo-Methode behandelt. Nach einer Darstellung der selbstkonsistenten Berechnung des lokalen Einteilchen-Propagators sowie von statischen Suszeptibilitäten bestimmen wir einerseits die Stabilität der antiferromagnetischen Phase gegen Unordnung und andererseits den Einfluß von Unordnung und Wechselwirkung auf das metallische Verhalten. Um die Rolle der Unordnungsverteilung zu untersuchen, wird dabei eine zweiwertige sowie eine kontinuierliche Unordnungsverteilung gewählt. Schließlich werden Ergebnisse zum Metamagnetismus im Hubbardmodell im äußeren Magnetfeld und zum Ferromagnetismus beim *fcc*-Gitter in Limes hoher Dimensionen für den Fall ohne Unordnung vorgestellt.

Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem kurzen Ausblick in Kapitel 5.

KAPITEL 1. EINFÜHRUNG

Das Buch ist in drei Teile gegliedert. Der erste Teil enthält die Grundlagen der Theorie der Differentialgleichungen. Der zweite Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Physik. Der dritte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Chemie. Der vierte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Biologie. Der fünfte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Medizin. Der sechste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Technik. Der siebte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Wirtschaft. Der achte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kunst. Der neunte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Literatur. Der zehnte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Philosophie. Der elfte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Religion. Der zwölfte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Politik. Der dreizehnte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Ethik. Der vierzehnte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Ästhetik. Der fünfzehnte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Pädagogik. Der sechzehnte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Psychologie. Der siebzehnte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Soziologie. Der achtzehnte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Anthropologie. Der neunzehnte Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kosmologie. Der zwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Astronomie. Der einundzwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Geographie. Der zweiundzwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Meteorologie. Der dreiundzwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Klimatologie. Der vierundzwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Ozeanographie. Der fünfundzwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Hydrologie. Der sechsundzwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Geologie. Der siebenundzwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Paläontologie. Der achtundzwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Archäologie. Der neunundzwanzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Ethnologie. Der dreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Linguistik. Der einunddreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Literaturwissenschaft. Der zweiunddreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kunstwissenschaft. Der dreiunddreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Musikwissenschaft. Der vierunddreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Theaterwissenschaft. Der fünfunddreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Filmwissenschaft. Der sechsunddreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Medienwissenschaft. Der siebenunddreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kommunikationswissenschaft. Der achtunddreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Informationswissenschaft. Der neununddreißigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Rechtswissenschaft. Der vierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Politikwissenschaft. Der einundvierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Soziologie. Der zweiundvierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Anthropologie. Der dreiundvierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kosmologie. Der vierundvierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Astronomie. Der fünfundvierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Geographie. Der sechsundvierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Meteorologie. Der siebenundvierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Klimatologie. Der achtundvierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Ozeanographie. Der neunundvierzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Hydrologie. Der fünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Geologie. Der einundfünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Paläontologie. Der zweiundfünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Archäologie. Der dreiundfünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Ethnologie. Der vierundfünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Linguistik. Der fünfundfünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Literaturwissenschaft. Der sechsundfünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kunstwissenschaft. Der siebenundfünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Musikwissenschaft. Der achtundfünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Theaterwissenschaft. Der neunundfünfzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Filmwissenschaft. Der sechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Medienwissenschaft. Der einundsechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kommunikationswissenschaft. Der zweiundsechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Informationswissenschaft. Der dreiundsechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Rechtswissenschaft. Der vierundsechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Politikwissenschaft. Der fünfundsechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Soziologie. Der sechsundsechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Anthropologie. Der siebenundsechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kosmologie. Der achtundsechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Astronomie. Der neunundsechzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Geographie. Der siebenzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Meteorologie. Der einundsiebzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Klimatologie. Der zweiundsiebzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Ozeanographie. Der dreiundsiebzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Hydrologie. Der vierundsiebzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Geologie. Der fünfundsiebzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Paläontologie. Der sechsundsiebzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Archäologie. Der siebenundsiebzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Ethnologie. Der achtundsiebzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Linguistik. Der neunundsiebzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Literaturwissenschaft. Der achtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kunstwissenschaft. Der einundachtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Musikwissenschaft. Der zweiundachtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Theaterwissenschaft. Der dreiundachtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Filmwissenschaft. Der vierundachtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Medienwissenschaft. Der fünfundachtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kommunikationswissenschaft. Der sechsundachtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Informationswissenschaft. Der siebenundachtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Rechtswissenschaft. Der achtundachtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Politikwissenschaft. Der neunundachtzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Soziologie. Der neunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Anthropologie. Der einundneunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Kosmologie. Der zweiundneunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Astronomie. Der dreiundneunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Geographie. Der vierundneunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Meteorologie. Der fünfundneunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Klimatologie. Der sechsundneunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Ozeanographie. Der siebenundneunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Hydrologie. Der achtundneunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Geologie. Der neunundneunzigste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Paläontologie. Der hundertste Teil enthält die Anwendungen der Theorie auf die Archäologie.

2. NUMERISCHE SIMULATION FERMIONISCHER SYSTEME

Die Behandlung stark korrelierter fermionischer Systeme stellt eine große Herausforderung an den theoretischen Physiker dar. Die Fermionen sind einerseits beweglich, d.h. sie weisen eine Bandstruktur auf, auf der anderen Seite unterliegen sie einer stark abgeschirmten Wechselwirkung. Für das Hubbardmodell drückt sich diese Tatsache darin aus, daß der kinetische Anteil des Hamiltonoperators im Impulsraum diagonal ist, der Wechselwirkungsanteil dagegen im Ortsraum. Die besonders interessanten Phänomene sind dabei in einem Parameterbereich zu erwarten, in dem beide Effekte von ähnlicher Größenordnung sind. Daher sind Störungstheorien nur sehr begrenzt anwendbar. Die Beschreibung in einem effektiven Einteilchen-Bild – im einfachsten Fall die Hartree-Fock-Näherung (HFN), oder die für Bandstrukturechnungen sehr erfolgreich eingesetzte Näherung der lokalen Dichte (LDA) [Jon89] – berücksichtigt nicht hinreichend die Korrelationseffekte durch die starke, lokale Wechselwirkung und die Unordnung. Andere analytische Näherungsmethoden sind i.d.R. unkontrolliert oder nur in sehr speziellen Fällen anwendbar.

Ein anderes Werkzeug zur Untersuchung von Modellen wechselwirkender Vielteilchensysteme ist die numerische Behandlung endlicher Systeme. Sie kann dabei helfen, einerseits die Qualität von analytischen Näherungsrechnungen zu bestimmen, andererseits die Eigenschaften der Modelle auch in für Näherungsmethoden nicht zugänglichen Parameterbereichen zu untersuchen. Die beiden Verbindungen von Modell und analytischen Methoden einerseits und von Modell und der interessierenden Physik andererseits sind wesentliche Schritte für die Theoriebildung.

Es gibt prinzipiell zwei Methoden zur Untersuchung endlicher Systeme: zum einen die exakte Diagonalisierung, zum anderen die Monte-Carlo-(MC-)Simulation. Die erstere eignet sich besonders gut zur Bestimmung von Grundzustandseigenschaften und hat den Vorteil, numerisch exakte Resultate zu liefern. Auf der anderen Seite ist die Systemgröße wegen des exponentiell ansteigenden Rechenaufwands und Speicherplatzbedarfs stark beschränkt. Größere Systeme (Größenordnung: 100 Gitterplätze für fermionische Systeme) lassen sich mit Simulationen behandeln. Die Resultate sind nur bis auf statistische Fehler und evtl. weitere systematische Fehler exakt. Weiter bereitet die Anwendung auf tiefe Temperaturen numerische Schwierigkeiten, worauf in diesem Kapitel noch näher eingegangen

wird.

2.1. Großkanonische Quanten-Monte-Carlo-Methode

Für die Simulation von Gittermodellen wechselwirkender Elektronen in der Festkörperphysik werden heute im wesentlichen zwei Methoden angewandt: das Projektor-Quanten-Monte-(PQMC-)Verfahren sowie das großkanonische Quanten-Monte-(GQMC-)Verfahren. Darüber hinaus gibt es noch Weltlinien-Verfahren, die aber für fermionische Systeme nur sehr begrenzt einzusetzen sind. Eine recht neue Methode ist die numerische Diagonalisierung großer Matrizen mittels MC-Simulation.

Die GQMC-Methode berechnet Eigenschaften bei endlichen Temperaturen mit thermisch variabler Teilchenzahl. Es wurde für das Hubbardmodell zuerst von J. E. Hirsch [Hir83, Hir85] angewandt. Das Prinzip, sowie einige technische Details und Verbesserungen sollen im folgenden dargestellt werden. Ein Vergleich mit anderen Methoden findet im letzten Abschnitt dieses Kapitels statt. Interessierten seien die folgenden Übersichtsartikel empfohlen, die einen guten Überblick über die Methoden und die umfangreiche Literatur geben: [dRae85, Suz86, dRae92].

2.1.1. Bemerkungen zur Monte-Carlo-Simulation

Aus Gründen der Klarheit sollen hier kurz die wesentlichen Merkmale von thermodynamischen Monte-Carlo-(MC-)Simulationen skizziert werden. Eine ausführliche Behandlung findet sich z.B. in [Bin86]. Das Ziel ist die Berechnung thermischer Erwartungswerte

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

Dabei beschreibt x eine Konfiguration des Systems, O ist eine physikalische Größe von Interesse und $P(x) = \exp(-\beta E(x))$ ist die Boltzmannverteilung, die als Gewichtungsfaktor dient. $E(x)$ ist der Wert der Energie im Zustand x , $\beta = 1/T$ die inverse Temperatur¹ und Z die Zustandssumme.

Das Prinzip des MC-Verfahrens ist nun, anstatt über alle möglichen Konfigurationen x zu integrieren, diese mit einer Wahrscheinlichkeit proportional zu $P(x)$ zu erzeugen. Man „tastet“ sozusagen nur den thermodynamisch relevanten Bereich des Phasenraumes „ab“. Dieses, *importance sampling* genannte, Prinzip kann wie folgt realisiert werden: Ausgehend von einer Startkonfiguration x_0 wird ein neuer Zustand x_1 erzeugt, und die Energiedifferenz $\Delta E = E(x_1) - E(x_0)$ berechnet. x_1 wird nun mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit $W(x_0 \rightarrow x_1)$ akzeptiert, und dient dann (und nur dann) als Ausgangskonfiguration für

¹Hier, wie im folgenden, wird die Boltzmannkonstante $k_B \equiv 1$ gesetzt

den nächsten, analogen MC-Schritt. Erfüllt W nun die Bedingung des *detaillierten Gleichgewichts* :

$$P(x_0)W(x_0 \rightarrow x_1) = P(x_1)W(x_1 \rightarrow x_0) , \quad (2.2)$$

so konvergiert die Verteilung der Konfigurationen gegen die gewünschte Funktion $P(x)$. Der Mittelwert von O , der aus einer Anzahl M so erzeugter Konfigurationen gebildet wird, konvergiert nach dem zentralen Grenzwertsatz für $M \rightarrow \infty$ gegen den Erwartungswert $\langle O \rangle$ mit einer Varianz $\propto M^{-1}$.^{2 3} Die Methode der MC-Simulation läßt einem große Freiheit, die Konfigurationen x des Systems auf verschiedene Weise zu definieren. So können benachbarte Punkte im Phasenraum im Orts- oder Impulsraum sehr weit auseinander liegen. Dies hat den Vorteil, daß bei geschickter Wahl der Koordinaten das System schnell zum thermischen Gleichgewicht relaxieren kann.

Wie kann das Konzept auf quantenmechanische Systeme angewandt werden?

Der thermodynamische Erwartungswert eines quantenmechanischen Operators ist definiert als

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \{ \hat{O} e^{-\beta \hat{H}} \} \quad (2.3)$$

$$Z = \text{Sp} \{ e^{-\beta \hat{H}} \} . \quad (2.4)$$

Dabei ist Z die Zustandssumme, und die Spur, $\text{Sp}\{\dots\} = \sum_{\Phi} \langle \Phi | \dots | \Phi \rangle$, ist definiert als Summe über einen vollständigen, normierten Satz von Zuständen $\{|\phi\rangle\}$. Da im Fall von Elektronen jedes Orbital vier Besetzungsmöglichkeiten hat – leer, einfach besetzt mit zwei Spinrichtungen und doppelt besetzt – gibt es für ein Gitter mit N Orbitalen, d.h. N Gitterplätzen im Hubbardmodell, im großkanonischen Ensemble 4^N Zustände.

Um das oben skizzierte Schema der MC-Simulation anwenden zu können, wäre es nun erforderlich, Erwartungswerte der Form $\langle \Phi | \exp(-\beta \hat{H}) | \Phi \rangle$ zu berechnen. Dies käme aber einer Diagonalisierung von $\hat{H}$ gleich, und wir bräuchten kein MC-Verfahren mehr anzuwenden; der Rechenaufwand würde exponentiell mit der Systemgröße ansteigen. Ein Ausweg besteht darin, das Modell formal auf ein effektives Einteilchenproblem abzubilden. Dies geschieht in zwei Schritten und wird in den folgenden Abschnitten beschrieben.

2.1.2. Trotter-Suzuki-Zerlegung

Wir schreiben den Hamiltonoperator des Anderson-Hubbardmodells wie folgt:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} \quad (2.5)$$

²Genaugenommen berechnet sich die Varianz aus der Anzahl *unabhängiger* Messungen, da aufeinanderfolgende Zustände i.a. statistisch korreliert sind.

³Zur Thermalisierung wird vor Beginn der Messungen eine Reihe von MC-Schritten durchgeführt.

$$\hat{K} = \sum_{ij\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger K_{ij}^\sigma \hat{c}_{j\sigma} \quad (2.6)$$

$$\hat{V} = U \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(\hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}) \quad (2.7)$$

$$K_{ij}^\sigma = t_{ij} + \delta_{ij}(\epsilon_i + \sigma\hbar - \mu). \quad (2.8)$$

Dabei sind alle Einteilchenterme durch Hpfen, Magnetfeld, chemisches Potential und lokale Unordnung in der Matrix K zusammengefat. In der Hubbard-Wechselwirkung wurden Einteilchenterme so eingefhrt, da nun fr $\mu = 0$ die Elektronendichte gleich eins ist, d.h. halbe Bandfllung vorliegt. $\hat{K}$ und $\hat{V}$ knnen einzeln leicht diagonalisiert und daher auch exponenziert werden. Da sie aber nicht vertauschen, faktorisiert das Exponential nicht. Fr kleine Argumente x im Exponenten gilt nherungsweise:

$$e^{x(\hat{V}+\hat{K})} = e^{x\hat{V}} e^{x\hat{K}} + \frac{1}{2}x^2[\hat{K}, \hat{V}] + \mathcal{O}(x^3). \quad (2.9)$$

Das ist die *Trotter-Zerlegung* in erster Ordnung [Tro59]. Zerlegungen hherer Ordnung wurden ebenfalls vorgeschlagen und verwendet [Suz76, dRae85, Suz86]. In Abschnitt 2.3.2 werden Ergebnisse fr Zerlegungen erster und zweiter Ordnung gezeigt.

Offensichtlich sind derartige Zerlegungen nur fr kleine Werte von x sinnvoll. Um sie trotzdem auch fr groe β verwenden zu knnen, wird das Intervall $(0, \beta)$ in L Abschnitte der Gre $\Delta\tau = \beta/L$ diskretisiert, und wir erhalten:

$$\begin{aligned} e^{-\beta\hat{H}} &= (e^{-\Delta\tau\hat{H}})^L = (e^{-\Delta\tau(\hat{V}+\hat{K})})^L \\ &= (e^{-\Delta\tau\hat{V}} e^{-\Delta\tau\hat{K}} + \frac{1}{2}\Delta\tau^2[\hat{K}, \hat{V}] + \mathcal{O}(\Delta\tau^3))^L \\ &= (e^{-\Delta\tau\hat{V}} e^{-\Delta\tau\hat{K}})^L + \frac{1}{2}\beta\Delta\tau[\hat{K}, \hat{V}] + \beta\mathcal{O}(\Delta\tau^2). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Bei der Spurbildung verschwindet allerdings der Fehler in der Ordnung $\Delta\tau$, denn die Spur ber ein Produkt ndert sich bei zyklischer Permutation der Faktoren nicht, weshalb ein Kommutator stets spurlos ist. Weiter ist die Spur ber das Produkt des antihermiteschen Kommutators $[\hat{K}, \hat{V}]$ und einer (hermiteschen) Observablen rein imaginr. Da der Erwartungswert der Observablen insgesamt reell sein mu, verschwindet daher auch ihre Korrektur in erster Ordnung in $\Delta\tau$.⁴

Wegen der formalen hnlichkeit mit dem Zeitentwicklungsoperator $\exp(-i\hat{H}t)$ spricht man auch vom „imaginren Zeitintervall“ $(0, \beta)$. Die Diskretisierung des Intervalls korrespondiert mit einem Abschneiden groer Matsubarafrequenzen: $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ ($n = -L/2, \dots, L/2-1$); d.h. es werden nur Frequenzen $|\omega_n| < \pi/\Delta\tau$ bercksichtigt.

⁴Dies gilt bei der MC-Simulation nur bis auf statistische Fehler, da die Spurbildung nicht exakt durchgefhrt wird; siehe aber Abschnitt 2.3.2.

2.1.3. Hubbard-Stratonovich-Transformation

Wir haben nun das Exponential des Hamiltonoperators in faktorisierter Form vorliegen. Der Wechselwirkungsanteil $\exp(-\Delta\tau\hat{V})$ faktorisiert weiter in den Gitterindizes und kann als quadratische Form geschrieben werden:

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau\hat{V}} &= \prod_{i=1}^N e^{-\Delta\tau U(\hat{n}_{i\uparrow}-\frac{1}{2})(\hat{n}_{i\downarrow}-\frac{1}{2})} \\ &= \prod_{i=1}^N e^{\Delta\tau U(\hat{n}_{i\uparrow}-\hat{n}_{i\downarrow})^2/2} e^{-\Delta\tau U/4}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Die quadratische Form kann wie üblich durch eine Gaußtransformation linearisiert werden:

$$e^{\Delta\tau U(\hat{n}_{i\uparrow}-\hat{n}_{i\downarrow})^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta\tau U}} \int_{-\infty}^{\infty} ds \exp\left[-\frac{s^2}{2\Delta\tau U} - (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})s\right]. \quad (2.12)$$

Physikalisch ausgedrückt wird die Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch eine Wechselwirkung der Elektronen mit einem klassischen äußerem Hilfsfeld s ersetzt. Im Falle von Fermionen auf dem Gitter genügt dafür ein zweiwertiges Hilfsfeld [Hir83]: Die quadratische Form enthält den Operator der lokalen Magnetisierung, $\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}$, die entweder gleich 0 oder ± 1 sein kann. Das Quadrat mißt daher den Betrag der Magnetisierung und hat die Projektoreigenschaft:

$$[(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})^2]^k = (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})^2 = \hat{n}_i - 2\hat{d}_i, \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.13)$$

mit den Dichte- und Doppelbesetzungsoperatoren $\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$ und $\hat{d}_i = \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$. Wie man im Vergleich der Taylorentwicklungen erkennt, kann damit das Exponential für positive Werte von U geschrieben werden:

$$e^{\Delta\tau U(\hat{n}_{i\uparrow}-\hat{n}_{i\downarrow})^2/2} = \cosh(\lambda(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})) = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{s\lambda(\hat{n}_{i\uparrow}-\hat{n}_{i\downarrow})} \quad (2.14)$$

mit $\cosh(\lambda) = \exp(\Delta\tau U/2)$. Für negative U wird bei der Transformation die lokale Magnetisierung durch die auf halbe Bandfüllung normierte Dichte, $\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} - \hat{1}$, ersetzt. Die Quadrate der beiden Größen sind komplementär, so daß

$$(\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} - \hat{1})^2 = \hat{1} - (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})^2 = \hat{1} + 2\hat{d}_i - \hat{n}_i \quad (2.15)$$

offensichtlich ebenfalls ein Projektor ist. Die Exponentialform schreiben wir dann:

$$e^{-\Delta\tau U[\hat{1}-(\hat{n}_{i\uparrow}+\hat{n}_{i\downarrow}-\hat{1})^2]/2} = \frac{1}{2} e^{\Delta\tau U/2} \sum_{s=\pm 1} e^{s\lambda(\hat{n}_{i\uparrow}+\hat{n}_{i\downarrow}-\hat{1})} \quad (2.16)$$

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

Die Transformation (2.14) bzw. (2.16) wird *diskrete Hubbard-Stratonovich-(HS-)Transformation* genannt. Sie wird für jeden Gitterplatz, $i = 1, \dots, N$, sowie auch für jeden

Trotter-Schritt, $l = 1, \dots, L$, durchgeführt. Daraus resultiert ein Feld von zweiwertigen Variablen s_{il} , das im folgenden als *HS-Feld* bezeichnet wird. Die Elektronen bewegen sich quasi unabhängig in einem dynamischen, ortsabhängigen Potential, das durch die HS-Spins gebildet wird.

Das Exponential des Hamiltonoperators faktorisiert nun in den Elektronenspins $\sigma = \pm 1$, und wir erhalten schließlich bis auf konstante Vorfaktoren:

$$e^{-\beta \hat{H}} \approx \sum_{\{s_{il}\}} \prod_{\sigma} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta \tau \hat{V}^{\sigma}(l)} e^{-\Delta \tau \hat{K}^{\sigma}} \quad (2.17)$$

$$\hat{K}^{\sigma} = \sum_{i,j} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} K_{ij}^{\sigma} \hat{c}_{j\sigma} \quad , \quad K_{ij}^{\sigma} = t_{ij} + \delta_{ij}(\epsilon_i + \sigma h - \mu) \quad (2.18)$$

$$\hat{V}^{\sigma}(l) = \sum_{i,j} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} V_{ij}^{\sigma}(l) \hat{c}_{j\sigma} \quad , \quad V_{ij}^{\sigma}(l) = \delta_{ij} \sigma \lambda s_{il} \quad (2.19)$$

Es liegen nun nur noch bilineare Operatoren vor, so daß die Spur über die fermionischen Freiheitsgrade analytisch ausgeführt werden kann [Bla81, Hir85, dRae92]. In Anhang A wird eine elementare Herleitung mittels Grassmannvariablen dargestellt. Die Spurbildung liefert die Zustandssumme:

$$Z = \text{Sp } e^{-\beta \hat{H}} \approx \sum_{\{s_{il}\}} \prod_{\sigma} \det [I + \prod_{l=1}^L e^{-\Delta \tau \hat{V}^{\sigma}(l)} e^{-\Delta \tau \hat{K}^{\sigma}}] . \quad (2.20)$$

Die Dimension des Konfigurationsraums der HS-Spins ist mit 2^{NL} i.a. zwar größer als im ursprünglichen fermionischen Problem (4^N), doch ist das quantenmechanische Problem nun auf ein klassisches Spinproblem abgebildet worden, und wir können für die Summation über die Zustände des HS-Feldes übliche MC-Methoden anwenden.⁵ Das Produkt der Determinanten in (2.20) dient dabei als Boltzmannngewicht für eine gegebene Konfiguration $\{s_{il}\}$. Es sei noch bemerkt, daß Simulationen mit diskreten HS-Feldern sich als wesentlich effizienter herausgestellt haben als die mit kontinuierlichen Variablen [Hir83, Bue86].

2.1.4. Berechnung von Observablen

Hier soll nun dargestellt werden, wie die Bestimmung von Observablen und der Übergangswahrscheinlichkeiten erfolgt. Es werden zunächst einige Konventionen eingeführt:

$$\hat{B}^{\sigma}(l) \equiv e^{-\Delta \tau \hat{V}^{\sigma}(l)} e^{-\Delta \tau \hat{K}^{\sigma}} \quad , \quad B^{\sigma}(l) \equiv e^{-\Delta \tau V^{\sigma}(l)} e^{-\Delta \tau K^{\sigma}} . \quad (2.21)$$

Dabei unterscheidet das „Hut“-Symbol wieder die Operatoren im 4^N -dimensionalen Hilbertraum von den $N \times N$ -Matrizen. Im folgenden werden wir das zyklisch permutierte Produkt

$$A^{\sigma}(l) = B^{\sigma}(l) B^{\sigma}(l-1) \cdots B^{\sigma}(1) B^{\sigma}(L) B^{\sigma}(L-1) \cdots B^{\sigma}(l+1) \quad (2.22)$$

⁵Für sehr kleine Gitter - z.B. $N = 4, L \leq 6$ - kann auch eine vollständige Summation über alle Konfigurationen erfolgen. Dies ist vor allem für Testzwecke interessant (siehe Abschnitt 2.3).

benötigen. Damit kann die Zustandssumme (2.20) geschrieben werden als:

$$Z \approx \sum_{\{s_{il}\}} \prod_{\sigma} Z_f^{\sigma} \quad (2.23)$$

$$Z_f^{\sigma} = \text{Sp} \left\{ \prod_{l=1}^L \hat{B}^{\sigma}(l) \right\} = \det [I + A^{\sigma}(L)] . \quad (2.24)$$

$Z_f = Z_f^{\uparrow} Z_f^{\downarrow}$ ist die Zustandssumme über die fermionischen Freiheitsgrade für feste Konfiguration des HS-Feldes $\{s_{il}\}$. Mit $\langle \hat{O} \rangle_f$ wird der Erwartungswert bzgl. Z_f bezeichnet. Da die Operatoren $\hat{B}^{\sigma}(l)$ diagonal in den Elektronenspins sind, faktorisieren Erwartungswerte der Form $\langle \hat{A}_{\uparrow} \hat{B}_{\downarrow} \rangle_f = \langle \hat{A}_{\uparrow} \rangle_f \langle \hat{B}_{\downarrow} \rangle_f$.⁶ Weiter sind die Elektronen für festes HS-Feld unabhängig, weshalb das Wicksche und das Linked-Cluster-Theorem [Elk79] angewendet werden können.

Damit kann die Einteilchen-Greenfunktion berechnet werden, was analog zu der Berechnung der Zustandssumme erfolgt:

$$\begin{aligned} G_{ij}^{\sigma}(l, l') &\equiv -\langle \hat{c}_{i\sigma}(l\Delta\tau) \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger}(l'\Delta\tau) \rangle_f \\ &= -\langle \hat{B}^{\sigma}(L) \hat{B}^{\sigma}(L-1) \cdots \hat{B}^{\sigma}(l+1) \hat{c}_{i\sigma} \hat{B}^{\sigma}(l) \cdots \hat{B}^{\sigma}(l'+1) \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{B}^{\sigma}(l') \cdots \hat{B}^{\sigma}(1) \rangle_f \\ &= -[B^{\sigma}(l) B^{\sigma}(l-1) \cdots B^{\sigma}(l'+1) (I + A^{\sigma}(l))^{-1}]_{ij} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Ein Spezialfall ist die gleichzeitige Einteilchen-Greenfunktion:⁷

$$G_{ij}^{\sigma}(l, l) = -(I + A^{\sigma}(l))^{-1} . \quad (2.26)$$

Aus den Einteilchen-Greenfunktionen lassen sich mit dem Wickschen Theorem auch Zweiteilchen- (und höhere) Korrelationen berechnen, wie z.B. Doppelbesetzungsdichten, Strukturfaktoren sowie Suszeptibilitäten.

Im Prinzip ist nun das „Handwerkzeug“ für die MC-Simulation und die Bestimmung der Observablen vollständig. Allerdings müßten für jede Konfiguration des HS-Feldes das Produkt $A(L)$ und die Determinanten berechnet werden, was einen immensen Rechenaufwand bedeuten würde. Besser ist es, die Übergangswahrscheinlichkeiten aus den Einteilchen-Greenfunktionen zu bestimmen, und diese nach jedem Spin-Umklappprozeß (kurz: Spin-flip) mit einer zuerst in [Bla81] vorgeschlagenen Methode zu berechnen. Damit die folgenden Abschnitte zu verstehen sind, soll diese hier kurz erklärt werden:

Zunächst berechnet man das Produkt $A^{\sigma}(L)$. Dann geht man sukzessiv durch die Trotter-Schritte $l = 1, \dots, L$ und versucht, in jedem Schritt eine Anzahl $\propto N$ von HS-Spins umzuklappen. Die Matrix $A^{\sigma}(l)$ ändert sich mit dem Umklappen eines HS-Spins ($s_{il} \rightarrow s'_{il} = -s_{il}$) zu

$$A^{\sigma}(l)' = B^{\sigma}(l)' B^{\sigma}(l)^{-1} A^{\sigma}(l) = [I + \Delta^{\sigma}(i, l)] A^{\sigma}(l) . \quad (2.27)$$

⁶Die Faktorisierung gilt natürlich nicht mehr nach Summation über die HS-Spins.

⁷Erst nach der Summation über das HS-Feld werden die Greenfunktionen zeitlich translationsinvariant.

Dabei hat die Matrix $\Delta^\sigma(i, l)$ nur ein einziges nicht verschwindendes Element; ihre Komponenten lauten explizit:

$$\Delta^\sigma(i, l)_{jk} \equiv [B^\sigma(l)' B^\sigma(l)^{-1} - I]_{jk} = \delta_{jk} \delta_{ji} [\exp(2\sigma \lambda_{si}) - 1]. \quad (2.28)$$

Dabei ist i kein laufender Index, sondern bezeichnet den ausgewählten HS-Spin. Das Verhältnis der Determinanten wird

$$\begin{aligned} R^\sigma(i, l) &= \frac{\det[I + A^\sigma(l) + \Delta^\sigma(i, l) A^\sigma(l)]}{\det[I + A^\sigma(l)]} \\ &= \det[I + \Delta^\sigma(i, l) A^\sigma(l) (I + A^\sigma(l))^{-1}] \\ &= \det[I + \Delta^\sigma(i, l) (I + G^\sigma(l, l))] \end{aligned} \quad (2.29)$$

mit $G^\sigma(l, l)$ aus (2.26). Die Determinante kann leicht berechnet werden, und man erhält:

$$R^\sigma(i, l) = 1 + \Delta^\sigma(i, l)_{ii} [1 + G^\sigma(l, l)_{ii}] \quad (2.30)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit berechnet sich aus dem Produkt $R^\dagger(i, l) R^\dagger(i, l)$. Die neue Einteilchen-Greenfunktion ist ebenfalls einfach zu bestimmen gemäß:

$$\begin{aligned} G^\sigma(l, l)' &= -[I + A^\sigma(l)']^{-1} \\ &= G^\sigma(l, l) [I + \Delta^\sigma(i, l) (I + G^\sigma(l, l))]^{-1} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Die Inversion ist wegen der einfachen Struktur von $\Delta^\sigma(i, l)$ elementar, und wir erhalten für die Komponenten:

$$G^\sigma(l, l)'_{jk} = G^\sigma(l, l)_{jk} + \frac{G^\sigma(l, l)_{ji}}{R^\sigma(i, l)} \Delta^\sigma(i, l)_{ii} (\delta_{ik} + G^\sigma(l, l)_{ik}), \quad (2.32)$$

d.h. wir brauchen nur noch $\propto N^2$ Operationen zur Berechnung der neuen Greenfunktionen anstatt der $\propto LN^3$ für eine Berechnung gemäß (2.22) und (2.26).

Der Übergang zum nächsten Trotter-Schritt geschieht nach einer Anzahl von typischerweise N versuchten HS-Spinflips gemäß:

$$G^\sigma(l+1, l+1) = B^\sigma(l+1) G^\sigma(l, l) B^\sigma(l+1)^{-1}. \quad (2.33)$$

Diese Propagation führt allerdings zu einer Anhäufung von Rundungsfehler, so daß $G^\sigma(l, l)$ hin und wieder gemäß (2.26) neu berechnet werden muß.

2.2. Numerische Behandlung

Die Simulation läuft nun im Prinzip wie folgt ab: Zunächst wird für eine Startkonfiguration des HS-Feldes die Einteilchen-Greenfunktion $G^\sigma(0, 0) \equiv G^\sigma(L, L)$ nach (2.22) und (2.26)

berechnet. Für aufeinanderfolgende Trotter-Schritte, $l = 1, \dots, L$, werden jeweils $\propto N$ HS-Spinflips durchgeführt und gemäß der aus (2.30) bestimmten Übergangswahrscheinlichkeit akzeptiert bzw. verworfen. Im Falle der Akzeptanz ändern sich die Greenfunktionen nach (2.32). Zum nächsten Trotter-Schritt geht man dann mit der Transformation (2.33), wobei nach einer Anzahl von m Schritten $G^\sigma(l, l)$ neu aus dem HS-Feld nach (2.22) und (2.26) berechnet werden muß. Nach L Schritten ist ein *MC-Sweep* beendet. Nach einigen tausend MC-Sweeps zur Thermalisierung findet dann eine erstmalige Berechnung von Observablen statt. Anschließend werden die Observablen nach jedem MC-Sweep bestimmt, aufsummiert und schließlich gemittelt.

2.2.1. Stabilisierung und Beschleunigung

Eine wesentliche Schwierigkeit bei der Simulation von fermionischen Systemen besteht darin, hinreichend tiefe Temperaturen zu erreichen. „Hinreichend“ bedeutet dabei, daß die interessierenden Effekte wie Magnetismus oder Supraleitung, deren Energieskala oft viel kleiner als die Bandbreite bzw. die Fermienergie ist, noch beobachtet werden können. Die Eigenwerte der Fermionenmatrix, $I + A^\sigma(l)$ (2.22), die zu Zuständen niedriger Energie gehören, wachsen exponentiell mit der inversen Temperatur β an; andererseits gibt es Eigenwerte von der Größenordnung 1 von den Zuständen hoher Energie. Wegen der großen Bandbreite der Eigenwerte ist die Fermionenmatrix bei tiefen Temperaturen sehr schlecht konditioniert, und die Berechnung der Determinanten und der Einteilchen-Greenfunktion $G^\sigma(l, l)$ wird unmöglich. Der bisher vorgestellte Algorithmus ist aus diesem Grunde nur bis etwa $\beta \approx 4$ anwendbar (im zweidimensionalen Fall). Um das Verfahren auch auf tiefere Temperaturen anzuwenden, wurden zwei verschiedene Wege beschritten. Eine Möglichkeit besteht darin, das Matrixprodukt $A^\sigma(l)$ (2.22) nicht explizit zu berechnen, sondern aus Teilprodukten eine vergrößerte Fermionenmatrix zu bilden, die dann besser konditioniert ist [Whi88, Hir88]. Eine Verdopplung der Dimension erlaubt z.B. eine inverse Temperatur von $\beta = 10$. Wegen der erforderlichen Inversionen nimmt die Rechenzeit in diesem Verfahren bei tiefen Temperaturen allerdings stark zu.

Will man dagegen $A^\sigma(l)$ berechnen, so müssen die großen Eigenwerte von den kleinen getrennt werden, damit der Beitrag der letzteren nicht völlig verloren geht. Diese Trennung kann mit Orthogonalisierungsmethoden erreicht werden [Koo82, Sor88]. Für das GQMC-Verfahren sind diese erstmals in [Whi89, Loh89] verwendet worden.

Eine Anzahl m von Matrizen $B^\sigma(l)$ (2.21) kann ohne große Rundungsfehler miteinander multipliziert werden. Auf der anderen Seite stellt sich heraus, daß m auch etwa gleich der Anzahl von Matrixmultiplikationen (2.33) für die Propagation durch die Trotter-Schritte ist. D.h. nach m Schritten muß die Fermionenmatrix neu aus dem vollständigen Produkt

(2.22) berechnet werden. Zur Berechnung dieses Produktes werden Teilprodukte aus m Matrizen gebildet und in der Form UDV faktorisiert, wobei U und V hinreichend gut konditioniert sein sollen; D ist eine Diagonalmatrix. Die ideale Transformation dafür wäre eine Singulärwertzerlegung (*singular value decomposition*), bei der U und V orthogonal sind. Diese benötigt allerdings sehr viel Rechenzeit. Vorzuziehen ist daher eine modifizierte QR -Zerlegung, bei der die Dreiecksmatrix R anschließend durch D so normiert wird, daß ihre Diagonalelemente gleich 1 sind. U ist also die orthogonale Matrix Q , V ist die normierte Dreiecksmatrix. Für die QR -Zerlegung kann die Matrix z.B. zunächst durch Householdertransformationen auf Hessenbergform gebracht werden (siehe z.B. [Wil65]). Dieses Verfahren läuft auf Vektorrechnern sehr effektiv. Die Matrix V stellt sich dabei als „hinreichend gut konditioniert“ heraus, in dem Sinne, daß viele von ihnen ohne zu große Rundungsfehler miteinander multipliziert werden können.

Das Produkt UDV wird nun wie folgt mit einer weiteren Matrix M z.B. von links multipliziert [Whi89]:

$$MUDV = (MUD)V = (\tilde{U}\tilde{D}\tilde{V})V = \tilde{U}\tilde{D}\tilde{V}. \quad (2.34)$$

D.h. zunächst werden M , U und D multipliziert. Das Produkt kann wiederum stabil zerlegt werden, da D Spalten umskaliert, aber nicht mischt. Das Produkt der beiden Dreiecksmatrizen $\tilde{V}$ und V ist schließlich ebenfalls wieder eine Dreiecksmatrix.

Hier soll nun eine effektive Methode zur stabilen Berechnung von

$$G(l, l) = -[I + A(l)]^{-1}, \quad A(l) = B(l)B(l-1) \cdots B(1)B(L) \cdots B(l+1) \quad (2.35)$$

dargestellt werden [Loh89, Ulm92]. (Der Index σ wurde hier unterdrückt.) Wir benötigen dabei die Teilprodukte:

$$P(k) = B(km)B(km-1) \cdots B(km-m+1), \quad k = 1, \dots, Q \quad (2.36)$$

mit $Q \equiv L/m$. Zunächst werden für eine gegebene Konfiguration des HS-Feldes iterativ die folgenden Produkte berechnet:

$$\begin{aligned} Z(1) &= P(Q) \\ Z(2) &= Z(1)P(Q-1) \\ &\dots \\ Z(Q) &= Z(Q-1)P(1) = A(L) \end{aligned} \quad (2.37)$$

Dabei werden die Matrizen $Z(k)$ jeweils UDV -faktorisiert. Die Multiplikation verläuft analog zu (2.34). Aus $A(L)$ wird wie unten beschrieben die Greenfunktion $G(0) \equiv G(L)$ bestimmt. Nun werden wie üblich für die nächsten m Trotter-Schritte jeweils etwa N HS-Spinflips durchgeführt. Der Übergang zum nächsten Schritt erfolgt dabei mit (2.33). Aus

den ersten m , nun geänderten, Matrizen $B'(l)$ berechnen wir das Teilprodukt:

$$Y(1) = P'(1) = B'(m)B'(m-1) \cdots B'(1), \quad (2.38)$$

faktorisieren es und bestimmen:

$$A(m) = Y(1)Z(Q-1) \quad (2.39)$$

und daraus $G(m)$. Nach jeweils m weiteren Schritten wird dies iterativ fortgesetzt:

$$Y(k) = P'(k)Y(k-1) \quad (2.40)$$

$$A(km) = Y(k)Z(Q-k) \quad (2.41)$$

für $k = 1, \dots, Q$. Aus $A(km)$ wird dann wiederum $G(km)$ bestimmt. Die Multiplikation der beiden UDV -zerlegten Matrizen wird wie folgt durchgeführt:

$$UDV \tilde{U} \tilde{D} \tilde{V} = U(DV \tilde{U} \tilde{D}) \tilde{V} = U(\tilde{U} D' \tilde{V}) \tilde{V} = U' D' V' \quad (2.42)$$

Das Produkt $DV \tilde{U} \tilde{D}$ wird faktorisiert, anschließend werden die beiden U - und V -Matrizen miteinander multipliziert. Schließlich soll noch gezeigt werden wie aus der faktorisierten Matrix A die Greenfunktion berechnet wird [Whi89]:

$$\begin{aligned} -G(l, l) &= [I + UDV]^{-1} = [(U(U^{-1}V^{-1} + D)V)^{-1}] \\ &= [(U(U' \tilde{D} V')V)^{-1}] = [\tilde{U} \tilde{D} \tilde{V}]^{-1} \\ &= \tilde{V}^{-1} \tilde{D}^{-1} \tilde{U}^{-1} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Die Inversion der diagonalen und der orthogonalen Matrix ist trivial; nur die Dreiecksmatrix $\tilde{V}$ muß noch numerisch invertiert werden.

Durch das Speichern der Teilprodukte $Y(k)$ und $Z(k)$ kann also die Fermionenmatrix iterativ berechnet werden, ohne daß jedesmal das vollständige Produkt (2.35) ausgeführt werden muß. Dies spart gegenüber dem Standardalgorithmus einen Großteil der Matrixmultiplikationen und Orthogonalisierungen ein. Die periodische Neuberechnung der Fermionenmatrix nach (2.35) ist pro MC-Sweep Q -mal erforderlich. Im Standardverfahren erfordert die vollständige Berechnung dabei $\propto Q$ Matrixmultiplikationen, bzw. vom numerischen Aufwand ($\propto N^3$ Operationen) ähnliche Prozesse, wie die Orthogonalisierungen. Dabei sind die Multiplikationen der Matrizen $B(l)$ nicht mitberücksichtigt, da diese effektiv dünn besetzt sind. Die Rechenzeit für diesen Teil des Algorithmus' wächst daher im Standardverfahren quadratisch mit Q und damit auch mit der inversen Temperatur β . Bei der oben vorgestellten Methode (2.36) bis (2.41) sind pro Neuberechnung nur einige wenige Matrixmultiplikationen erforderlich, wodurch die Rechenzeit linear mit β anwächst.

Berücksichtigt man, daß eine Orthogonalisierung etwa 1.5 mal soviel Zeit benötigt wie eine Matrixmultiplikation, so ergibt sich bei tiefen Temperaturen eine Reduktion der N^3 -Prozesse von etwa $1.7Q^2$ auf $6.2Q$. Da für die numerische Stabilität $m\Delta\tau \approx 1$ sein sollte, folgt mit $Q = L/m$ und $L = \beta/\Delta\tau$, daß wir Q etwa mit β identifizieren können. Daher ist die iterative Methode dem Standardverfahren für inverse Temperaturen von $\beta > 4$ überlegen. Der Preis ist ein relativ moderater zusätzlicher Speicherplatzbedarf von etwa $3QN^2$ 8-Byte Zahlen. Bei $\beta = 32$ gewinnt man z.B. einen Faktor 9 in der Rechenzeit, bei $\beta = 128$ einen Faktor 35. Der Speicherplatzbedarf ist hier für ein recht großes System von 100 Gitterplätzen beispielsweise etwa 8 bzw. 30 MByte.

Die Orthogonalisierungsmethode erlaubt prinzipiell beliebig tiefe Temperaturen. Getestet wurde das Programm bis $\beta = 160$ bei Werten der Coulombabstoßung von $U \leq 8$.

2.3. Eigenschaften und Tests

2.3.1. Vergleich mit exakten Resultaten

Der Vergleich mit Resultaten aus der exakten Diagonalisierung ist nicht ganz einfach, da diese meistens zur Berechnung von Grundzustandseigenschaften benutzt wird, die MC-Methode dagegen Resultate für endliche Temperaturen liefert. Darüberhinaus wird im Gegensatz zur GQMC-Methode in der Regel bei fester Teilchenzahl gerechnet. Bei kleinen Gittern ($N = 6$) findet man Abweichungen z.B. in der Doppeltbesetzungsdichte von bis zu 10 % zwischen dem kanonischen und dem großkanonischen Ensemble [Shi72]. Ein graphischer Vergleich der MC-Daten mit den Resultaten des 6-er Ringes aus [Shi72] wurde in [Ulm91] gegeben.

Für ein System aus 2 Gitterplätzen gibt es nur 16 Zustände. Die Matrix $\hat{H}$ ist darüber hinaus nur sehr dünn besetzt, so daß hier die Diagonalisierung analytisch durchgeführt werden kann. Vergleichende Resultate finden sich in Tabelle 2.1 sowie Abbildung 2.1.

Der MC-Algorithmus kann in leicht veränderter Form auch zur exakten Berechnung von Observablen bei kleinen Systemgrößen herangezogen werden. Dazu werden systematisch sämtliche möglichen Konfigurationen des Isingspin-Feldes erzeugt, das statistische Gewicht sowie die momentanen Observablenwerte berechnet und aufsummiert. Die Ergebnisse sind dann im Rahmen der Trotter-Zerlegung numerisch exakt. Dieses Verfahren ist allerdings auf sehr kleine Systeme beschränkt, da die Rechenzeit exponentiell mit der Anzahl der Isingspins ($N \cdot L$) anwächst. Die Zahl der Trotter-Schritte L ist beim 2×2 -Gitter praktisch auf 6, beim 2×3 -Gitter auf 4 begrenzt.

Der Vergleich mit den Monte-Carlo Resultaten ist ein guter Test für die Konvergenzeigenschaften des MC-Algorithmus'. Tabelle 2.1 stellt für verschiedene Parametersätze und Systemgrößen MC-Resultate den exakten Werten gegenüber. Als Observablen dienen inne-

re Energie pro Gitterplatz E , die Doppelbesetzungsdichte d sowie der antiferromagnetische Strukturfaktor $S(\pi, \pi)$ mit

$$S(q) = \frac{1}{N} \sum_{j,l} e^{iq(R_j - R_l)} \langle (n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow})(n_{l\uparrow} - n_{l\downarrow}) \rangle. \quad (2.44)$$

Es wurden stets periodische Randbedingungen gewählt. Die Werte stimmen im Rahmen der statistischen Fehler (etwa 0.2-0.5% für alle Größen) mit den exakten Resultaten überein. Die Zeilen mit $L = \infty$ geben die Resultate der exakten Diagonalisierung wieder.

System	U	μ	L	$-E$		d		$S(\pi)$	
				exakt	MC	exakt	MC	exakt	MC
2x2	4	0	4	1.151	1.150	0.1719	0.1719	1.038	1.039
		1	4	1.357	1.356	0.1190	0.1188	0.971	0.972
2x2	6	0	4	0.916	0.913	0.1387	0.1379	1.202	1.196
		1	4	1.099	1.099	0.1085	0.1082	1.146	1.143
3x2	4	1	3	1.089	1.094	0.1197	0.1120	0.922	0.930
1x2	4	0	4	0.792	0.792	0.1545	0.1541	1.090	1.090
			6	0.775	0.772	0.1474	0.1470	1.105	1.103
			8	0.768	0.770	0.1448	0.1458	1.110	1.111
			∞	0.758	-	0.1414	-	1.116	-
1x2	4	1	4	0.920	0.924	0.1103	0.1107	1.029	1.032
			6	0.910	0.914	0.1020	0.1018	1.039	1.043
			8	0.906	0.908	0.0990	0.0995	1.043	1.044
			∞	0.900	-	0.0951	-	1.047	-

Tabelle 2.1: Vergleich der Ergebnisse der MC-Simulation mit denen der vollständigen Aufsummation; überall $\beta = 1$. Bei den MC-Simulationen: 2000 Thermalisierungs-Sweeps und 4000 Messungen.

2.3.2. Trotter-Diskretisierung

Hier soll etwas detaillierter auf die in Abschnitt 2.1 bereits dargestellte Trotterzerlegung eingegangen werden. Allgemein schreiben wir eine Zerlegung n-ter Ordnung:

$$e^{z(\hat{V} + \hat{K})} \approx \hat{T}^{(n)}(x, \hat{V}, \hat{K}) [1 + \hat{F}_2^{(n)} x^2 + \hat{F}_3^{(n)} x^3 + \dots] \quad (2.45)$$

Zerlegungen erster und zweiter Ordnung sind z.B.:

$$\hat{T}^{(1)}(x, \hat{V}, \hat{K}) = e^{x\hat{V}} e^{x\hat{K}} \quad (2.46)$$

$$\hat{T}^{(2)}(x, \hat{V}, \hat{K}) = e^{\frac{x}{2}\hat{K}} e^{x\hat{V}} e^{\frac{x}{2}\hat{K}}. \quad (2.47)$$

Dabei sind

$$\hat{F}_2^{(1)} = \frac{1}{2}[\hat{K}, \hat{V}] \quad (2.48)$$

$$\hat{F}_3^{(1)} = \frac{1}{6}\{(\hat{K} + 2\hat{V})[\hat{K}, \hat{V}] + [\hat{K}, \hat{V}](2\hat{K} + \hat{V})\} \quad (2.49)$$

$$\hat{F}_2^{(2)} = 0 \quad (2.50)$$

$$\hat{F}_3^{(2)} = \frac{1}{24}\{(\hat{K} + 2\hat{V})[\hat{K}, \hat{V}] - [\hat{K}, \hat{V}](\hat{K} - 2\hat{V})\} \quad (2.51)$$

Für das Exponential des Hamiltonoperators $\hat{H} = \hat{V} + \hat{K}$ ergeben sich damit folgende Korrekturen (bis in Ordnung $\Delta\tau^2$):

$$\begin{aligned} e^{-\beta\hat{H}} - (\hat{T}^{(n)}(-\Delta\tau, \hat{V}, \hat{K}))^L &\approx [\hat{1} + \hat{F}_2^{(n)}\Delta\tau^2 - \hat{F}_3^{(n)}\Delta\tau^3]^L - \hat{1} \\ &\approx \beta\hat{F}_2^{(n)}\Delta\tau + \beta(-\hat{F}_3^{(n)} + \frac{\beta}{2}(\hat{F}_2^{(n)})^2)\Delta\tau^2. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Wie in Abschnitt 2.1 erläutert, verschwindet wegen der Antihermitizität von $\hat{F}_2^{(1)}$ die lineare Korrektur bei der Spurbildung. In der nächsten Ordnung tritt $\hat{F}_2^{(1)}$ allerdings wieder, und zwar quadratisch, auf. Schätzt man für $U \gg t$ die Größenordnungen ab, so ergibt sich folgendes Verhältnis in den Vorfaktoren der führenden Ordnung der beiden verschiedenen Zerlegungen:

$$\left\| \frac{\hat{F}_3^{(1)} - \beta(\hat{F}_2^{(1)})^2/2}{\hat{F}_3^{(2)}} \right\| \approx 3(1 + \beta \text{ const.}) \quad (2.53)$$

Die dimensionslose Konstante gibt dabei wieder, wie stark $\hat{F}_2^{(1)}$ tatsächlich bei der Erwartungswertbildung miteinfließt. Auf jeden Fall ist eine erhebliche Verbesserung durch die Trotterzerlegung in zweiter Ordnung zu erwarten. Erfreulicherweise kann sie auch sehr leicht implementiert werden: In den Produkten der $B^\sigma(l)$ -Matrizen (2.22) stehen jetzt jeweils zwei Faktoren $\exp(-\Delta\tau K/2)$ paarweise nebeneinander. Das bedeutet, daß die Produktmatrix $A(l)$ in zweiter Ordnung geschrieben werden kann als:

$$A^{(2)}(l) = e^{-\frac{\Delta\tau}{2}K} A^{(1)}(l) e^{+\frac{\Delta\tau}{2}K} \quad (2.54)$$

(ohne Elektronenspin-Index). Da die Determinante sich aber bei zyklischer Permutation nicht ändert, kann zur Bestimmung der Übergangswahrscheinlichkeiten nach wie vor mit $A^{(1)}(l)$ gerechnet werden. Lediglich zur Berechnung der Observablen nach einem vollständigen MC-Sweep müssen die Einteilchen-Greenfunktionen umgerechnet werden:

$$G^{(2)}(l, l) = e^{-\frac{\Delta\tau}{2}K} G^{(1)}(l, l) e^{+\frac{\Delta\tau}{2}K}. \quad (2.55)$$

Dies erfordert aber nur zwei Multiplikationen mit dünn besetzten Matrizen, ist daher vom Rechenaufwand her zu vernachlässigen. Die Abbildung 2.1 zeigt Daten für die Energie des

6-er Rings aus der MC-Simulation, bzw. den antiferromagnetischen Strukturfaktor für das System mit 2 Gitterplätzen aus der vollständigen Aufsummation. In beiden Fällen sieht man Korrekturen proportional zu $\Delta\tau^2$, die im Fall der Trotterzerlegung erster Ordnung um einen Faktor von etwa 6 größer sind als bei der zweiten Ordnung.

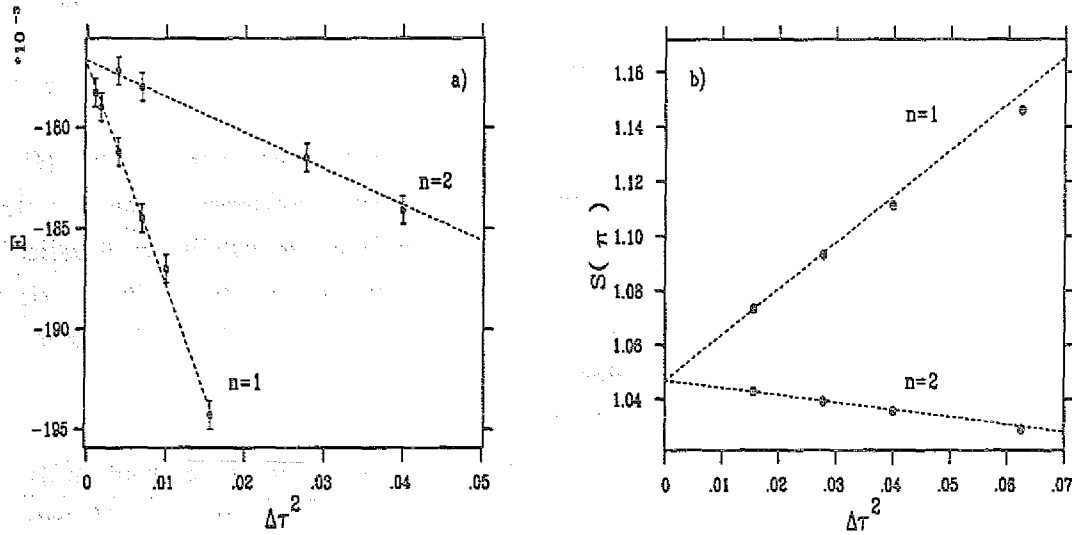


Abbildung 2.1: Abhängigkeit der Erwartungswerte von der Diskretisierung $\Delta\tau$ für Trotterzerlegungen der Ordnung $n = 1$ und 2. a) Innere Energie des 6-er Rings bei $U = 4, \mu = 0$ und $\beta = 1$, b) $S(\pi)$ für zwei Gitterplätze bei $U = 4, \mu = 1$ und $\beta = 1$.

2.3.3. Das Vorzeichenproblem

Das schwerwiegendste Problem bei der Simulation fermionischer Systeme ist das sogenannte *Vorzeichenproblem*. Bisher wurde angenommen, daß die Übergangswahrscheinlichkeit zweier Konfigurationen des HS-Feldes sich aus dem Produkt

$$w(s) = R^\dagger(i, l) R^\dagger(i, l), \quad (2.56)$$

mit $R^\dagger(i, l)$ aus (2.30), aus den Fermionendeterminanten berechnet läßt. $s \equiv \{s_{il}\}$ steht dabei für eine Konfiguration des HS-Feldes. $w(s)$ ist aber im allgemeinen nicht positiv definit und eignet sich daher nicht als Wahrscheinlichkeitsverteilung. Allgemein kann der Erwartungswert einer Observablen $\hat{O}$ folgendermaßen umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &\equiv \frac{\sum_s w(s) \langle \hat{O} \rangle_f(s)}{\sum_s w(s)} \\ &= \frac{\sum_s |w(s)| \text{sign}(w(s)) \langle \hat{O} \rangle_f(s)}{\sum_s |w(s)| \text{sign}(w(s))} \end{aligned}$$

$$\langle \hat{O} \rangle_f(s) = \frac{\langle \hat{O} \rangle_{|w|}}{\langle \hat{\sigma} \rangle_{|w|}}. \quad (2.57)$$

Dabei ist $\langle \hat{O} \rangle_f(s)$ der Erwartungswert von $\hat{O}$ für gegebenes s und $\hat{\sigma}$ der Operator für das Vorzeichen $\text{sign}(w(s))$. Auf diese Weise ist der Erwartungswert wohl definiert als Quotient zweier Erwartungswerte bzgl. der positiv definiten Verteilung $|w|$. (2.57) kann man in der Form

$$\langle O \rangle = \frac{\langle O^+ \rangle - \langle O^- \rangle}{\langle Z^+ \rangle - \langle Z^- \rangle} \quad (2.58)$$

schreiben, wobei $\langle \hat{\sigma} \rangle = \langle Z^+ \rangle - \langle Z^- \rangle$ der Mittelwert des Vorzeichens von $w(s)$ ist. $\langle O^\pm \rangle$ ist der Mittelwert bzgl. des Unterraums mit positivem bzw. negativem Vorzeichen der Fermionendeterminante. Im allgemeinen addiert man nun in einem Zufallsprozeß positive und negative Beiträge auf, was zu großen statistischen Fluktuationen führt. Das mittlere Vorzeichen $\langle \hat{\sigma} \rangle$ ist dabei ein Maß für die Stärke der Fluktuationen. Schließlich muß noch der Quotient zweier kleiner Werte gebildet werden, um den Erwartungswert zu bestimmen, was zu weiteren Rundungsfehlern führt.

In einigen Fällen weiß man, daß das Vorzeichen positiv (semi-)definit ist. So sind im Hubbardmodell mit negativem U die Fermionenmatrizen für beide Elektronenspins identisch, das Produkt der Determinanten daher nie kleiner als null. Im repulsiven Fall kann im Fall der halben Bandfüllung ($n = 1$) durch eine Teilchen-Loch-Transformation gezeigt werden, daß sich die beiden Determinanten nur um einen Exponentialfaktor unterscheiden, d.h. das Produkt ist wiederum größer oder gleich null [Hir85]. Ein chemisches Potential, äußere Felder oder Unordnungspotentiale zerstören die Teilchen-Loch-Symmetrie und können zu sehr kleinen Werten von $\langle \hat{\sigma} \rangle$ und damit zu riesigen Fluktuationen führen, die eine verlässliche Berechnung von Erwartungswerten unmöglichen machen. Genauere Untersuchungen des mittleren Vorzeichens (z.B. [Loh90, Sor88, Whi89]) ergaben, daß es in der Regel exponentiell mit der inversen Temperatur β , mit der Systemgröße N und mit der Kopplungsstärke U gegen null geht. Also gerade im physikalisch interessanten Parameterbereich tiefer Temperaturen und mittlerer bis starker Wechselwirkung abseits halber Bandfüllung wird das Vorzeichenproblem sehr ernst. Abbildung 2.2 zeigt den exponentiellen Abfall des mittleren Vorzeichens für verschiedene Systemgrößen und Temperaturen.

Von Batrouni und anderen wurden einige Ansätze zur Beseitigung oder Verbesserung des Problems dargestellt [Bat90, Bat93], die auf unterschiedlichen HS-Entkopplungen beruhen, allerdings bislang keine wesentlichen Verbesserungen lieferten. Eine Kombination von PQMC- und Variationsverfahren [Fri92] ist zwar frei vom Vorzeichenproblem, die Resultate konvergieren aber relativ langsam mit der Anzahl der beim Variationsverfahren berücksichtigten Slaterdeterminanten.

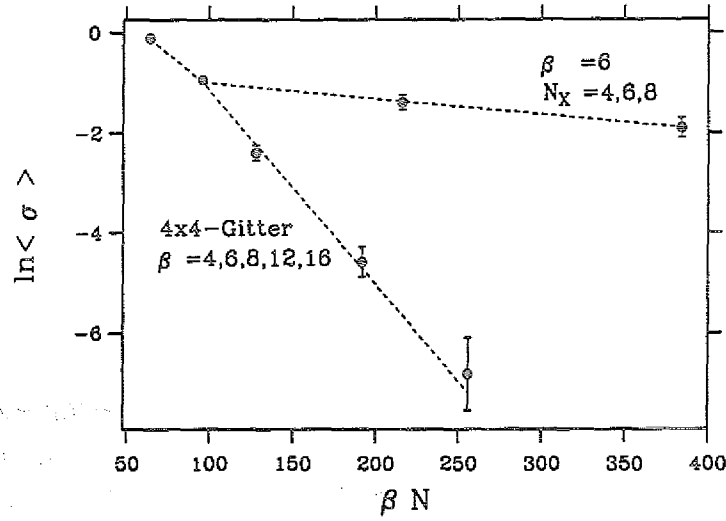


Abbildung 2.2: Mittleres Vorzeichen für verschiedene quadratische Gitter (Kantenlänge N_x) und Temperaturen bei $U = 4, \mu = 1$

Während im Weltlinienalgorithmus für Fermionen (siehe Abschnitt 2.5) ein Vertauschen von Fermionen zu negativen Vorzeichen führt, hat im allgemeinen das Vorzeichenproblem tiefere Ursachen in der quantenmechanischen Natur des Problems. So kann selbst im einfachsten Fall eines einzelnen Paulispins je nach Art der Darstellung und Trotterzerlegung des Hamiltonoperators das Vorzeichen entweder strikt positiv oder teilweise negativ und sogar komplex werden [dRae92]. Es können sogar dann negative Vorzeichen in der Zustandssumme auftreten, wenn die Trotterzerlegung exakt ist, d.h. wenn die Teil-Hamiltonoperatoren selbst hermitesch sind und kommutieren. Ein Beispiel dafür ist die Zerlegung $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ mit

$$\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & x \\ x & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{H}_2 = \begin{pmatrix} 0 & a - x \\ a - x & 0 \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

$\hat{H}_1$ und $\hat{H}_2$ können leicht exponenziert werden; die vier Summanden der Spur über das Produkt liefert die (exakte) Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z &= \cosh(\beta x) \cosh(\beta(a - x)) \times \\ &\quad \times [1 + 1 + \tanh(\beta x) \tanh(\beta(a - x)) + \tanh(\beta x) \tanh(\beta(a - x))] \\ &= 2 \cosh(\beta a) \end{aligned} \quad (2.60)$$

Bei der MC-Summation mit den Beträgen der vier obigen Terme als statistische Gewichte verschwindet für $x(a - x) < 0$ auch hier das Vorzeichen exponentiell mit β . Eine andere

Variante besteht darin, daß $\hat{H}$ trivial zerlegt wird – $\hat{H} = L(\hat{H}/L)$ – und die Zustands-
summe nach Einfügen vollständiger Sätze von Zuständen aufsummiert wird⁸. Damit hier
negative Vorzeichen auftreten können, muß $\hat{H}$ mindestens die Dimension drei haben. Ein
Beispiel mit drei Trotterschritten ist:

$$\hat{Q} = e^{-\frac{\epsilon}{3}\hat{H}} = \begin{pmatrix} a & 1 & -1 \\ 1 & a & 1 \\ -1 & 1 & a \end{pmatrix} \quad (2.61)$$

$$Z = \sum_{ijk} Q_{ij} Q_{jk} Q_{ki} \quad (2.62)$$

Für $a > 2$ ist $\hat{Q}$ selbst positiv definit, wie es für einen hermiteschen Operator $\hat{H}$ sein muß. Z
ist wiederum exakt und positiv, enthält aber auch negative Beiträge wie $Q_{12}Q_{23}Q_{31} = -1$.
In beiden Beispielen kann durch eine einfache Koordinatentransformation das Problem
leicht behoben werden. In korrelierten Elektronensystemen ist dagegen vollkommen un-
klar, welche Koordinatentransformationen dazu geeignet sein könnten.

Eine mögliche „Philosophie“ zur Verbesserung des Problems besteht darin, die z.B. durch
die Diskretisierung $\Delta\tau$ der Trotter-Dimension verursachten systematischen Fehler bei
der MC-Simulation zu *nutzen*, indem man eine zusätzliche Näherung macht, die eben-
falls nur im Limes $\Delta\tau \rightarrow 0$ exakt wird. Bei der vollständigen Aufsummation aller HS-
Feldkonfigurationen für kleine Systeme wurde nun folgende Beobachtung gemacht: Es
traten, bedingt durch die endliche Trotter-Diskretisierung, Konfigurationen mit „unphysi-
kalischen“ Teilchendichten $\langle n_\sigma \rangle > 1$ auf. Wir gliedern die Summe aller Gewichte Z in vier
Teile:

$$Z = Z_a^+ + Z_b^+ - Z_a^- - Z_b^- . \quad (2.63)$$

Dabei steht der Index a bzw. b für die Summe über Konfigurationen mit Teilchendichten
 $\langle n_\sigma \rangle < 1$ bzw. > 1 , der obere Index gibt an, ob über Konfigurationen mit positivem oder
negativem Vorzeichen von $w(s)$ summiert wird. Das mittlere Vorzeichen berechnet sich
dann aus

$$\langle \hat{\sigma} \rangle = \frac{Z}{\mathcal{N}} , \quad \mathcal{N} = Z_a^+ + Z_b^+ + Z_a^- + Z_b^- . \quad (2.64)$$

Eine Näherung für das mittlere Vorzeichen, die nur die physikalisch sinnvollen Zustände
berücksichtigt, ist dann:

$$\langle \hat{\sigma} \rangle_a = \frac{Z_a}{\mathcal{N}_a} \quad (2.65)$$

$$Z_a = Z_a^+ - Z_a^- \quad (2.66)$$

$$\mathcal{N}_a = Z_a^+ + Z_a^- . \quad (2.67)$$

⁸Dies geschieht auch in den sog. Weltlinien-Methoden, siehe Abschnitt 2.5.

In kleinen Systemen, in denen das Vorzeichenproblem noch keine Rolle spielt, stellt sich heraus, daß die unphysikalischen Konfigurationen unsymmetrisch über die Zustände mit positivem bzw. negativem Vorzeichen der Fermionendeterminante verteilt sind. Genauer: Bei den Zuständen mit negativem Vorzeichen haben sie ein viel höheres Gewicht. Bliebe diese Asymmetrie auch in größeren Systemen bestehen, so ergäbe sich eine Möglichkeit durch Vernachlässigung dieser unphysikalischen Zustände das Vorzeichenproblem zu mindern. Setzen wir z.B. an

$$\frac{Z_b^+}{Z^+} = c \frac{Z_b^-}{Z^-}, \quad Z^\pm \equiv Z_a^\pm + Z_b^\pm, \quad (2.68)$$

so kann die Näherung für das mittlere Vorzeichen umgeschrieben werden zu:

$$\langle \hat{\sigma} \rangle_a = \frac{\mathcal{N}}{\mathcal{N}_a} \langle \hat{\sigma} \rangle - \frac{Z_b^+ - Z_b^-}{\mathcal{N}_a} \rightarrow \frac{Z_b^-}{\mathcal{N}_a} (1 - c) \quad (2.69)$$

für $\langle \hat{\sigma} \rangle \rightarrow 0$. Um diese Näherung benutzen zu können, müssen im Grenzfall $\Delta\tau \rightarrow 0$ die Gewichte aus den b -Zuständen verschwinden. Damit die Näherung nützlich ist, dürfen dagegen für festes $\Delta\tau$ die beiden Faktoren $1 - c$ und $Z_b^-/\mathcal{N}_a$ nicht zu klein werden. Tabelle 2.2 zeigt die beiden Faktoren, sowie das mittlere Vorzeichen für einige Systeme bei verschiedenen Temperaturen. Der Faktor $1 - c$ wird zwar mit feinerer Diskretisierung kleiner, aber auch bei groberer Diskretisierung sind beide Faktoren zu klein, als daß die Vernachlässigung „unphysikalischer“ Zustände eine merkliche Erhöhung des mittleren Vorzeichens bewirken könnte.

System	β	L	$1 - c$	$Z_b^-/\mathcal{N}_a \times 10^4$	$\langle \sigma \rangle_a$
2x2	2	4	1.0	0.39	0.9999
		6	0.99	0.06	0.9991
		7	0.98	0.02	0.9897
2x2	12	32	0.3(2)	6(2)	0.005(3)
		48	0.4(3)	3(1)	0.007(3)
		64	0.0(3)	3(1)	0.008(3)
2x3	2	3	1.00	0.01	0.9987
		4	1.00	0.06	0.9991
4x4	6	24	0.5(3)	1.5(10)	0.346(8)
		48	0.5(3)	2.5(12)	0.388(8)

Tabelle 2.2: Mittleres Vorzeichen und Faktoren nach (2.69) für verschiedene Systeme bei $\mu = 1, U = 4$. Exakte Aufsummation bzw. MC-Rechnung (Fehler in der letzten Dezimale in Klammern).

2.4. Eine Anwendung: Das Hubbardmodell auf Fullerenen

Die Anwendbarkeit des QMC ist nicht auf bestimmte Gittertypen oder Hüpfen zwischen benachbarten Gitterplätzen beschränkt. Im Prinzip eignet es sich sogar besonders gut zur Behandlung der elektronischen Eigenschaften von Molekülen oder „Clustern“, da diese eine endlich Anzahl von Gitterplätzen besitzen, und daher eine Extrapolation zum thermodynamischen Limes nicht erforderlich ist. Voraussetzung für die Anwendbarkeit ist allerdings, daß die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen stark abgeschirmt und dadurch lokal oder zumindest kurzreichweitig ist. Wechselwirkungen längerer Reichweite können zwar prinzipiell auch berücksichtigt werden, sie erhöhen aber die Anzahl der Hubbard-Stratonovich-Felder zu ihrer Entkopplung und damit die Rechenzeiten für die Simulation erheblich.

Eine interessante Anwendung für QMC-Methoden sind die Fullerene C_{60} und C_{70} . Auf der einen Seite herrscht bei diesen Kohlenstoffmolekülen in der Literatur noch keine Einigkeit über die Bedeutung von Korrelationseffekten, insbesondere deren Einfluß auf die supraleitenden Eigenschaften [Heb91, Cha92]. Zum anderen liegen die Molekülgrößen zwar außerhalb der Möglichkeiten exakter Diagonalisierung aber noch im Rahmen von QMC-Simulationen.

Für die Anwendung des QMC auf Fullerene wurden folgende Annahmen gemacht: Es werden nur die 60 beweglichen π -Elektronen berücksichtigt, die Wechselwirkung wird als rein lokal angenommen und das Hüpfen geschieht nur zwischen nächsten Nachbarn. Alle Fullerene besitzen als Grundgerüst zwölf 5er-Ringe mit Kohlenstoffatomen an den Ecken. Kommen keine weiteren Atome hinzu liegt die Geometrie eines Dodekaeder vor; also zwanzig Ecken, an denen jeweils drei Fünfecke zusammentreffen. Durch Einschieben zusätzlicher Sechsecke wird die Anzahl der Ecken erhöht, und zwar um zwei für jedes Sechseck. Beim C_{60} liegt der besonders symmetrische Fall vor, daß jedes Fünfeck von fünf Sechsecken umgeben wird. Insgesamt sind es hier 20 Sechsecke, beim C_{70} sind es 25. Die Bindungslänge ist innerhalb der Fünfecke kürzer als zwischen ihnen, d.h. die Hüpfamplitude t ist größer. Die Hüpfamplitude innerhalb der Sechsecke bezeichnen wir als t' . Die numerischen Werte der Parameter sind nicht genau bekannt; die Größenordnungen liegen bei $t \approx 2\text{eV}$, $U/t \approx 2$ und $t/t' \approx 1 \dots 1.3$ (siehe z.B. [Cha92, Sto92] und Referenzen darin). Der Unterschied in den Bindungslängen beeinflußt natürlich das Einteilchen-Energieschema ($U = 0$) der Moleküle. Er hebt durch die Symmetriebrechung die Entartungen beim Eigenwert -1 teilweise auf und verringert die Energiedifferenz zwischen dem höchsten besetzten und dem tiefsten unbesetzten Orbital⁹ (siehe Abbildung 2.3). Dieses Termschema wurde durch

⁹Diese werden in der Literatur als „HOMO“ und „LUMO“ für „highest occupied“ bzw. „lowest unoccupied molecular orbital“ bezeichnet.

2.4. EINE ANWENDUNG: DAS HUBBARDMODELL AUF FULLERENEN

Diagonalisierung der Hüpfmatrix gewonnen - gewissermaßen dem ersten Schritt in dem GQMC-Verfahren. Dieser Schritt ist äquivalent zu einer „Hückel“-Rechnung; die Ergebnisse stimmen mit den Literaturwerten (siehe z.B. [Kro85]) überein.

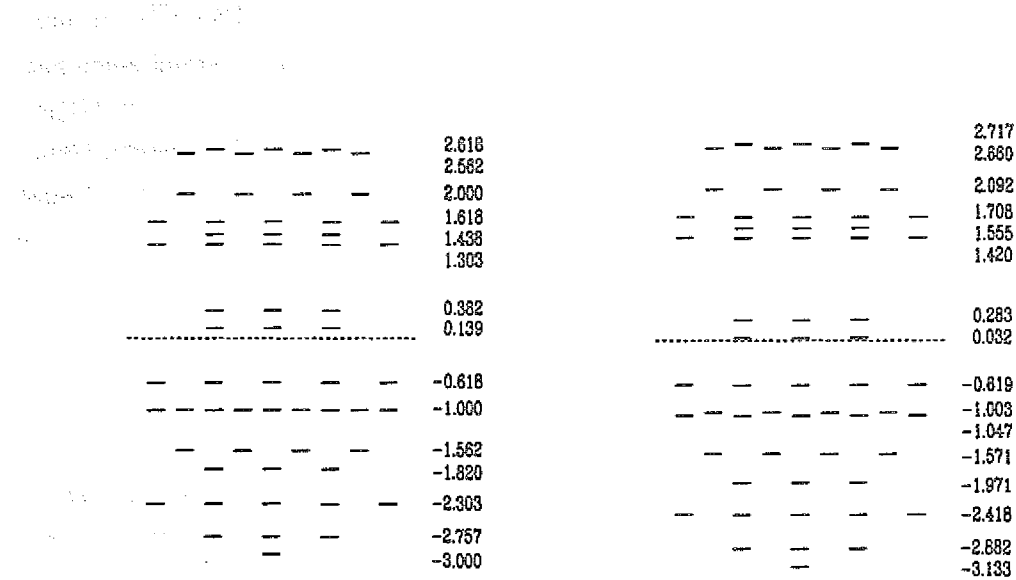


Abbildung 2.3: Einteilchen-Energieniveaus der π -Elektronen auf C_{60} mit $t = t' = 1$ (a) und $t = 1.09, t' = 0.96$ (b). Nulllinie gestrichelt.

Neben den magnetischen Eigenschaften der Fullerene ist vor allem ihr supraleitendes Verhalten ein möglicher Gegenstand von Untersuchungen. So ist bislang die Frage ungeklärt, ob die relativ hohen Sprungtemperaturen – etwa 18K in n -dotierten C_{60} -Filmen [Heb91] – in erster Linie durch phononische Anregungen oder elektronische Korrelation hervorgerufen werden. In der Tat wurde durch exakte Diagonalisierung des Hubbardmodells auf kleinen Clustern eine positive Grundzustands-Bindungsenergie für Elektronenpaare gefunden [Whi92]. Die Bindungsenergie E_{paar} ist dabei folgendermaßen definiert:

$$E_{\text{paar}} = 2E_1 - (E_0 + E_2). \quad (2.70)$$

Dabei ist E_n die Energie für einen Cluster mit n zusätzlichen Elektronen. Positive Bindungsenergie bedeutet, daß es für zwei zusätzliche Elektronen günstiger ist, sich auf demselben Molekül zu befinden als auf zwei unterschiedlichen. Dies kann natürlich nur als ein erster Hinweis auf korrelations-induzierte Supraleitung gedeutet werden. Für das Hubbardmodell auf dem C_{60} -Molekül wurden im Rahmen der Störungstheorie in zweiter Ordnung in U^{10} und für bestimmte Werte der Bandalternierung und U ebenfalls positive Bindungsenergien gefunden [Cha92]. Nun ist es interessant, dieses Ergebnis mit einer

¹⁰In erster Ordnung in U wird E_{paar} stets kleiner oder gleich null.

nicht-perturbativen Methode zu überprüfen, und darüber hinaus den Einfluß der Temperatur zu untersuchen. Vorläufige Ergebnisse für die Energien des C_{60} -Clusters bei halber Bandfüllung und mit einem bzw. zwei zusätzlichen Elektronen für $U = 2$, $t/t' = 1.1$ und $\beta = 10$ deuten an, daß hier eine positive Bindungsenergie vorliegt. Dies wäre in einem Parameterbereich der Fall, in dem die Störungstheorie für den Grundzustand einen negativen Wert von E_{paar} vorhersagt. Allerdings sind die statistischen Fehler in den GQMC-Resultaten noch zu groß, als daß bereits eine definitive Aussage getroffen werden könnte. Die Rechenzeiten sind für dieses System erheblich, und eine weitere Schwierigkeit besteht darin, die Elektronendichte über das chemische Potential hinreichend genau einzustellen.

2.5. Verwandte numerische Methoden

2.5.1. Projektor-Verfahren

Das Projektor-Quanten-Monte-Carlo-(PQMC-)Verfahren dient der Berechnung von Grundzustandseigenschaften. Die Idee besteht darin, aus einer Testfunktion $|\Psi\rangle$ die Grundzustandskomponenten herauszuprojizieren. Diese Projektion geschieht hier durch die Anwendung des Operators $\exp(-\Theta\hat{H})$ auf die Testfunktion [Koo82]. Entwickelt man formal die Testfunktion in Eigenzustände $|n\rangle$ von $\hat{H}$ mit Eigenwerten $E_0 < E_1 \leq E_2 \dots$, so erhält man

$$\begin{aligned} e^{-\Theta\hat{H}} |\Psi\rangle &= e^{-\Theta E_0} \left\{ |0\rangle\langle 0|\Psi\rangle + \sum_{n>0} e^{-\Theta(E_n-E_0)} |n\rangle\langle n|\Psi\rangle \right\} \\ &\rightarrow |0\rangle e^{-\Theta E_0} \langle 0|\Psi\rangle \end{aligned} \quad (2.71)$$

für $\Theta \rightarrow \infty$. Vorausgesetzt, die Testfunktion ist nicht orthogonal zum Grundzustand, wird dieser für große Θ herausprojiziert, und die anderen Anteile exponentiell unterdrückt. Ist der Grundzustand entartet, erhält man abhängig von der Testfunktion eine Linearkombination der Grundzustandsfunktionen. Die Konvergenz mit Θ hängt, wie man an (2.71) sieht, sowohl von der Wahl der Testfunktion als auch von dem tiefliegenden Anregungsspektrum ab. Das Problem ist, ähnlich wie beim GQMC-Verfahren: Wie läßt sich $\exp(-\Theta\hat{H})$ anwenden, ohne den Hamiltonoperator zu diagonalisieren?

Dazu wird wiederum mittels Trotter-Zerlegung und HS-Transformation das Exponential in exponenzierte Einteilchenoperatoren zerlegt. Zweckmäßigerweise startet man mit einer Slaterdeterminante als Testfunktion (ohne Elektronenspin-Index):

$$|\Psi\rangle = \prod_{\nu=1}^{N_e} \left(\sum_{i=1}^N \Psi_{\nu i} c_i^\dagger \right) |vac\rangle, \quad (2.72)$$

wobei N_e die Anzahl der Elektronen ist. Die Anwendung des Exponentialis eines Einteilchen-Operators $O = \sum_{ij} \exp(c_i^\dagger K_{ij} c_j)$ liefert [Sor88, Sor89, vdLi90]:

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}\rangle \equiv e^O |\Psi\rangle &= \prod_{\nu=1}^{N_e} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{\Psi}_{\nu i} c_i^\dagger \right) |vac\rangle . \\ \tilde{\Psi}_{\nu i} &= \sum_{j=1}^N (e^O)_{ij} \Psi_{\nu j} . \end{aligned} \quad (2.73)$$

Das Ergebnis ist also wiederum eine Slaterdeterminante. Die Vielteilchenwellenfunktion ergibt sich als Überlagerung vieler Slaterdeterminanten $|\Psi(s)\rangle$ der verschiedenen HS-Feldkonfigurationen $s \equiv \{s_H\}$. Durch Anwendung des Wickschen Theorems läßt sich die Übergangswahrscheinlichkeit für eine neue Konfiguration s' aus dem Skalarprodukt der Slaterdeterminanten berechnen:

$$\langle \Psi(s') | \Psi(s) \rangle = \det_{\mu\nu} \left(\sum_{i=1}^N \Psi'_{\nu i} \Psi_{\mu i} \right) . \quad (2.74)$$

Schließlich können Einteilchen-Greenfunktionen für ein festes HS-Feld folgendermaßen aus den Slaterdeterminanten gewonnen werden:

$$G_{ij} = -\langle c_i c_j^\dagger \rangle = \sum_{\mu, \nu=1}^{N_e} \Psi'_{\mu j} M_{\mu\nu}^{-1} \Psi_{\nu i} - \delta_{ij} \quad (2.75)$$

mit der Matrix der Skalarprodukte

$$M_{\mu\nu} = \langle \Psi'_\nu | \Psi_\mu \rangle = \sum_{i=1}^N \Psi'_{\nu i} \Psi_{\mu i} , \quad (2.76)$$

womit die Grundgleichungen für die MC-Simulation gegeben wären.

Im Unterschied zum GQMC-Algorithmus geht hier nicht die Gittergröße sondern die Dimension der Slaterdeterminanten, d.h. die Anzahl der Elektronen einer Spinrichtung in die Rechenzeit ein. Das wirkt sich natürlich günstig im Falle geringer Dichten aus. Die Propagation der Slaterdeterminanten zerstört deren Orthogonalität und führt zu numerischen Instabilitäten bei der Berechnung der Determinanten. Deshalb müssen auch im PQMC-Algorithmus Orthogonalisierungstechniken verwendet werden. Wie beim GQMC-Verfahren gibt es auch hier das Vorzeichenproblem. Durch geeignete Wahl der Testfunktion kann zwar nicht die exponentielle Abhängigkeit von N, U und Θ aber u.U. der Vorfaktor verbessert werden [Loh90].

2.5.2. Weltlinien-Verfahren

In den oben beschriebenen GQMC- und PQMC-Verfahren werden durch die Einführung von Hilfsfeldern die Mehrteilchen-Operatoren im exponenzierten Hamiltonoperator durch

Einteilchenterme ersetzt. Dadurch hat man es mit quasi nicht-wechselwirkenden Elektronen in einem dynamischen ortsabhängigen Potential zu tun. Eine derartige Ersetzung ist aber in komplizierteren Modellen, insbesondere in Spinsystemen nicht immer möglich. Ein anderer, direkterer Zugang ist der Weltlinienformalismus. Dieser beruht ebenfalls auf der Diskretisierung des Intervalls $(0, \beta)$. Für jede Schicht wird dabei ein vollständiger Satz von Zuständen eingeschoben:

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}} = \text{Sp} \prod_{i=1}^L e^{-\Delta\tau \hat{H}} \\ = \sum_{\Phi_1 \dots \Phi_L} \langle \Phi_1 | e^{-\Delta\tau \hat{H}} | \Phi_2 \rangle \langle \Phi_2 | e^{-\Delta\tau \hat{H}} | \Phi_3 \rangle \dots \langle \Phi_L | e^{-\Delta\tau \hat{H}} | \Phi_1 \rangle. \quad (2.77)$$

Dies ist eine Pfadintegraldarstellung der Zustandssumme, wie sie auch Grundlage der Feynmanschen Formulierung der Quantenmechanik ist. Bis hierher hat man noch nicht viel gewonnen, da die Exponentiale i. a. nach wie vor nicht diagonalisiert werden können. Hier hilft man sich wieder mit der Trotter-Formel und zerlegt $\hat{H}$ geeignet. In Gittermodellen ist es besonders vorteilhaft, $\hat{H}$ so zu zerlegen, daß die Teilhamiltonoperatoren sich aus kleinen, unverbundenen Untersystemen zusammensetzen. In einer Dimension geschieht dies z.B. durch die „even-odd“- Zerlegung. Dabei summiert der eine Anteil, $\hat{H}_1$, des Hamiltonoperators über die geraden, der andere, $\hat{H}_2$, über die ungeraden Gitterplätze. Für höherdimensionale Systeme kann dies auf verschiedene Weisen verallgemeinert werden [Hir82, Mor85]. Für jeden Teilhamiltonoperator werden dann weitere L Sätze von Zuständen eingefügt. Eine gegebene Konfiguration dieser Zustände kann dann als System von Weltlinien der Elektronen im Orts- und Zeitgitter betrachtet werden. Dabei sind wegen der Spurbildung periodische Randbedingungen in Trotterrichtung zu wählen. Dieses Verfahren ist erfolgreich auf eindimensionale Elektronenmodelle angewandt worden [Hir81]. In höheren Dimension treten dagegen schwerwiegende Probleme bei der Equilibrierung bei tiefen Temperaturen auf: Durch das Verdrillen von Weltlinien können die Matrixelemente negativ werden, was wiederum zu einem Vorzeichenproblem führt. In einer Dimension ist ein Verdrillen der Weltlinien nicht möglich.¹¹ Die wechselnden Vorzeichen der Matrixprodukte sind aber wesentlich, um den fermionischen Charakter des Modells zu erfassen. Ignorierte man hier das Vorzeichen, so würde man in Wirklichkeit ein System mit „hard-core“-Bosonen simulieren. Dagegen ist im QMC- und im PQC-Verfahren die fermionische Struktur bereits implizit durch die Determinantenbildung enthalten. Aus diesem Grund ist das Vorzeichenproblem beim Weltlinienalgorithmus wesentlich schwerwiegender und tritt sogar auch bei halber Bandfüllung auf.

¹¹Bei periodischen Randbedingungen sind Verdrillungen im Prinzip möglich. Diese verlaufen aber über den ganzen Ring und werden für größere Systeme extrem unwahrscheinlich.

2.5.3. Quanten-Monte-Carlo-Verfahren nach Handscomb

Alle bisher vorgestellten Methoden beruhen auf der Trotter-Zelegung des exponentierten Hamiltonoperators $\hat{H}$. Ein anderer Ansatz wurde bereits 1962 von D. C. Handscomb für die Simulation des Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenbergmodells eingeführt [Han62] und später von A. W. Sandvik für korrelierte Fermionensysteme verallgemeinert [San92]. Er beruht auf der Taylorentwicklung des Exponentials. Für einen Hamiltonoperator der Form

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^M \hat{H}_i \quad (2.78)$$

können wir die Zustandssumme schreiben als:

$$Z = \text{Sp} \{ e^{-\beta \hat{H}} \} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{S_n} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Sp} \left\{ \prod_{i=1}^n \hat{H}_{l_i} \right\}. \quad (2.79)$$

Dabei steht S_n für eine Folge von Indizes $(l_1, \dots, l_n)$ mit $1 \leq l_i \leq M$. Die Erwartungswerte von Observablen ergeben sich analog durch Einschieben des entsprechenden Operators und Normierung. Die Spur über das Produkt mit dem Vorfaktor kann als Gewichtsfunktion interpretiert werden. Im Fall des Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenbergmodells kann sie analytisch berechnet werden. Allgemein wird die Spur als Summe über einen vollständigen Satz von Zuständen geschrieben, und wir erhalten:

$$Z = \sum_{\Phi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{S_n} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \Phi | \prod_{i=1}^n \hat{H}_{l_i} | \Phi \rangle = \sum_{\Phi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{S_n} W(\Phi, S_n). \quad (2.80)$$

Existiert nun für eine Observable $\hat{O}$ eine Funktion $O(\Phi, S_n)$, so daß gilt:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum_{\Phi} \sum_n \sum_{S_n} O(\Phi, S_n) W(\Phi, S_n)}{\sum_{\Phi} \sum_n \sum_{S_n} W(\Phi, S_n)}, \quad (2.81)$$

dann kann die Erwartungwertbildung durch *importance sampling* im Raum $\{ | \Phi \rangle \} \otimes \{ S_n, n = 0, 1, \dots, \infty \}$ durchgeführt werden. Die Länge der Indexfolgen S_n wird dabei nicht limitiert, sondern variiert thermisch (typischerweise um 1000-2000). Als Basis eignet sich auch hier die Darstellung in Besetzungszahlen. Auf die recht aufwendige Bestimmung von Übergangswahrscheinlichkeiten und Observablen kann hier nicht eingegangen werden. Es sei nur angemerkt, daß auch zeitabhängige Größen berechnet werden können. Für Spinmodelle ohne Frustration sowie für das eindimensionale Hubbardmodell kann man $\hat{H}$ so zerlegen, daß $W(\Phi, S_n)$ positiv semi-definit ist. Für Fermionen in höheren Dimensionen ist dies dagegen nicht möglich. Die negativen Vorzeichen treten dabei, ähnlich wie im Weltlinien-Algorithmus, durch Operatorenprodukte auf, die eine ungerade Anzahl von Elektronen permutieren. Dies beschränkt die Anwendung des Verfahrens im wesentlichen

auf eindimensionale Fermionensysteme. Hier ist es sehr effektiv, da die Rechenzeit pro MC-Schritt nur linear mit der Systemgröße anwächst, und es wurden relativ große Systeme bei tiefen Temperaturen untersucht ($N = 128, \beta = 20$) [San93]. Ein Vorteil des Algorithmus' nach Handscomb und Sandvik besteht darin, daß er im Gegensatz zu den anderen bisher vorgestellten Methoden keinen Diskretisierungsfehler durch die Trotter-Zerlegung enthält.

2.5.4. Stochastische Diagonalisierung

Schließlich sei noch die recht neue Methode der Stochastischen Diagonalisierung (SD) [dRae93] erwähnt, die gewissermaßen einen Kompromiß zwischen exakter Diagonalisierung und MC-Simulation darstellt. Sie beruht, wie die MC-Simulation letztlich auch, darauf, daß nur relativ wenige Zustände des hochdimensionalen Zustandsraums für die Eigenschaften des Systems wichtig sind. Bei der SD wird zunächst ähnlich dem Jacobi-Verfahren [Wil65] für eine gegebene Menge von Zuständen derjenige mit dem tiefsten Energieerwartungswert gefunden, und dann die Dimension schrittweise vergrößert. Die hinzugefügten Zustände werden dabei stochastisch ausgewählt und danach akzeptiert oder verworfen, ob sie den Energieerwartungswert wesentlich verbessern können. Der Speicherplatzbedarf wächst dabei nicht mit der Dimension des Hamiltonoperators, sondern mit der des Unterraums der „wichtigen“ Konfigurationen. Die Rechenzeit steigt quadratisch mit der Anzahl der berücksichtigten Zustände an. Die Methode der SD hat sehr ansprechende Eigenschaften: Sie entspricht einem Variationsprinzip und liefert daher exakte obere Energieschranken; sie berechnet Wellenfunktionen, d.h. Korrelationsfunktionen und auch dynamische Größen können gewonnen werden, und schließlich hat sie kein Vorzeichenproblem. Darüber hinaus ist es eine sehr allgemeine Methode zur Bestimmung der tiefsten (oder höchsten) Eigenwerte und -vektoren sehr großer Matrizen und nicht auf spezielle Modelle beschränkt. Für das zweidimensionale Hubbardmodell wurden bislang vor allem Rechnungen bei Systemgrößen, die auch der exakten Diagonalisierung zugänglich sind gemacht. Dort wurden auch da gute Ergebnisse erzielt, wo MC-Methoden durch numerische Instabilitäten und das Vorzeichenproblem Schwierigkeiten haben. Erste Ergebnisse für größere Systeme liefern aber bisher noch nicht immer zufriedenstellende Resultate im Vergleich zu PQMC-Rechnungen, da die Anzahl der vom SD-Algorithmus verarbeiteten Zustände offensichtlich noch nicht ausreichend war [dRae93]. Die praktische Anwendbarkeit über die Möglichkeiten der exakten Diagonalisierung hinaus muß daher noch gezeigt werden.

2.6. Diskussion

Die Simulation von korrelierten fermionischen Systemen hat sich zu einem wichtigen, nicht-perturbativen Mittel zu deren Untersuchung entwickelt. Auf der anderen Seite gibt es nach

wie vor einige Hindernisse, die die Anwendbarkeit stark einschränken. Zum einen sind die Systemgrößen durch die Rechenzeitanforderungen sehr eingeschränkt, was eine Extrapolation auf den thermodynamischen Limes oft zweifelhaft macht. Diese Beschränkung ist eine Folge der Quantenstruktur der Modelle. Obwohl die Wechselwirkungen kurzreichweitig sind, beeinflussen lokale Änderungen den gesamten quantenmechanischen Zustand des Systems. Zum anderen verhindert das Vorzeichenproblem oft Anwendungen in sehr interessanten Parameterbereichen, wie bei schwacher Dotierung und tiefen Temperaturen. Das Weltlinienverfahren und die Methode nach Handscomb sind allgemein für Spinsysteme, auch mit komplizierten Hamiltonoperatoren, sowie für fermionische Systeme in einer Dimension geeignet. In höheren Dimensionen sind dagegen bei Fermionen die QMC- und die PQMC-Methode vorzuziehen, sofern der Hamiltonoperator die notwendige Entkopplung erlaubt. Zur Bestimmung von temperaturabhängigen Größen eignet sich dabei naturgemäß nur das QMC-Verfahren. Die Methode der stochastischen Diagonalisierung ist ein möglicher Kandidat für die Anwendung in Parameterbereichen, die den MC-Simulationen nicht zugänglich sind, sowie für komplizierte Modelle.

KAPITEL 2. NUMERISCHE SIMULATION FERMIONISCHER SYSTEME

3. ZWEI-NIVEAU-SYSTEME

Viele interessante Eigenschaften von Festkörpern beruhen auf der Wechselwirkung der Elektronen mit äußeren Freiheitsgraden, d.h. mit Anregungen des sie umgebenden Materials. So wird etwa bei der konventionellen Supraleitung die attraktive Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch Schwingungen des Kristallgitters (Phononen) vermittelt. Andere Anregungen sind z.B. Polarisierungen der benachbarten Atome oder lokale Gitterverzerrungen. Nun soll ein Modell zur Beschreibung der Wechselwirkung von Ladungsträgern mit lokalen Moden vorgestellt werden. Die Ladungsträger werden dabei durch das Hubbardmodell beschrieben; sie koppeln lokal an zweiwertige Moden, den sog. Zwei-Niveau Systemen (TLS für *Two level systems*). Die TLS wechselwirken untereinander nicht, sind also dispersionsfrei, was sie von Phononen unterscheidet. Der Hamiltonoperator dieses Modells lautet [Fri90]:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_H + \hat{H}_{TLS} + \hat{H}_{e,TLS} \\
 \hat{H}_0 &= -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} - \mu \sum_i \hat{n}_i = \sum_{q\sigma} (\epsilon_q - \mu) \hat{n}_{q\sigma} \\
 \hat{H}_H &= U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\
 \hat{H}_{TLS} &= -\Omega \sum_i [\hat{S}_i^z \cos \phi + \hat{S}_i^x \sin \phi] \\
 \hat{H}_{e,TLS} &= g \sum_i \hat{n}_i \hat{S}_i^z.
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

$\hat{H}_0 + \hat{H}_H$ ist der Hubbard-Hamiltonoperator, $\hat{H}_{TLS}$ beschreibt die Energie der TLS und $\hat{H}_{e,TLS}$ deren Wechselwirkung mit den Elektronen. $\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$ zählt die Elektronen am Gitterplatz i , und $\hat{S}_i^z, \hat{S}_i^x$ sind Pauli-Matrizen. Sie erfüllen daher die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{S}_i^{\alpha}, \hat{S}_j^{\beta}] = 2i \delta_{ij} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_i^{\gamma} \tag{3.2}$$

mit dem vollständig antisymmetrischen ϵ -Tensor. Die Bedeutung des Winkels ϕ wird anschaulicher, wenn man die TLS so dreht (praktisch um $\phi/2$), daß $\hat{H}_{TLS}$ diagonal ist:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}'_{TLS} &= -\Omega \sum_i \hat{S}_i^z \\
 \hat{H}'_{e,TLS} &= g \sum_i \hat{n}_i [\hat{S}_i^z \cos \phi - \hat{S}_i^x \sin \phi]
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Die TLS besitzen also zwei Niveaus mit Energiewerten $\pm\Omega$. $\hat{H}'_{e,TLS}$ beschreibt die Streuung von Elektronen an den TLS, wobei der Term mit $\cos\phi$ elastische und der Term mit $\sin\phi$ inelastische Streuung beschreibt, d.h. den TLS-Spin umklappt.

Das Modell (3.1) ist zur Beschreibung der anharmonischen Moden des Apex-Sauerstoffs in Hochtemperatur-Supraleitern (HTSL) eingeführt und mit dem PQMC-Verfahren intensiv auf seine supraleitenden Eigenschaften untersucht worden [Fri90]. Das PQMC-Verfahren berechnet Grundzustandseigenschaften (siehe Kapitel 2.5); die Temperaturabhängigkeit und damit auch Phasenübergänge können damit nicht untersucht werden. Immerhin ergaben die PQMC-Untersuchungen, daß die TLS eine attraktive effektive Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern vermitteln können, die zu supraleitendem Verhalten führt. Die supraleitenden Korrelationen werden aber durch die repulsive Hubbard-Wechselwirkung stark unterdrückt. Eine der physikalischen Situation in den HTSL besser angepaßte Erweiterung ist das *Plakettenmodell*, in dem die TLS nicht lokal mit jedem Gitterplatz sondern mit einer Plakette aus vier Gitterplätzen wechselwirkt. Das Modell soll die dotierten Ladungsträger in den p-Orbitalen der Sauerstoffatome in den CuO_2 -Ebenen beschreiben. Die TLS-Energien g und Ω können hier die gleiche Größenordnung erreichen wie die elektronische Energieskala ($\sim 100\text{meV}$), die durch das Hüpfmatrixelement zwischen den Sauerstoffatomen gegeben ist. Im Plakettenmodell gibt es starke numerische Hinweise auf Supraleitung auch bei großen Werten von U [Fri91].

Das Modell (3.1) kann aber im Prinzip verschiedenste spinartige Anregungen beschreiben. Im Falle von Gitteranregungen liegen die TLS-Energien typischerweise deutlich unter den elektronischen ($g, \Omega < t$). Dagegen wird bei elektronischen Anregungen, wie Ladungsverschiebungen, $g, \Omega \geq t$ sein. TLS spielen auch eine wichtige Rolle in amorphen Metallen. Dort gibt es eine starke (Fast-)Entartung von metastabilen Zuständen. Der Übergang zwischen zwei Zuständen etwa gleicher Energie kann durch lokale Umordnung einer kleinen Anzahl von Atomen erreicht werden. Solche Zustände sind durch eine Energiebarriere getrennt, weshalb bei tiefen Temperaturen das System nur durch quantenmechanisches Tunneln von einem lokalen Minimum in das andere gelangt. Da es extrem unwahrscheinlich ist, mehr als zwei im Phasenraum eng benachbarte Minima zu finden, können derartige Übergänge als Zwei-Niveau-Systeme betrachtet werden. Diese koppeln, wie Phononen, durch die Verschiebung der Ionen an die Elektronen, was im Rahmen des Modells 3.1 beschrieben wird. Die Streuung der Elektronen an den TLS ist möglicherweise für anomale Transporteigenschaften bei tiefen Temperaturen verantwortlich. Außerdem können die TLS allein oder zusammen mit Phononen Supraleitung vermitteln. Für eine Übersicht über TLS in metallischen Gläsern seien die Beiträge von Blank und Johnson in [Gun81] empfohlen.

Im Fall rein inelastischer Kopplung ($\phi = \pi/2$) und $U = 0$ stellt (3.1) eine Spinversion des Holsteinmodells [Hol60] dar, welches definiert ist als:

$$\hat{H}_{\text{Holstein}} = \hat{H}_0 + g \sum_i \hat{n}_i (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_i) + \omega \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i. \quad (3.4)$$

Dabei erzeugt $\hat{a}_i^\dagger$ ein Phonon der Frequenz ω . Nun kann man im TLS-Modell den Spinoperator $\hat{S}^z$ als Summe von Auf- und Absteigeoperatoren, $\hat{S}^z = \hat{S}^+ + \hat{S}^-$, schreiben. $\hat{S}^+$ und $\hat{S}^-$ können als Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren für eine Anregung der Energie Ω verstanden werden. $(\hat{S}^z + 1)/2$ ist dann der Besetzungszahl-Operator (entsprechend $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$), der hier im Gegensatz zu den Phononen nur die Eigenwerte null und eins besitzt. Im Fall $\phi = \pi/2$ und $U = 0$ wird so das TLS-Modell in der Darstellung (3.3) zu einer Art Holsteinmodell, bei der die lokalen Freiheitsgrade nur einfach besetzt werden können. Man spricht deshalb auch von „hard core“-Bosonen. Beim Holsteinmodell hat man es also mit harmonischen Oszillatoren zu tun, beim TLS-Modell mit anharmonischen Anregungen. Beide besitzen nur eine Frequenz (Einstein-Phononen) und wechselwirken lokal mit den Elektronen, d.h. die Kopplung ist implusunabhängig. Beim TLS-Modell wird zusätzlich elastische Streuung der Elektronen an den TLS sowie die Hubbard-Wechselwirkung berücksichtigt.

Neben der Supraleitung ist die Bildung von Ladungsdichtewellen (LDW) von besonderem Interesse. So weisen Wismuthoxid-Supraleiter (z.B. BaBiO_3) eine LDW-Instabilität auf, die mit zunehmender Dotierung verschwindet und in eine supraleitende Phase übergeht. Die Konkurrenz von Supraleitung und LDW wurde mit QMC- und Näherungsmethoden im Rahmen des zweidimensionalen Holsteinmodells intensiv untersucht [Sct88, Sct89a, Mar90, Noa91, Vec92]. Im Limes hoher Dimensionen wurde der Übergang von schwacher zu starker Elektronen-Phonon-Kopplung, sowie die Abhängigkeit der Übergangstemperaturen von der Bandfüllung bestimmt [Fre93, Ciu93].

Im folgenden soll das Modell (3.1) zunächst im Rahmen einer Hartree-Fock-Näherung (HFN) in verschiedenen Parameterbereichen untersucht werden, wobei insbesondere die LDW-Phase von Interesse ist. Anschließend werden QMC-Resultate für den zweidimensionalen Fall gezeigt, die bei geeigneter Wahl der Parameter auf einen Übergang zum LDW-Zustand bei einer wesentlich tieferen Temperatur als in der HFN schließen lassen. Weiter wird der Einfluß von U sowie der Abweichung von der halben Bandfüllung diskutiert. Schließlich wird das Modell auch im Limes hoher Dimensionen behandelt und die Ergebnisse mit dem zweidimensionalen Fall verglichen.

3.1. Hartree-Fock-Näherung

Unter Vernachlässigung von Korrelationen ersetzen wir die Operatorenprodukte in (3.1) durch Produkte von Operatoren mit Erwartungswerten:

$$\begin{aligned}\hat{n}_i \hat{S}_i^z &\approx \langle \hat{n}_i \rangle \hat{S}_i^z + \hat{n}_i \langle \hat{S}_i^z \rangle - \langle \hat{n}_i \rangle \langle \hat{S}_i^z \rangle \\ \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} &\approx \hat{n}_{i\uparrow} \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle + \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle \hat{n}_{i\downarrow} - \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle.\end{aligned}\quad (3.5)$$

Dadurch enthält der Hamiltonoperator nur noch Einteilchen-, bzw. Einspinoperatoren; die z -Komponente der TLS und die lokale Elektronendichte wirken nur noch über ihre Erwartungswerte wie ein chemisches Potential auf die Elektronen. Dennoch ist das Modell auch im Rahmen der HFN nicht allgemein für beliebige Dichte- und TLS-Spin-Verteilungen lösbar. Es können aber verschiedene homogene oder gebrochene Phasen und deren Stabilität untersucht werden. Da die TLS nur an die Elektronendichte, unabhängig vom Spin, koppeln, betrachten wir eine periodischen Modulation der Elektronendichte, die mit einer Modulation der TLS-Spins einhergeht. Dazu bietet sich folgender Ansatz an:

$$\langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle = \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} [n - (-1)^i n_1] \quad (3.6)$$

$$\langle \hat{S}_i^z \rangle = s + (-1)^i s_1. \quad (3.7)$$

Die gesamte Elektronendichte ist dabei $n \equiv \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle$. Der Faktor $(-1)^i$ steht hier für $\exp(iR_i Q)$ mit dem speziellen reziproken Gittervektor $Q = (\pi, \dots, \pi)$. Dadurch wird ein paares Gitter in zwei Untergitter mit unterschiedlichen Elektronendichten zerlegt. n_1 ist der Ordnungsparameter der LDW-Phase. Mit diesem Ansatz wird der Hamiltonoperator in HFN:

$$\begin{aligned}\hat{H}^{HF} &= \hat{H}_{el}^{HF} + \hat{H}_{TLS}^{HF} + \hat{H}_c^{HF} \\ \hat{H}_{el}^{HF} &= \sum_{\sigma} \left\{ \sum_q \varepsilon_q \hat{n}_{q\sigma} + (gs + \frac{1}{2}Un) \sum_i \hat{n}_{i\sigma} + (gs_1 - \frac{1}{2}Un_1) \sum_i (-1)^i \hat{n}_{i\sigma} \right\} \\ \hat{H}_{TLS}^{HF} &= \sum_i \left\{ (gn - \Omega \cos \phi - (-1)^i gn_1) \hat{S}_i^z - \Omega \hat{S}_i^x \sin \phi \right\} \\ \hat{H}_c^{HF} &= -\frac{1}{4}UN(n^2 + n_1^2) - gN(ns - n_1s_1)\end{aligned}\quad (3.8)$$

Die gemischten Terme n_1s und ns_1 verschwinden in der Summe. $\hat{H}_{el}^{HF}$ separiert in den Elektronenspins und $\hat{H}_{TLS}^{HF}$ in den Gitterplatz-Indizes. Durch Fouriertransformation:

$$\hat{a}_{q\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{iqR_j} \hat{c}_{j\sigma} \quad (3.9)$$

erhält man mit $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$:

$$\sum_i (-1)^i \hat{n}_{i\sigma} = \frac{1}{N} \sum_q \hat{a}_{q\sigma}^\dagger \hat{a}_{q+Q,\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{q \in \text{RBZ}} (\hat{a}_{q\sigma}^\dagger \hat{a}_{q+Q,\sigma} + \hat{a}_{q+Q,\sigma}^\dagger \hat{a}_{q,\sigma}). \quad (3.10)$$

In der Summe auf der rechten Seite läuft q nur über eine halbierte Brillouinzone (RBZ). Die übrigen q -Vektoren werden durch Addition von Q erreicht. Da die Einteilchenenergien ε_q für einfach kubische Gitter eine Summe von Kosinustermen ist, gilt hier die „perfect nesting“-Beziehung $\varepsilon_{q+Q} = -\varepsilon_q$. Damit kann der elektronische Anteil von (3.8) zu einer Bilinearform umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{el}}^{\text{HF}} &= \sum_{q \in \text{RBZ}, \sigma} \hat{h}_{q\sigma}^{\text{HF}} = \sum_{q \in \text{RBZ}, \sigma} \hat{C}_{q\sigma}^\dagger \hat{h}_{q\sigma}^{\text{HF}} \hat{C}_{q\sigma} \\ \hat{h}_{q\sigma}^{\text{HF}} &= \begin{pmatrix} \varepsilon_q - \bar{\mu} & h \\ h & -\varepsilon_q - \bar{\mu} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.11)$$

mit den Vektoren $\hat{C}_{q\sigma}^\dagger \equiv (\hat{c}_{q\sigma}^\dagger, \hat{c}_{q+Q,\sigma}^\dagger)$ und den Abkürzungen $\bar{\mu} \equiv \mu - g_s - Un/2$ und $h = gs_1 - Un_1/2$. Die Diagonalisierung von $\hat{h}_{q\sigma}^{\text{HF}}$ liefert schließlich:

$$\hat{h}_{q\sigma}^{\text{HF}} = \sum_{\gamma=\pm 1} \xi_q^\gamma \hat{n}_{q\sigma}^\gamma, \quad \xi_q^\gamma = -\bar{\mu} + \gamma \sqrt{\varepsilon_q^2 + h^2}. \quad (3.12)$$

Die Symmetriebrechung führt so zu einer Aufspaltung des Energiebandes mit einer Bandlücke der Größe $2h$ und somit auch zu einem Metall-Isolatorübergang, sofern das renormierte chemische Potential $\bar{\mu}$ innerhalb der Bandlücke liegt.

Der TLS-Anteil in (3.8) zerfällt in jeweils $N/2$ identische Anteile für die beiden Untergitter A und B.

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{TLS}}^{\text{HF}} &= \frac{N}{2} \hat{h}_A^{\text{HF}} + \frac{N}{2} \hat{h}_B^{\text{HF}} \\ \hat{h}_\gamma^{\text{HF}} &= [g(n - \gamma n_1) - \Omega \cos \phi] S^z - \Omega \hat{S}^x \sin \phi \end{aligned} \quad (3.13)$$

mit den Eigenwerten:

$$\lambda_\gamma^\alpha \equiv \alpha \lambda_\gamma = \alpha \sqrt{[g(n - \gamma n_1) - \Omega \cos \phi]^2 + \Omega^2 \sin^2 \phi}, \quad (3.14)$$

$\gamma \in \{-1, +1\} \cong \{A, B\}$, $\alpha = \pm 1$.

Nun sollen die Selbstkonsistenzgleichungen für die vier Parameter (n, n_1, s, s_1) gewonnen werden. Eine Methode dafür besteht darin, neben den Eigenwerten auch die Eigenvektoren von $\hat{H}^{\text{HF}}$ zu bestimmen und daraus die Erwartungswerte der Elektronendichten und TLS-Magnetisierungen der Untergitter zu berechnen. Bei der zweiten Methode wird dagegen aus den Energieerwartungswerten direkt die Freie Energie¹

$$\mathcal{F}^{\text{HF}} = -\frac{1}{\beta} \ln Z^{\text{HF}}, \quad Z^{\text{HF}} = \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}^{\text{HF}}} \quad (3.15)$$

¹Im großkanonischen Ensemble spricht man vom großkanonischen Potential, was hier aber ebenfalls als Freie Energie bezeichnet werden soll, wenn der Zusammenhang klar ist.

mit der Zustandssumme Z^{HF} berechnet. Die Selbstkonsistenzgleichungen können dann aus den thermodynamischen Stabilitätskriterien gewonnen werden. Wegen seiner einfacheren Form und besseren analytischen Handhabbarkeit soll hier der zweite Weg dargestellt werden.

3.1.1. Berechnung der Selbstkonsistenzgleichungen

Der Hamiltonoperator in HFN separiert, wie wir gesehen haben, in den elektronischen und den TLS-Freiheitsgraden. Letztere bestehen aus zwei Gruppen mit jeweils $N/2$ identischen Moden. Die Zustandssumme in (3.15) faktorisiert daher folgendermaßen:

$$Z^{HF} = \text{Sp}_{\{TLS\}} \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \sum_{\gamma=\pm 1} \hat{h}_{\gamma}^{HF} \right\} \text{Sp}_{\{el\}} \exp \left\{ -\beta \sum_{q \in RBZ, \sigma} \hat{h}_{q\sigma}^{HF} \right\} e^{-\beta \hat{H}_c^{HF}}. \quad (3.16)$$

Die Spur ist allgemein gleich der Summe der Eigenwerte; diese sind für den TLS-Anteil durch (3.14) gegeben. Die Spur über die elektronischen Freiheitsgrade ergibt sich aus den Eigenwerten null und eins des Teilchenzahl-Operators in (3.12):

$$\begin{aligned} \text{Sp}_{\{el\}} \exp \left\{ -\beta \sum_{q \in RBZ, \sigma} \hat{h}_{q\sigma}^{HF} \right\} &= \prod_{q \in RBZ} \prod_{\gamma \sigma} \text{Sp} e^{-\beta \xi_q^{\gamma} \hat{n}_{q\sigma}^{\gamma}} \\ &= \prod_{q \in RBZ} \prod_{\gamma} \left[1 + e^{-\beta \xi_q^{\gamma}} \right]^2, \end{aligned} \quad (3.17)$$

wobei das Quadrat vom Produkt über die Elektronenspins herrührt. Die Freie Energie pro Gitterplatz $f^{HF} = \mathcal{F}^{HF}/N$ wird schließlich:

$$\begin{aligned} f^{HF} &= \frac{2}{\beta N} \sum_{q \in RBZ} \sum_{\gamma=\pm 1} \ln [1 + e^{-\beta \xi_q^{\gamma}}] - \frac{1}{2\beta} \sum_{\gamma=\pm 1} \ln [2 \cosh \beta \lambda_{\gamma}] \\ &\quad - \frac{U}{4} (n^2 + n_1^2) - g(ns - n_1 s_1) \\ \xi_q^{\gamma} &= -\bar{\mu} + \gamma \sqrt{\varepsilon_q^2 + \hbar^2}, \quad \bar{\mu} = \mu - gs - \frac{n}{2}U, \quad \hbar = gs_1 - \frac{n_1}{2}U \\ \lambda_{\gamma} &= \sqrt{[g(n - \gamma n_1) - \Omega \cos \phi]^2 + \Omega^2 \sin^2 \phi} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Die Forderung nach thermodynamischer Stabilität bedeutet, daß f^{HF} stationär bezüglich der vier freien Parameter (n, n_1, s, s_1) ist.

a) Die Differentiation nach der TLS-Magnetisierung s liefert:

$$n = \frac{2}{N} \sum_{q \in RBZ, \gamma} f_{FD}(\beta \xi_q^{\gamma}). \quad (3.19)$$

Das ist die übliche Darstellung der Elektronendichte n als Summe über die Fermi-Dirac-verteilung $f_{FD}(x) = [1 + \exp(x)]^{-1}$ mit dem Faktor 2 für die Spinentartung.

b) Umgekehrt gibt die Differentiation nach n die TLS-Magnetisierung

$$s = - \sum_{\gamma=\pm 1} \frac{\tanh \beta \lambda_{\gamma}}{2 \lambda_{\gamma}} [g(n - \gamma n_1) - \Omega \cos \phi]. \quad (3.20)$$

c) Die Untergittermagnetisierung s_1 der TLS ergibt sich aus $\partial f^{HF} / \partial n_1 = 0$ zu:

$$s_1 = - \sum_{\gamma=\pm 1} \gamma \frac{\tanh \beta \lambda_{\gamma}}{2 \lambda_{\gamma}} [g(n - \gamma n_1) - \Omega \cos \phi]. \quad (3.21)$$

s_1 verschwindet offensichtlich, wenn der LDW-Ordnungsparameter n_1 gleich null ist.

d) n_1 folgt schließlich aus der Differentiation nach s_1 :

$$n_1 = \frac{2}{N} \sum_{q \in RBZ, \gamma} \frac{-\gamma \hbar}{\sqrt{\varepsilon_q^2 + \hbar^2}} f_{FD}(\beta \xi_q^{\gamma}). \quad (3.22)$$

Die Gleichungen (3.19) bis (3.22) stellen das geschlossene System von Selbstkonsistenzgleichungen dar, die im folgenden ausgewertet werden sollen.

Bis hierher erfolgte in Darstellung im großkanonischen Ensemble, d.h. das chemische Potential μ wurde als gegeben betrachtet, und die Elektronendichte n folgte aus μ als thermischer Mittelwert. Alternativ kann auch n vorgegeben werden, was die Anzahl freier Parameter auf drei reduziert. Speziell bei halber Bandfüllung ergeben sich weitere Vereinfachungen.

3.1.2. Phasenübergang zweiter Ordnung

Bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung verschwindet der Ordnungsparameter am kritischen Punkt kontinuierlich. In diesem Fall können die Selbstkonsistenzgleichungen (3.19) bis (3.22) für kleine n_1 und s_1 entwickelt werden. In (3.22) verschwindet n_1 mit $\hbar$. In führender Ordnung können daher $\hbar$ und n_1 in der Wurzel und im Exponenten zu Null gesetzt werden, und wir erhalten am kritischen Punkt:

$$\frac{n_1}{\hbar} \Big|_c = -\frac{2}{N} \sum_{q \in RBZ} \sum_{\gamma} \frac{\gamma}{|\varepsilon_q|} f_{FD}(-\beta_c(\tilde{\mu} - \gamma |\varepsilon_q|)) \equiv \frac{1}{I(T_c, \tilde{\mu})} \quad (3.23)$$

mit der kritischen Temperatur $T_c = 1/\beta_c$. Im Fall der halben Bandfüllung ist $\tilde{\mu} = 0$, und wir erhalten:

$$\frac{n_1}{\hbar} \Big|_c = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\tanh(\beta_c \varepsilon_q/2)}{\varepsilon_q} = \int_{-\infty}^{\infty} dE N(E) \frac{\tanh(\beta_c E/2)}{E}, \quad (3.24)$$

wobei die Summe nun über die ganze BZ läuft, bzw. das Integral über die Zustandsdichte $N(E)$ des nicht-wechselwirkenden Elektronengases. Wenn wir nun das reine Hubbardmodell ohne Ankopplung an die TLS betrachten (also $g = 0$), gibt die linke Seite von (3.24)

gerade $-2/U$. Die Gleichung hat für beliebige negative Werte von U eine Lösung, und ist äquivalent zum HF-Ergebnis für die antiferromagnetische Phase bei positivem U [vDon90] (siehe auch Anhang C). Die Äquivalenz ist Ausdruck der Teilchen-Loch-Symmetrie bei halber Bandfüllung. Für $g \neq 0$ muß hingegen zunächst s_1 durch n_1 ausgedrückt werden. Nach einigen Umformungen erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{s_1}{n_1} \Big|_c &= \frac{1}{b} \tanh(\beta_c g b) \left[1 - \frac{a^2}{b^2} \left(1 - \frac{2\beta_c b g}{\sinh(2\beta_c b g)} \right) \right] \\ a &\equiv n - \tilde{\Omega} \cos \phi, \quad b \equiv \sqrt{n^2 - 2n\tilde{\Omega} \cos \phi + \tilde{\Omega}^2} \end{aligned} \quad (3.25)$$

mit der normierten TLS-Frequenz $\tilde{\Omega} = \Omega/g$. Dies eingesetzt in (3.23) liefert die allgemeine – und recht unanschauliche – Gleichung für die kritische Temperatur:

$$\frac{g}{b} \tanh(\beta_c g b) \left[1 - \frac{a^2}{b^2} \left(1 - \frac{2\beta_c b g}{\sinh(2\beta_c b g)} \right) \right] - \frac{U}{2} = I(T_c, \tilde{\mu}) \quad (3.26)$$

Was können wir aus (3.26) lernen? Wir betrachten zunächst den Fall halber Bandfüllung ($\mu = 0$) und $U = 0$. $I(T, 0)$ ist eine monoton steigende Funktion der Temperatur, die bei $T = 0$ verschwindet und für große Temperaturen gegen $2T$ konvergiert. Die linke Seite nennen wir $J(T, g, \Omega, \phi, n)$. J konvergiert für $T = 0$ gegen $g(b^2 - a^2)/b^3$ und geht für $T \rightarrow \infty$ wie $\tanh(bg/T)$ gegen null. Gemäß (3.25) verschwindet J bei $T = 0$ nur für den Fall, daß $\sin \phi = 0$ gilt. Ansonsten müssen sich die beiden Kurven $I(T, \dots)$ und $J(T, 0)$ schneiden, d.h. (3.26) ist für eine geeignete Temperatur T_c stets erfüllbar. Abbildung 3.1 zeigt die beiden Kurven für verschiedene Parametersätze. Überwiegt der inelastische Anteil der Elektron-TLS-Streuung ($\phi = \pi/2$ in Abb. 3.1c), so ist J nahezu temperaturunabhängig, und die kritische Temperatur wächst monoton mit g . Dies ist bei kleinen Winkeln ϕ nicht länger der Fall, sondern es treten Maxima in J auf, die für hinreichend große g zu mehreren Schnittpunkten der beiden Kurven führen können (Abb. 3.1a,b).

Im Fall schwacher Kopplung wird die kritische Temperatur sehr klein sein, und (3.26) wird für $\beta_c g b \gg 1$:

$$\frac{2g}{b} \left[1 - \frac{a^2}{b^2} \right] - U = 2I(\beta_c, \tilde{\mu}) \quad (3.27)$$

Die linke Seite der Gleichung ist jetzt temperaturunabhängig und läßt sich als effektive attraktive Wechselwirkungsstärke U_{eff} interpretieren. U_{eff} ist eine Funktion der Parameter $g, \tilde{\Omega}, \phi$ und U . Offensichtlich verschwindet der TLS-Anteil von U_{eff} für $\phi = 0$ und $\phi = \pi$, da hier $a = b$ gilt. Dies bedeutet aber nun nicht, daß keine LDW-Ordnung vorliegen kann, sondern nur, daß Näherung schwacher Kopplung hier nicht angewandt werden kann. In der Tat zeigt Abbildung 3.1a, daß bei hinreichend großem g auch hier Schnittpunkte der Kurven I und J auftreten. Speziell bei $\tilde{\Omega} = 1$ divergiert $J(T, g, g, \phi, 1) = g^2/T$ bei tiefen

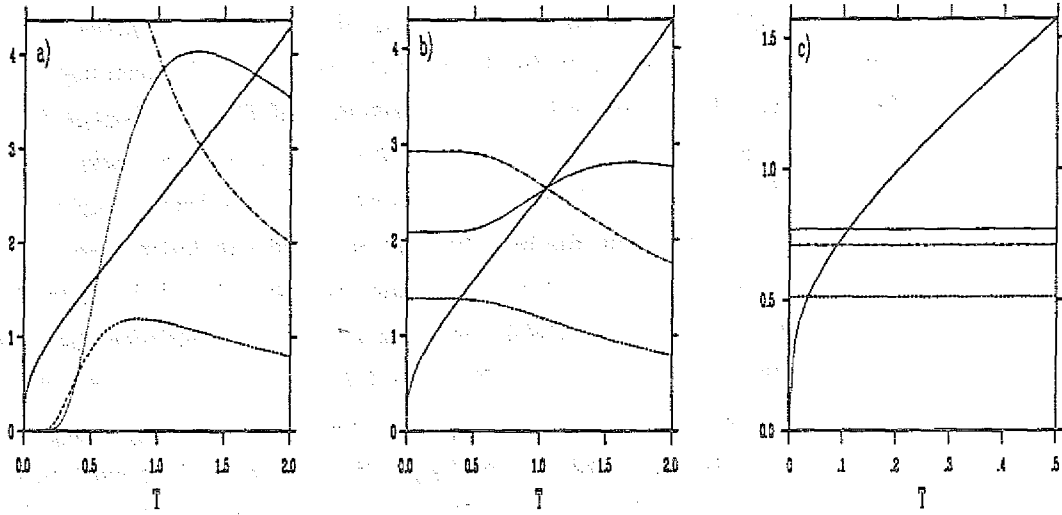


Abbildung 3.1: Graphische Bestimmung der kritischen Temperatur aus dem Schnittpunkt der Funktionen I (durchgezogene Kurve) und J (gebrochene Kurven). Parameter $\Omega = 2, U = 0, \mu = 0, g = 4/3$ (gestrichelt), $g = 2$ (strichpunktiert) und $g = 3$ (punktiert). a) $\phi = 0$, b) $\phi = \pi/5$, c) $\phi = \pi/2$.

Temperaturen und wird nie temperaturunabhängig.

Aus der Äquivalenz zur antiferromagnetischen HFN des Hubbardmodells können wir schließen, daß T_c bei schwacher Kopplung exponentiell klein wird, $T_c \propto \exp(-2\pi t/U_{eff})$. Im entgegengesetzten Fall starker Kopplung wird die kritische Temperaturen T_c groß gegenüber der Bandbreite W und dem Parameter gb sein, und mit $I(T_c, 0) \approx 2T$ vereinfacht sich (3.26) zu:

$$T_c \approx -\frac{U}{8} + \sqrt{\frac{g^2}{2} + \frac{U^2}{64}} \quad (3.28)$$

Bei $U = 0$ ergibt sich also ein linearer Anstieg mit g . In diesem Fall ist die Bedingung $T_c \gg gb$ aber nur erfüllbar, wenn $\tilde{\Omega} \approx 1$ und $\phi \approx 0$ gilt. Allerdings ist für starke Kopplung zu erwarten, daß die HFN die kritische Temperatur stark überschätzt. Ist die dominierende Energieskala durch die Eigenwerte $\pm gb$ der TLS gegeben, so kann die Methode der Unitären Transformation angewandt werden [Fri90]. Dabei wird $\hat{H}$ so transformiert, daß der TLS-Anteil diagonal ist. Die TLS werden dann im Grundzustand angenommen, was einen effektiven, rein fermionischen Hamiltonoperator mit einer lokalen, attraktiven Wechselwirkung:

$$U_{UT} = g \left(\tilde{\Omega} + \sqrt{\tilde{\Omega}^2 - 4\tilde{\Omega} \cos \phi + 4} - 2\sqrt{\tilde{\Omega}^2 - 2\tilde{\Omega} \cos \phi + 1} \right) - U. \quad (3.29)$$

zur Folge hat. Abbildung 3.2 zeigt U_{eff}/g und U_{UT}/g für $U = 0$ als Funktion von ϕ bzw. $\tilde{\Omega}$. Für $\phi \rightarrow \pi$ ist es für die TLS nach Modell (3.1) günstig, sich ferromagnetisch mit

$\langle \hat{S}_i^z \rangle = -1$ anzuordnen. Sie wirken dann nur wie ein (homogenes) chemisches Potential auf die Elektronen und tragen nicht zu einer effektiven Anziehung bei. Für große Werte von $\tilde{\Omega}$ sind U_{eff} und U_{UT} maximal bei $\pi/2$. Bei kleineren $\tilde{\Omega}$ werden die Kurven asymmetrisch und das Maximum verschiebt sich zu kleineren Winkeln. Daß U_{eff} im Gegensatz zu der Unitären Transformation auch bei kleinen $\tilde{\Omega}$ für $\phi = 0$ verschwindet, ist – wie bereits diskutiert – ein Artefakt der Näherung schwacher Kopplung. In diesem Parameterbereich treten Phasenübergänge 1. Ordnung auf, die im folgenden Abschnitt diskutiert werden. Die TLS können dann besonders gut eine effektive Anziehung zwischen den Elektronen vermitteln, wenn ihre Frequenz Ω von gleicher Größenordnung wie die Wechselwirkungsstärke g ist (siehe Abbildung 3.2b). Für $\tilde{\Omega} \ll 1$ sowie für $\tilde{\Omega} \gg 1$ ist dagegen eine ferromagnetische Anordnung der TLS mit $\langle \hat{S}_i^z \rangle = -1$ bzw. $\langle \hat{S}_i^z \rangle = -\cos \phi$ energetisch günstig. Die Werte für U_{eff} liegen in der Regel deutlich über U_{UT} . Dies war aber zu erwarten, da U_{eff} eine Näherung für schwache, U_{UT} dagegen für starke Kopplung ist. Genauer: die Unitäre Transformation ist anwendbar für $gb \gg W$, die Näherung „schwacher Kopplung“ für $W > gb \gg T_c$.

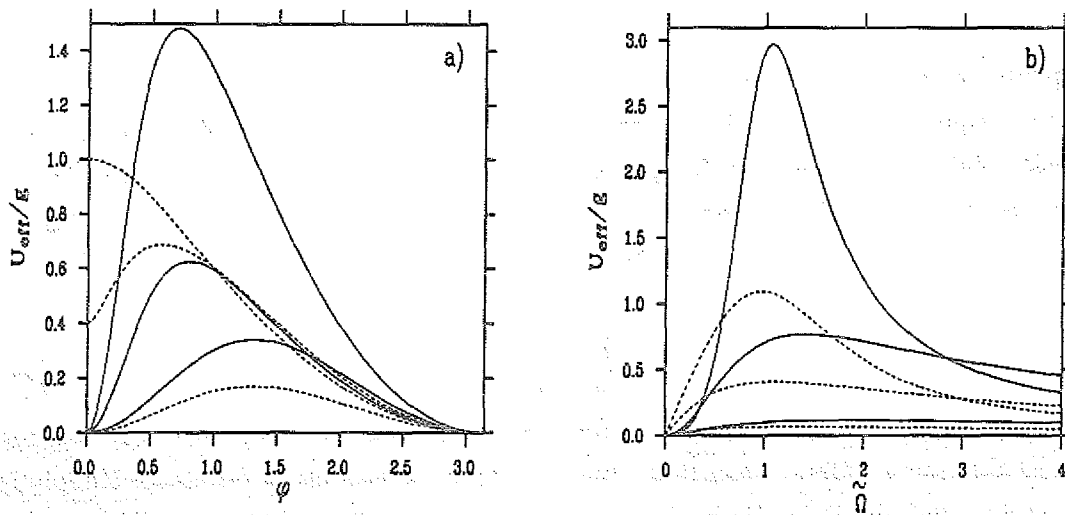


Abbildung 3.2: Effektive attraktive Elektron-Elektron-Wechselwirkung U_{eff} bzw. U_{UT} in HFN (volle Kurven) bzw. aus Unitärer Transformation [Fri90] (gebrochene Kurven) a) als Funktion von ϕ für $\tilde{\Omega} = 0.5, 1.8, 6$, b) als Funktion von $\tilde{\Omega}$ für $\phi = 0.2\pi, 0.5\pi, 0.8\pi$ (jeweils von oben nach unten).

3.1.3. Phasenübergang erster Ordnung

Die Tatsache, daß in den Selbstkonsistenzgleichungen (3.19) bis (3.22) der LDW-Ordnungsparameter n_1 mit der TLS-Untergittermagnetisierung s_1 kontinuierlich verschwindet, ist

allerdings kein hinreichendes Kriterium für einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Voraussetzung dafür ist zusätzlich, daß die gebrochene Phase bis $n_1 \rightarrow 0$ thermodynamisch stabil ist. Ein Phasenübergang erster Ordnung, bei dem der Ordnungsparameter diskontinuierlich verschwindet, tritt typischerweise dann auf, wenn ein äußeres symmetriebrechendes Feld existiert. In dem Fall ist die Freie Energie nicht mehr eine symmetrische Funktion des Ordnungsparameters. Aufgrund der A-B-Symmetrie des Gitters ist aber (in Abwesenheit äußerer Felder) das TLS-Modell invariant unter der Transformation $n_1 \rightarrow -n_1$, weshalb die Freie Energie bei $n_1 = 0$ stets extremal wird. Ein Phasenübergang erster Ordnung kann hier auftreten, wenn der Punkt $n_1 = 0$ meta- oder instabil wird. Dieses Verhalten wird in der Tat im Rahmen der HFN beobachtet.

(3.19) bis (3.22) können durch Einsetzen ineinander als eine Selbstkonsistenzgleichung z.B. für den Ordnungsparameter, $n_1 = f(n_1)$, aufgefaßt werden. Abbildung 3.3 zeigt zwei verschiedene Szenarien für den Phasenübergang bei $n = 1$ und $U = 0$: Für $\tilde{\Omega} = 1$ und $\phi = \pi/5$ besitzt $f(n_1)$ für $n_1 > 0$ bei tiefen Temperaturen einen Schnittpunkt mit der Winkelhalbierenden – d.h. einen Fixpunkt – der mit steigender Temperatur kontinuierlich gegen null geht. Im Gegensatz dazu wird für $\tilde{\Omega} = 1/2$ bei einer bestimmten Temperatur T_1 der Fixpunkt bei $n_1 = 0$ stabil², und es entsteht ein instabiler Fixpunkt bei $n_1 > 0$. Welcher der beiden stabilen Fixpunkte tatsächlich angenommen wird, hängt vom Wert der Freien Energie, bzw. von der temperaturabhängigen Steigung von f in den Fixpunkten ab. Abbildung 3.4 zeigt die korrespondierenden Werte der Freien Energie als Funktion von n_1 . Dabei wurde s so gewählt, daß das Elektronenband halb gefüllt ist ($n = 1$). Abbildung 3.4 stellt einen – jetzt eindimensionalen – Schnitt durch den Parameter-Unterraum dar, bei dem f^{HF} für gegebenes n_1 minimal ist, d.h. s_1 wurde gemäß (3.21) bestimmt. In Abbildung 3.4a verschiebt sich das Minimum der Freien Energie mit wachsender Temperatur kontinuierlich zu $n_1 = 0$. Dagegen entsteht in Abbildung 3.4b bei einer Temperatur T_1 neben dem Minimum für $n_1 \approx 0.9$ ein weiteres bei $n_1 = 0$. Dazwischen liegt notwendigerweise ein Maximum. Die drei Extrema entsprechen den drei Schnittpunkten in Abbildung 3.3b. Erreicht die Temperatur einen Wert T_2 , so wird das neue Minimum das thermodynamisch stabilere, und ein Phasenübergang erster Ordnung tritt ein. Oberhalb einer Temperatur T_3 wird schließlich der erste, bis dahin metastabile Fixpunkt instabil (nicht mehr gezeigt). In einem etwas anderen Szenario gibt es bereits im Grundzustand zwei Minima bei Werten von $n_1 \neq 0$. Der Zustand mit kleinerem Ordnungsparameter geht dann kontinuierlich in die homogene Phase über. Beispiele für verschiedene Phasenübergänge mit zwei Minima in der Freien Energie zeigt Abbildung 3.5. Der Ordnungsparameter zeigt eine sehr starke Hysterese als Funktion der Temperatur. 3.5a korrespondiert dabei mit der Situation in Abbildung 3.4b; 3.5b stellt das Szenario mit dem zweiten Minimum bei $n_1 \approx 0.4$ dar.

²Ein Fixpunkt ist dann stabil, wenn die Steigung von f kleiner als eins ist.

Der thermodynamische Phasenübergang geschieht bei der Temperatur T_2 (gestrichelt), d.h. das zweite Minimum in Abbildung 3.5b (bei $n_1 \approx 0.4$) ist nur metastabil.

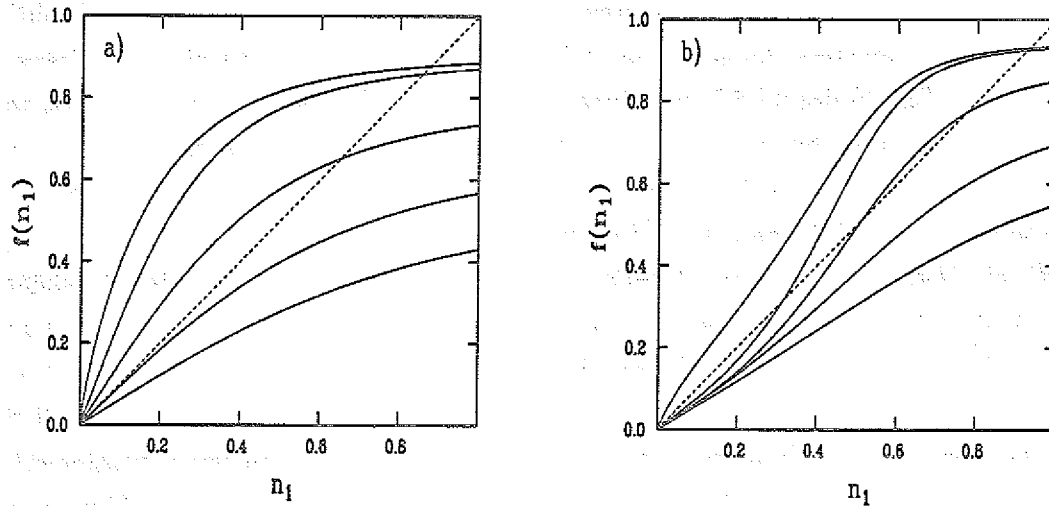


Abbildung 3.3: Beispiele für die Selbstkonsistenzgleichung des Ordnungsparameters n_1 bei $\bar{\mu} = 0, U = 0, \phi = \pi/5$. a) Phasenübergang 2. Ordnung bei $\Omega = g = 3$. b) Phasenübergang 1. Ordnung bei $\Omega = 2, g = 4$. Temperaturen jeweils: $T = 0, 0.6, 1.2, 1.8, 2.4$.

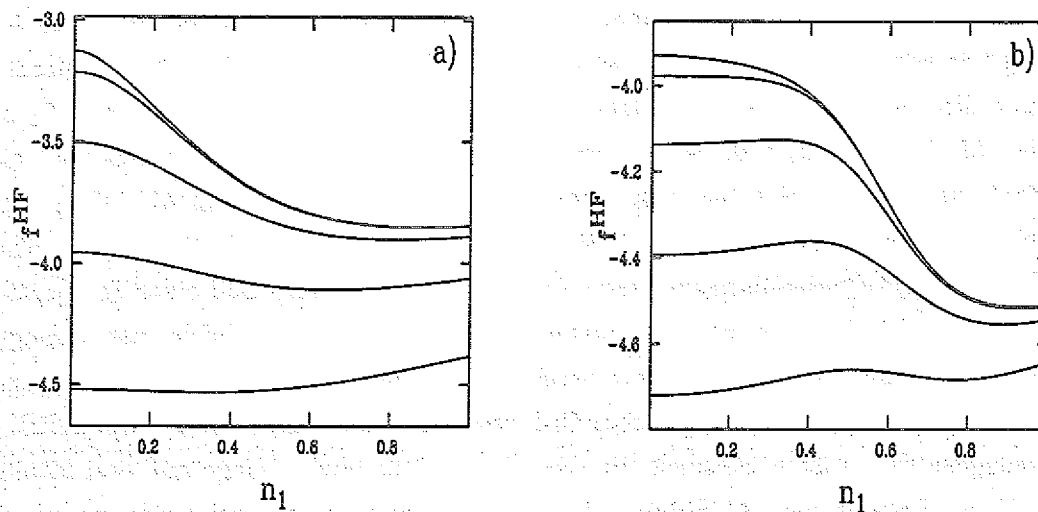


Abbildung 3.4: Freie Energie als Funktion des Ordnungsparameters n_1 . Parameter wie in Abb. 3.3. Temperatur äquidistant zwischen 0 und 1.6 (a) bzw. 0 und 1.2(b).

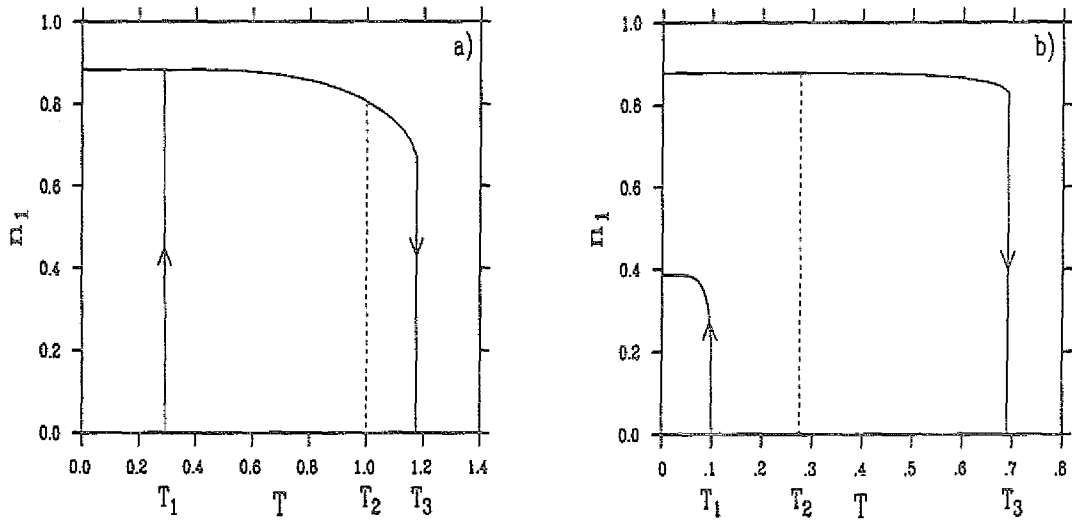


Abbildung 3.5: LDW-Ordnungsparameter vs. Temperatur in HFN bei halber Bandfüllung. a) $\phi = 0.2\pi, \Omega = 2, g = 4$. b) $\phi = 0.35\pi, \Omega = 2, g = 6$. Gestrichelte Kurven: Gleiche Freie Energien der beiden Lösungen.

Das Modell (3.1) besitzt sehr viele Parameter. Nun soll abschließend an einigen Beispielen das Phasendiagramm (kritische Temperaturen) bei halber Bandfüllung und $U = 0$ gezeigt werden (Abbildung 3.6). Die kritische Temperatur ist bei festem Winkel ($\phi = 0.2\pi$) für kleine Werte von g/Ω exponentiell klein. Sie erreicht bei $g/\Omega \approx 1.2$ ein Maximum. Etwa ab dem Maximum tritt Hysterese auf; die Temperatur T_3 , bei der der erste Fixpunkt instabil wird, wächst linear mit g/Ω , die thermodynamische Phasengrenze, T_2 , nimmt dagegen langsam ab. Bei festen Werten von $g = 6, \Omega = 2$ (Abbildung 3.6b) nimmt die kritische Temperatur mit ϕ monoton ab. Bei $\phi \approx 0.38\pi$ wird die Lösung mit „großem“ n_1 für alle Temperaturen metastabil. Die Temperatur T_2 ist daher ab hier nicht mehr definiert, weshalb die drei Kurven nicht in einem Punkt zusammenlaufen. Bei etwas größeren Werten ($\pi \approx 0.4\pi$) gibt es nur noch ein Minimum der Freien Energie; dieses geht mit der Temperatur kontinuierlich gegen null. Die Instabilität als Funktion von ϕ läßt sich wie folgt erklären. Der TLS-Anteil des Hamiltonoperators in HFN (3.8) enthält Terme der Form:

$$\Omega \left[\frac{g}{\Omega} (1 - (-1)^i n_1) - \cos \phi \right] \hat{S}_i^z. \quad (3.30)$$

Da hier $g/\Omega > 1$ gilt, ist auf „ungeraden“ Gitterplätzen eine TLS-Magnetisierung $\langle S_i^z \rangle = -1$ immer günstig. Die Selbstkonsistenzgleichungen liefern für den Fixpunkt etwa $n_1 \approx 0.9$. Eine antiferromagnetische Anordnung der TLS-Spins, die mit einer LDW-Struktur der Elektronen korrespondiert, ist daher nur günstig, wenn

$$0.1 \frac{g}{\Omega} < \cos \phi \quad (3.31)$$

gilt. Mit $g/\Omega = 3$ folgt hier in der Tat ein kritischer Wert von $\phi_c \approx 0.4\pi$.

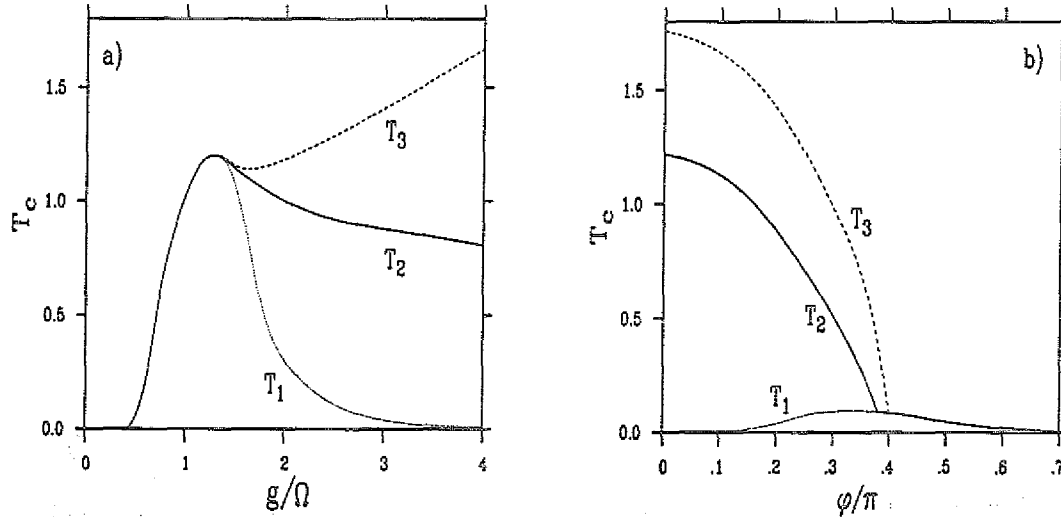


Abbildung 3.6: Phasendiagramm des TLS-Modell in HFN bei halber Bandfüllung und $U = 0$. a) T_c vs. g/Ω bei $\phi = 0.2\pi$, $\Omega = 2$. Gestrichelte Kurve: Instabilität des „oberen“ Fixpunktes (siehe auch Abb. 3.5 und 3.4). Punktstrich-Kurve: Instabilität des „unteren“ Fixpunktes (T_1), dazwischen Koexistenzbereich mit physikalischer Übergangstemperatur T_2 (durchgezogene Kurve). b) T_c vs. ϕ bei $\Omega = 2$, $g = 6$. Kurven wie in a)

Insgesamt zeigt sich, daß bereits in einer stark vereinfachenden Hartree-Fock-Näherung mit LDW-Ansatz interessante Phasenübergänge mit z.T. großen Hystereseeffekten gefunden werden. Ob die HFN die Eigenschaften des TLS-Modells insbesondere bei mittleren und starken Wechselwirkungen und hohen Elektronendichten korrekt wiedergibt, kann – da eine exakte Lösung nicht vorliegt – nur durch den Vergleich mit Untersuchungen endlicher Systeme herausgefunden werden. Die Anwendung des GQMC-Verfahrens auf das TLS-Modell sowie der Vergleich der Resultate soll im folgenden Abschnitt dargestellt werden.

3.2. Monte-Carlo-Simulation

3.2.1. Weltlinienformulierung der TLS

Die Behandlung des TLS-Modells (3.1) im Rahmen der Großkanonischen Quanten-Monte-Carlo-(GQMC-) Methode beruht auf der in Kapitel 2.1 dargestellten Trotter-Zerlegung:

$$e^{-\beta\hat{H}} \approx \prod_{i=1}^L e^{-\Delta\tau\hat{H}_0} e^{-\Delta\tau\hat{H}_H} e^{-\Delta\tau\hat{H}_{TLS}} e^{-\Delta\tau\hat{H}_{e,TLS}} \quad (3.32)$$

mit $\Delta\tau = \beta/L$. Die elektronischen Freiheitsgrade werden wieder nach einer Hubbard-Stratonovich-Transformation ausintegriert, was zu einem äußeren, wechselwirkenden Hilfs-

feld (dem HS-Feld) führt. Die Zwei-Niveau-Systeme können mit einem Weltlinienverfahren (siehe Abschnitt 2.5) behandelt werden. Wir folgen hier weitgehend dem in [Fri90] gegebenen Formalismus. Zunächst wählen wir eine Ortsraum-Darstellung der TLS, in der die Operatoren $\hat{S}_i^z$ diagonal sind:

$$|\tau_\nu\rangle = \prod_{i=1}^L \otimes |\tau_{\nu i}\rangle = |\tau_{\nu 1} \cdots \tau_{\nu L}\rangle \quad (3.33)$$

$$\hat{S}_i^z |\tau_{\nu i}\rangle = \tau_{\nu i} |\tau_{\nu i}\rangle \quad (3.34)$$

$$\hat{S}_i^x |\tau_{\nu i}\rangle = |-\tau_{\nu i}\rangle. \quad (3.35)$$

Die zweiwertigen Parameter $\tau_{\nu i} = \pm 1$ tragen also einen „Zeit“-Index $\nu = 1, \dots, L$ sowie einen Gitterindex $i = 1, \dots, N$. In (3.32) werden nun LN vollständige Sätze von Zuständen $|\tau_{\nu i}\rangle$ eingefügt. Für eine gegebene Trotterschicht ν erhält man damit Matrixprodukte der Form

$$\begin{aligned} & \prod_i \langle \tau_{\nu i} | e^{\Delta\tau\Omega[\hat{S}_i^z \cos\phi + \hat{S}_i^x \sin\phi]} e^{-\Delta\tau g \hat{n}_i \hat{S}_i^z} | \tau_{\nu-1 i} \rangle \\ &= \prod_i h(\tau_{\nu i}, \tau_{\nu-1 i}) e^{-\Delta\tau g \hat{n}_i \tau_{\nu-1 i}} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Die TLS-Spins $\tau_{\nu i}$ koppeln ähnlich wie die HS-Spins an die lokale Elektronendichte. Ein Unterschied besteht darin, daß die Ankopplung der HS-Spins im repulsiven Fall ($U > 0$) spinabhängig ist. Bei den TLS ist, wie im Fall $U < 0$, die Wechselwirkung für beide Spinrichtungen identisch, sie wirken daher wie zeitabhängige chemische Potentiale. Ein positiver Effekt ist, daß hier wie im reinen Hubbardmodell für $U \leq 0$ das Produkt der Fermionendeterminanten positiv semi-definit ist, also kein Vorzeichenproblem auftreten kann. Zusätzlich zu der TLS-Elektron-Kopplung gibt es hier Faktoren durch die Dynamik der TLS:

$$\begin{aligned} h(\tau_{\nu i}, \tau_{\nu-1 i}) &= \langle \tau_{\nu i} | e^{\Delta\tau\Omega[\hat{S}_i^z \cos\phi + \hat{S}_i^x \sin\phi]} | \tau_{\nu-1 i} \rangle \\ &= \cosh(\Delta\tau\Omega) \begin{cases} 1 + \tanh(\Delta\tau\Omega) \cos\phi & , \tau_{\nu i} = \tau_{\nu-1 i} = 1 \\ 1 - \tanh(\Delta\tau\Omega) \cos\phi & , \tau_{\nu i} = \tau_{\nu-1 i} = -1 \\ \tanh(\Delta\tau\Omega) \sin\phi & , \tau_{\nu i} \neq \tau_{\nu-1 i} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Während der MC-Simulation werden die TLS-Spins genau wie die HS-Spins in Einzelspinflips geändert. Dies erlaubt, wie in Kapitel 2.1 geschildert, eine effektive Neuberechnung der elektronischen Einteilchen-Greenfunktion. Die Übergangswahrscheinlichkeit bezüglich der TLS für einen Umklappprozeß $\tau_{\nu i} \rightarrow \tau'_{\nu i} = -\tau_{\nu i}$ wird:

$$\begin{aligned} P_{\nu i} &= \frac{\langle \tau_{\nu+1 i} | \hat{U}(\Delta\tau) | \tau'_{\nu i} \rangle \langle \tau'_{\nu i} | \hat{U}(\Delta\tau) | \tau_{\nu-1 i} \rangle}{\langle \tau_{\nu+1 i} | \hat{U}(\Delta\tau) | \tau_{\nu i} \rangle \langle \tau_{\nu i} | \hat{U}(\Delta\tau) | \tau_{\nu-1 i} \rangle} \\ &= [\tanh(\Delta\tau\Omega)]^{2l_{\nu i}} [1 + \tanh(\Delta\tau\Omega)]^{\tau_{\nu i} - l_{\nu i}} [1 - \tanh(\Delta\tau\Omega)]^{-\tau_{\nu i} - l_{\nu i}} \end{aligned} \quad (3.38)$$

mit den Abkürzungen $l_{\nu i} = \tau_{\nu i}(\tau_{\nu-1 i} + \tau_{\nu+1 i})/2$ und $\hat{U}(\Delta\tau) \equiv \exp(-\Delta\tau\Omega[\hat{S}_i^z \cos\phi + \hat{S}_i^y \sin\phi])$. Die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit bzgl. der fermionischen Freiheitsgrade sowie der Einteilchen-Greenfunktion erfolgt vollkommen analog zu Gleichungen (2.26) bis (2.32).

3.2.2. Homogene Phase

Zunächst wollen wir das TLS-Modell im homogenen Bereich des Phasendiagramms untersuchen. Dazu wählen wir eine mittlere TLS-Elektron-Kopplung von $g = 1$ und betrachten den Fall rein inelastischer Kopplung $\phi = \pi/2$. Hier ergibt die Hartree-Fock-Behandlung eine maximale kritische Temperatur bei $\Omega \approx 1.5$ von $T_c = 0.023$. Für die Monte-Carlo-Rechnung wurde eine Temperatur von $T = 1/16$ gewählt, d.h. tief in der homogenen Phase. Zum Vergleich mit der HFN wurde ein sehr kleines System von 12 Gitterplätzen mit periodischen Randbedingungen simuliert. Die HF-Ergebnisse waren bei dieser Temperatur nahezu unabhängig von der Systemgröße. Erst bei wesentlich tieferen Temperaturen werden Effekte durch die mehr oder weniger stark gefüllten Schalen bei unterschiedlichen Systemgrößen relevant.

Abbildung 3.7a zeigt die mittlere TLS-Magnetisierung $m_{TLS} \equiv \langle \hat{S}^z \rangle$ (untere Kurve) als Funktion der TLS-Frequenz Ω . Der Verlauf ist anschaulich zu verstehen: Bei kleinen Frequenzen überwiegen die Terme $g\hat{n}_i\hat{S}_i^z$ in (3.1), und die TLS gewinnen Energie, indem sie sich ferromagnetisch mit $\langle \hat{S}^z \rangle = -1$ anordnen. Ist dagegen $\Omega \gg g$, so werden sich die TLS in x -Richtung ausrichten, und die Magnetisierung in z -Richtung verschwindet. Die Rechnungen wurden im großkanonischen Ensemble bei $\mu = 0$ durchgeführt. Da die TLS aber wie chemische Potentiale auf die Elektronen wirken, erhöht sich bei negativer TLS-Magnetisierung die Elektronendichte, wie in Abbildung 3.7a (obere Kurve) zu sehen ist. Der Gewinn an Wechselwirkungsenergie durch die Erhöhung der Elektronendichte konkurriert dabei mit dem Verlust an kinetischer Energie, weshalb die Besetzung nur leicht erhöht wird. Die Ergebnisse der GQMC-Rechnungen stimmen sehr gut mit der HFN-Näherung überein (durchgezogene Kurven). Abbildung 3.7b zeigt GQMC-Resultate für die Doppelbesetzungsdichte d/d_0 und das effektive Hüpfmatrixelement

$$t_{eff} \equiv \frac{\langle \hat{H}_0 \rangle}{\langle \hat{H}_0 \rangle_0}, \quad (3.39)$$

jeweils normiert auf die Werte freier Elektronen mit der entsprechenden Teilchendichte. Bei kleinen Ω bewirken die TLS – wie in der HFN – nur eine Verschiebung des chemischen Potentials, d.h. eine Änderung der Elektronendichte. Bei großen Ω werden die Elektronen praktisch von den TLS entkoppelt. Für $\Omega \approx g$ gibt es dagegen Abweichungen vom Einteilchenbild. Hier erhöht sich die Doppelbesetzungsdichte und die Beweglichkeit der

Elektronen wird durch die TLS eingeschränkt. Die Erhöhung von d bedeutet, daß die TLS eine attraktive Wechselwirkung zwischen den Elektronen vermitteln. Aufgrund des anziehenden Potentials zwischen ihnen, wird das effektive Hüpfmatrixelement und damit die Beweglichkeit kleiner.

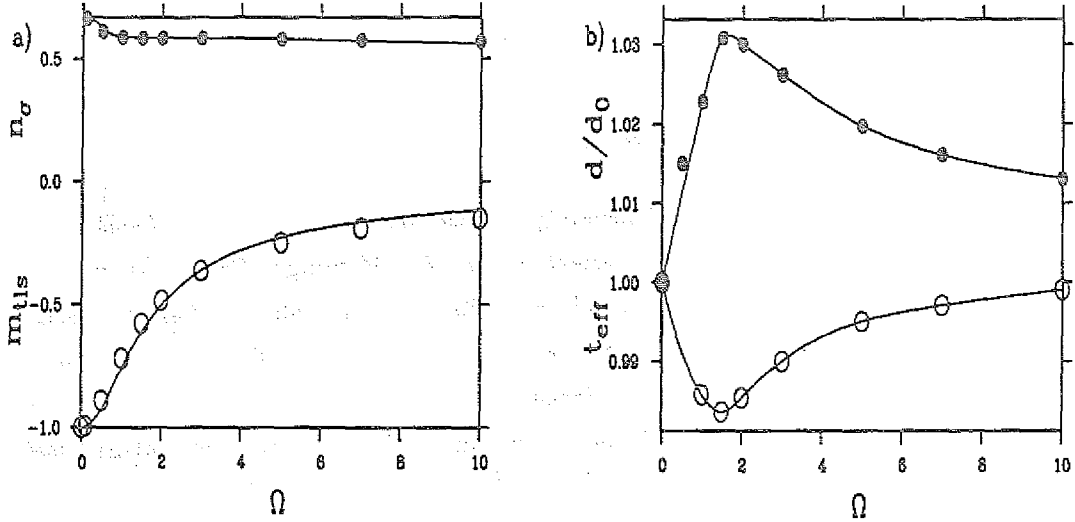


Abbildung 3.7: GQMC-Resultate für das TLS-Modell auf dem 12-er Ring bei $\beta = 16, g = 1, \phi = \pi/2, U = 0, \mu = 0$. a) TLS-Magnetisierung m_{TLS} (o) und Elektronendichte (pro Spin) n_σ (e) vs. Ω . Durchgezogene Kurven: HFN-Resultate. b) Doppelbesetzung (e) und effektives Hüpfmatrixelement (o) der Elektronen normiert auf die Werte für freie Elektronen auf dem 12-er Ring. Durchgezogene Kurven sollen hier nur das Auge führen.

3.2.3. Gebrochene Phase

Im folgenden soll die Bildung von Ladungsdichtewellen in Modell (3.1) numerisch untersucht werden. Im Rahmen der HFN hatte sich gezeigt, daß hierfür kleine Winkel ϕ und Energieparameter $g \approx \Omega \gtrsim t$ günstig sind (siehe Abbildung 3.6). Bei kleinen ϕ und großen Werten von g treten allerdings bei der Monte-Carlo-Simulation Probleme durch geringe Übergangswahrscheinlichkeiten der TLS-Spins auf. Der Grund dafür sind verschiedene ausgeprägte lokale Minima der Energie – beispielsweise die ferromagnetische und die antiferromagnetische Anordnung der TLS-Spins –, die im Phasenraum weit auseinanderliegen³. Das System kann nicht in vertretbarer Zeit von einem Minimum in das andere gelangen, sondern „rastet“ vielmehr für lange Zeit in einem Zustand „ein“. Aus diesem Grund dürfen der Winkel ϕ nicht zu klein und die TLS-Energien g und Ω nicht zu groß gewählt werden.

³ „Weit“ in dem Sinne, daß eine große Anzahl von Einzel-Spinflips notwendig ist, um von dem einen Minimum in das andere zu gelangen

Auf der anderen Seite sind TLS-Energien, die deutlich über der elektronischen Bandbreite von $2dt$ (d ist die räumliche Dimension) liegen, für physikalische Systeme auch recht untypisch.

Hier sollen Ergebnisse für die Parameter $\phi = 0.2\pi$, $g = 3$ und $\Omega = 2$ dargestellt werden. Die HFN liefert für diesen Werte einen Phasenübergang von schwach erster Ordnung mit einer kritischen Temperatur von $T_c^{HF} = 1.14$ (siehe auch Abbildung 3.6a). Die Akzeptanzraten für TLS-Spinflips sind hier mit etwa 10% noch annehmbar.

3.2.3.1. Ladungsdichte- vs. Spindichtewellen

Es wurden Simulationen mit verschiedenen quadratischen Gittern bis zur Größe 10×10 und inversen Temperaturen $\beta \leq 10$ bei verschiedenen Bandfüllungen für $U = 0$ und $U > 0$ durchgeführt. Es wurden stets periodische Randbedingungen gewählt. In diesem Abschnitt soll die Bildung von LDW und der Einfluß der elektronischen Abstoßung exemplarisch für das 6×6 -Gitter bei $\beta = 4$ und $n = 1$ dargestellt werden. Bei positiven Werten von U sind Simulationen von wesentlich größeren Gittern und/oder tieferen Temperaturen wegen des Vorzeichenproblems nicht möglich. Dieses tritt hier auch bei halber Bandfüllung auf, da die Teilchen-Loch-Symmetrie durch die TLS gebrochen wird, und daher das Determinantenprodukt nicht länger positiv semi-definit ist. Während z.B. beim 6×6 -Gitter das mittlere Vorzeichen $\langle \hat{\sigma} \rangle$ bei $\beta = 4$ und $U = 3$ noch 0.9 beträgt, ist es bei $\beta = 4, U = 5$ auf 0.23 und bei $\beta = 8, U = 3$ auf etwa 0.03 abgesunken.

Um die Bildung von langreichweitiger Ordnung zu studieren, betrachten wir die dazugehörigen Korrelationsfunktionen:

$$C_j^X = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle (\hat{X}_i - x)(\hat{X}_{i+j} - x) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \hat{X}_i \hat{X}_{i+j} \rangle - x^2. \quad (3.40)$$

Dabei steht $\hat{X}$ für die Operatoren $\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$ der Elektronendichte bzw. $\hat{S}_i = \hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}$ der Spindichte. C_j^N mißt also Dichte-Dichte-, C_j^S Spin-Spin-Korrelationen. Darüber hinaus wurden auch die Spin-Spin-Korrelationen der TLS sowie die Korrelationen zwischen TLS-Spins und Elektronendichte bestimmt. Da die TLS aber direkt die lokale Elektronendichte beeinflussen, liefern sie keine wesentlich neue Informationen. So korrespondiert eine LDW-Struktur der Elektronen mit einer entsprechenden SDW der TLS. Der Index $i + j$ in (3.40) ist eine Kurzschreibweise für die Vektoraddition $R_i + R_j$. Die Einteilchengrößen X werden relativ zu ihrem Mittelwert

$$x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \hat{X}_i \rangle \quad (3.41)$$

berücksichtigt, wodurch C_j^X im unkorrelierten Fall verschwindet. Die Fouriertransformation von (3.40) liefert die Strukturfaktoren

$$S^X(q) = \sum_{j=1}^N C_j^X e^{iqR_j} = \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle \hat{X}_i \hat{X}_j \rangle e^{iq(R_i - R_j)} - N x^2. \quad (3.42)$$

Die Strukturfaktoren sind nach den Fluktuations-Dissipations-Beziehungen proportional zu den korrespondierenden Streuamplituden (siehe z.B. [Sta71]). So führen Ladungsdichtewellen zu Verzerrungen des Ionengitters, welche sich mittels Röntgenstrahlen nachweisen lassen. Spindichtewellen sind elektrisch neutral, können aber durch Neutronenstreuung beobachtet werden.

Sind die Korrelationen kurzreichweitig, d.h. klingen sie exponentiell ab mit einer räumlichen Modulation:

$$C_j^X \propto e^{-iq_0 R_j} e^{-R_j/\xi}, \quad (3.43)$$

so gilt für das Maximum des Strukturfaktors bei q_0 :

$$S^X(q_0) \propto \left(\frac{\xi}{a} \right)^d \quad (3.44)$$

mit der Gitterkonstanten a und der Korrelationslänge ξ . Ist aber ξ deutlich größer als die lineare Ausdehnung N_x des Systems, so befindet sich das System effektiv innerhalb der geordneten Phase, und $S^X(q)$ sättigt mit der inversen Temperatur β .

Bei langreichweitigen Korrelationen, genauer: bei solchen, die mit einer Potenz $\eta < d$ abfallen, divergiert $S^X(q)$ dagegen mit N_x wie:

$$S^X(q_0) \propto \frac{1}{d - \eta} N_x^{d - \eta}. \quad (3.45)$$

Abbildung 3.8 zeigt die Strukturfaktoren der elektronischen Dichte-Dichte- und Spin-Spin-Korrelationen. Die Wechselwirkung mit den TLS führt in diesem Parameterbereich im Fall $U = 0$ zu einer scharfen Spitze in S^N bei einem Vektor $q = (\pi, \pi)$, was die Tendenz zur Ausbildung einer Ladungsdichtewelle widerspiegelt. Die magnetischen Korrelationen sind dagegen stark unterdrückt. Ist U von der gleichen Größenordnung wie g , so kompensieren sich beide Effekte im wesentlichen (Abbildung 3.8 Mitte). Die beiden Strukturfaktoren sind fast ununterscheidbar von denen des freien Elektronengases auf dem 6×6 -Gitter. Der Wert von U wurde so gewählt, daß er die, mit der Unitären Transformation berechnete, effektive elektronische Anziehung von $U_{UT} = 2.91$ (siehe Gleichung (3.29)) ausgleicht, was auch in guter Näherung der Fall ist. Die HFN überschätzt dagegen mit $U_{eff} = 4.2$ die effektive Anziehung in diesem Parameterbereich. Erhöht man U weiter, so bilden sich – wie im reinen Hubbardmodell – starke antiferromagnetische Korrelationen aus (Abbildung 3.8 unten). In der HFN gibt es bei den vorliegenden Parametern für $U > 5.42$ im Grundzustand keine LDW-Ordnung mehr. Die QMC-Resultate zeigen hier fast eine Umkehrung der Situation bei $U = 0$, also eine starke Unterdrückung der LDW-Korrelationen.

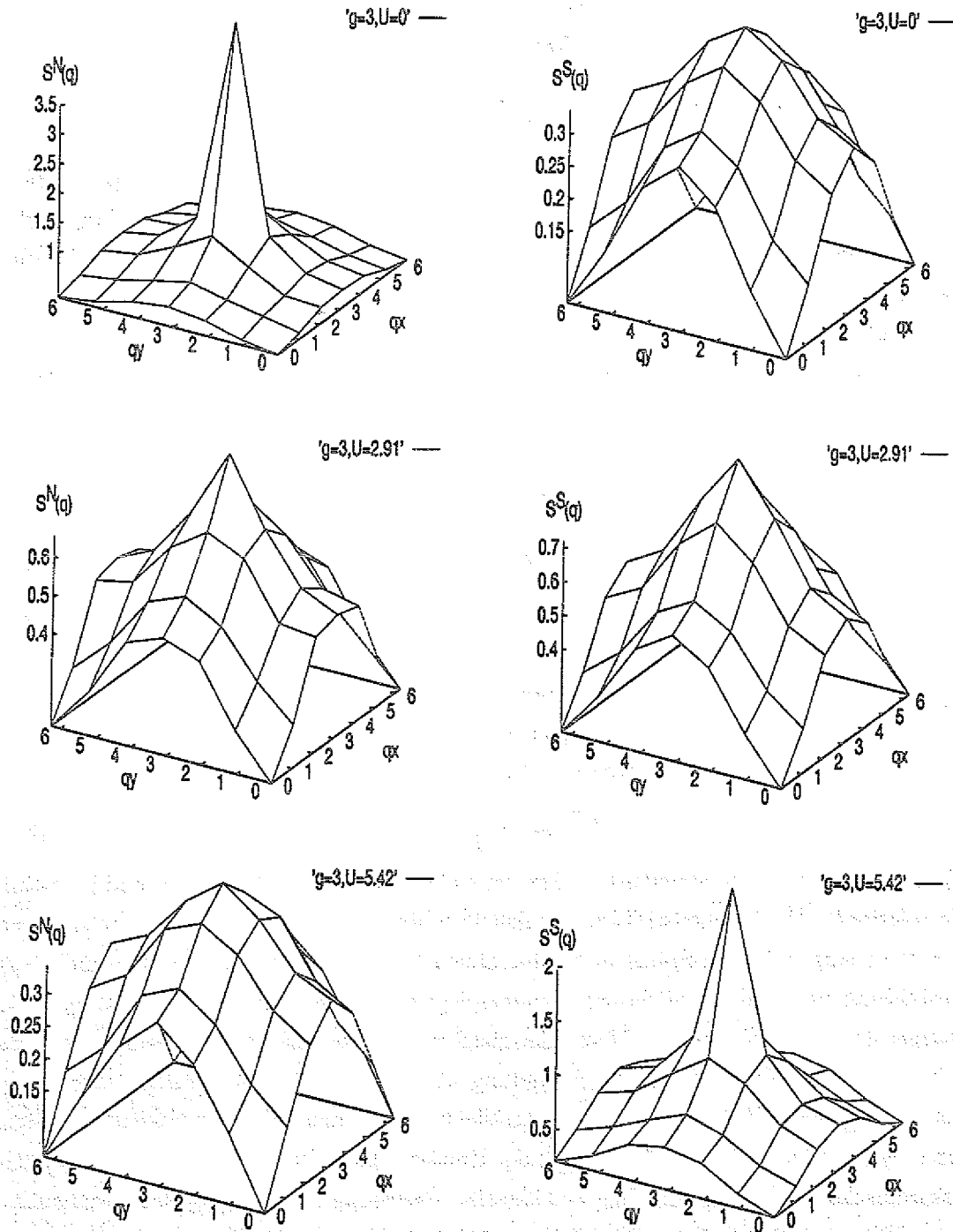


Abbildung 3.8: Dichte-Dichte- und Spin-Spin-Strukturfaktoren für das 6×6 -Gitter. Parameter: $g = 3, \Omega = 2, \phi = 0.2\pi, U = 0, 2.91, 5.42$

3.2.3.2. Resultate abseits halber Bandfüllung

Um die Stabilität der kommensurablen LDW-Ordnung gegenüber Dotierung zu untersuchen wurden Simulationen auf dem 6×6 -Gitter bei $\beta = 4$ für verschiedene Elektronendichten durchgeführt. Abbildung 3.9 zeigt den Strukturfaktor $S^N(q)$, wobei der Vektor q auf einem Dreieckspfad von $(0,0)$ parallel zu q -Achsen nach $(0,\pi)$ und (π,π) und schließlich diagonal zurück nach $(0,0)$ läuft. Offensichtlich wird $S^N(\pi,\pi)$ durch die Dotierung stark unterdrückt, und die Korrelationen werden kurzreichweitig. Die relative Erhöhung des Wertes bei $q = (2\pi/3, \pi)$ bei kleineren Dichten mag eine Tendenz zur Ausbildung einer inkommensurablen LDW widerspiegeln; sie ist aber bei der vorliegenden Temperatur nur sehr schwach ausgeprägt. Darüberhinaus können Zwischenwerte von $S^N(q)$ auf

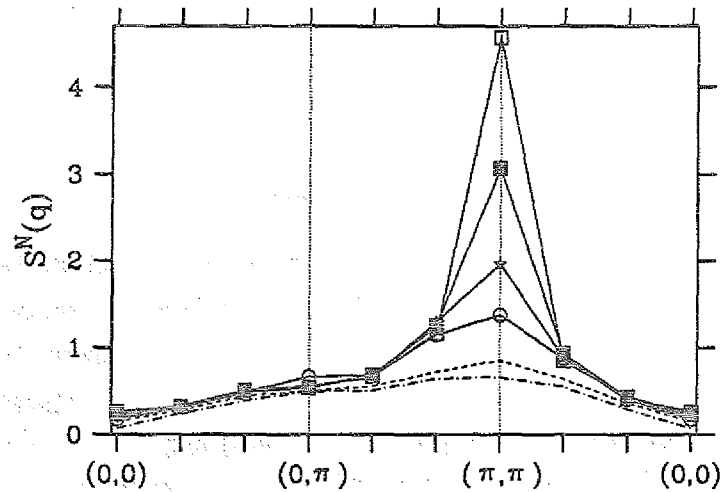


Abbildung 3.9: $S^N(q)$ für einen Dreieckspfad durch die Brillouinzone bei verschiedenen Elektronendichten. Parameter: $g = 3, \Omega = 2, \phi = 0.2\pi, U = 0, \beta = 4$. $n = 1$ (offene Quadrate), $n = 0.83$ (volle Quadrate), $n = 0.74$ (Sterne) und $n = 0.66$ (Kreise). Resultate für freie Elektronen bei $n = 1$ (gestrichelt) und bei $n = 0.66$ (strichpunktiert).

dem kleinen Gitter nicht bestimmt werden, da die zugehörigen q -Vektoren hier nicht definiert sind. Abbildung 3.10 zeigt schließlich $S^N(q)$ für den Fall, daß Hüpfprozesse zwischen übernächsten Nachbarn (entlang der Kanten des Gitters) erlaubt sind. Für den dazugehörigen Hüpfparameter wurde ein Wert von $t_2 = -0.2t$ gewählt. Obwohl in diesem Fall kein paares Gitter mehr vorliegt, wird der Wert von $S^N(\pi, \pi)$ bei der vorliegenden Elektronendichte nicht reduziert. Man erkennt ferner eine Erhöhung des Strukturfaktors bei einem Wellenvektor $(0, \pi)$.

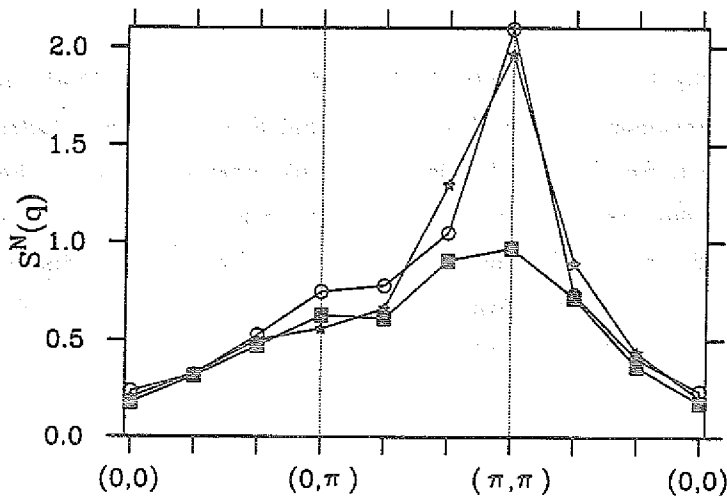


Abbildung 3.10: $S^N(q)$ mit Hüpfen zu übernächsten Nachbarn, t_2 . Parameter wie in Abb. 3.9; Dichte $n = 0.74$. $t_2 = 0, U = 0$ (Sterne), $t_2 = -0.2, U = 0$ (Kreise), $t_2 = -0.2, U = 1.5$ (Quadrate). (Der statistische Fehler ist hier etwas größer als die Symbole.)

3.2.3.3. Bestimmung der kritischen Temperatur

Im Fall der halben Bandfüllung findet man, wie gezeigt, eine deutliche Tendenz zur Bildung einer kommensurablen Ladungsdichtewelle mit einem Wellenvektor $q_0 = (\pi, \pi)$. Diese Struktur bricht die Translationsinvarianz des Gitters und zerteilt dieses in zwei Untergitter mit jeweils hoher bzw. niedriger Elektronendichte. Der Ordnungsparameter ist daher zweiwertig, und es ist – einem Argument in [Noa91] folgend – zu erwarten, daß das System in derselben Universalitätsklasse ist wie das zweidimensionale Isingmodell. Die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion bei $q = q_0$ sollte daher mit einem Exponenten $\eta = 1/4$ zerfallen, so daß sich folgende Skalierung des Strukturfaktor gemäß (3.45) mit der linearen Systemausdehnung N_x ergibt:

$$S^N(\pi, \pi) = N_x^{d-\eta} w\left(\frac{N_x}{\xi}\right) = N_x^{7/4} w(N_x(\beta - \beta_c)) \quad (3.46)$$

Die unbekannte Funktion w hängt dabei nach der Skalenhypothese (siehe z.B. [Sta71]) für hinreichend große Gitter nur vom Verhältnis von N_x zur Korrelationslänge ξ ab. ξ divergiert in der vorliegenden Universalitätsklasse in der Nähe des kritischen Punktes (von beiden Seiten) mit einem Exponenten $\nu = 1$. (3.46) kann als Bestimmungsgleichung für die kritische Temperatur aufgefaßt werden.

Dazu wurde $S^N(\pi, \pi)$ für verschiedene quadratische Gitter mit $N_x \leq 10$ bei inversen Temperaturen $\beta \leq 10$ bestimmt (Abbildung 3.11). Es wird deutlich, daß $S^N(\pi, \pi)$ ab

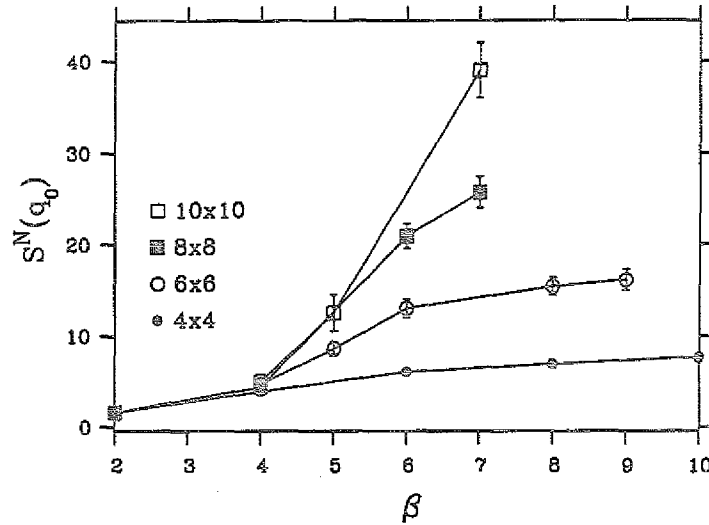


Abbildung 3.11: LDW-Strukturfaktor vs. Temperatur für verschiedene Gitter bei halber Bandfüllung. Parameter: $g = 3, \Omega = 2, \phi = 0.2\pi, U = 0$. Die Fehlerbalken geben den statistischen Fehler, bestimmt aus unabhängigen Läufen, wieder.

einer inversen Temperatur von etwa $\beta = 4$ mit der Systemgröße stark zunimmt. In Abbildung 3.12 sind die selben Daten gemäß (3.46) skaliert für drei Werte von β_c aufgetragen. Das Kriterium für die Auswahl des „richtigen“ Wertes besteht darin, daß alle Datenpunkte auf derselben Skalenfunktion $w(N_s(\beta - \beta_c))$ liegen sollen, von der angenommen wird, daß sie einen glatten und nahe des kritischen Punktes monotonen Verlauf hat. Von den drei gezeigten Kandidaten erfüllt $\beta_c = 6$ dieses Kriterium am besten. Die kritische Temperatur ist also deutlich tiefer als die von der HFN vorgeseigte ($\beta_c^{HFN} = 0.877$). Diese Tatsache verdeutlicht die Wichtigkeit von Fluktuationen in diesem zweidimensionalen Quantensystem.

3.2.4. Limes hoher Dimensionen

Ohne hier auf die Theorie des Limes hoher Dimensionen und die Techniken zu seiner Behandlung einzugehen – beides wird im folgenden Kapitel dargestellt – sollen hier nur die Ergebnisse zum Phasenübergang des TLS-Modells gezeigt werden. Es wurden dabei dieselben Parameter, geeignet skaliert, wie bei den Rechnungen zum zweidimensionalen Fall gewählt, d.h. $g = 3, \Omega = 2, \phi = 0.2\pi$. Der Limes hoher Dimension liefert eine dynamische „mean field“-Theorie. Obwohl die Resultate mittels einer QMC-Methode gewonnen werden, können hier – im Gegensatz zu endlich-dimensionalen MC-Simulationen – durch die Selbstkonsistenzgleichungen „echte“ Phasenübergänge und geordnete Phasen selbst beobachtet werden. Abbildung 3.13 zeigt die aus den Zweiteilchenkorrelationen berechnete in-

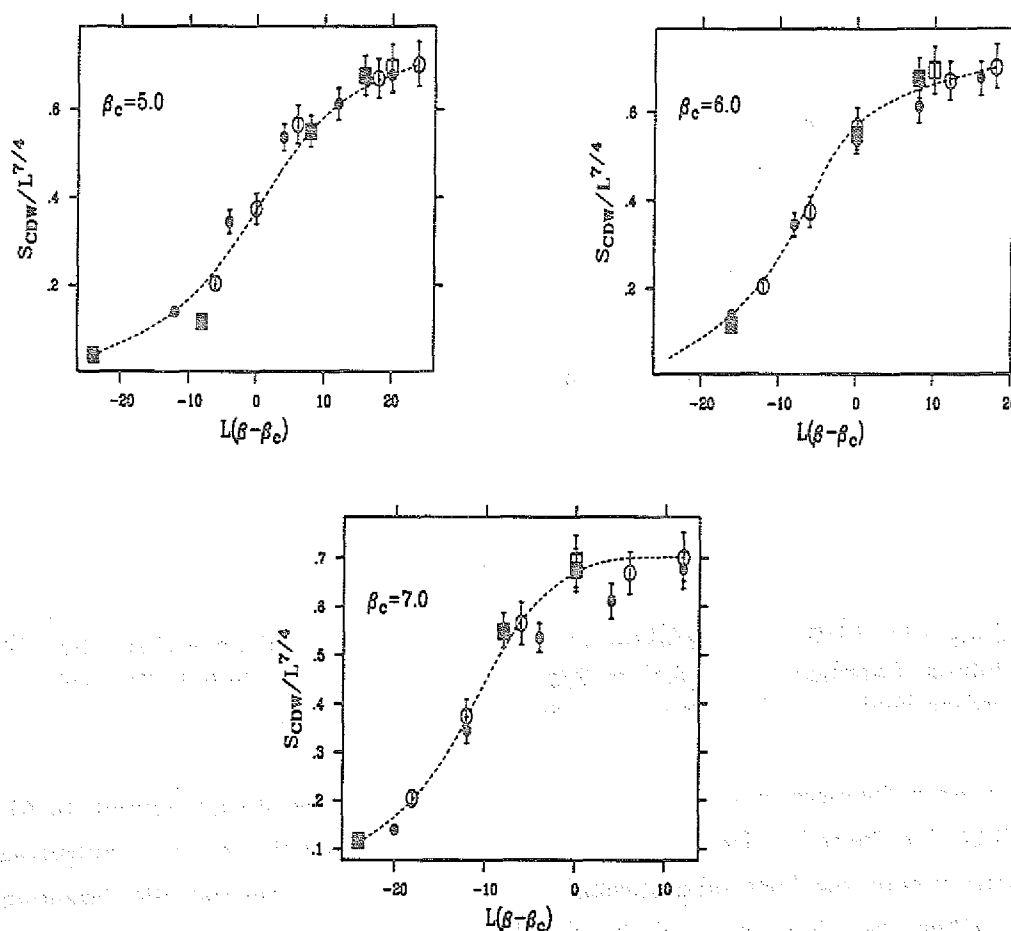


Abbildung 3.12: Skalierung der LDW-Strukturfaktoren aus Abb. 3.11 mit N_s und β . Bestimmung der „optimalen“ kritischen Temperatur. (Die gestrichelten Kurven sollen nur mögliche Funktionsverläufe skizzieren.)

verse LDW-Suszeptibilität χ_{LDW}^{-1} als Funktion der Temperatur. χ_{LDW} divergiert in einem Curie-Weiß-Gesetz linear mit $T - T_c$. Die Extrapolation ergibt eine kritische Temperatur von $T_c^{d=\infty} = 0.246$. Diese liegt deutlich unterhalb des HF-Ergebnisses von $T_c^{HFN} = 1.14$ aber nicht allzu weit oberhalb des QMC-Resultats, $T_c^{d=2} \approx 0.17$. Beim Vergleich der Energieskalen ist zu berücksichtigen, daß in $d = \infty$ mit einer halbelliptischen Zustandsdichte gerechnet worden ist, welche exakt wird für das Bethe-Gitter mit unendlicher Verzweigungszahl. Diese Zustandsdichte hat eine völlig andere Form als die des hyperkubischen Gitters in $d = 2$, insbesondere besitzt sie keine van Hove-Singularitäten. Dennoch liefert der Limes hoher Dimensionen mit einem Verhältnis von $v = T_c^{d=2} : T_c^{d=\infty} \approx 0.69$ sogar eine etwas bessere Näherung als die Weißsche Theorie für das Isingmodell mit $v \approx 0.57$ (siehe z.B. [Sta71]). Der Vergleich der kritischen Temperaturen zeigt einerseits, daß die

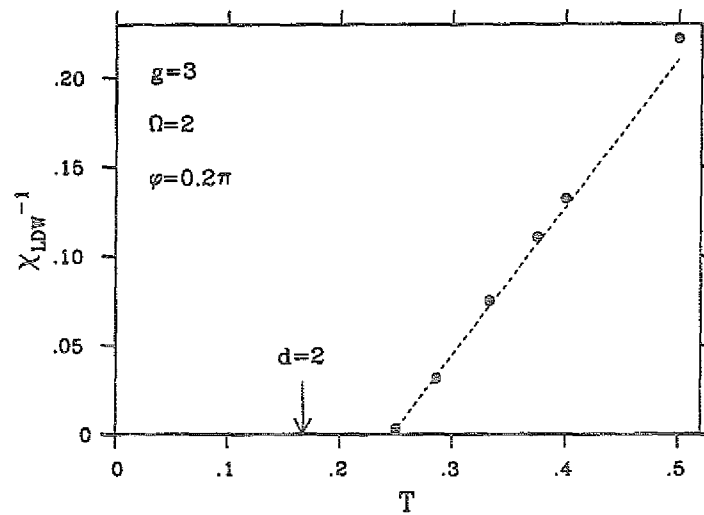


Abbildung 3.13: Inverse LDW-Suszeptibilität vs. T für das TLS-Modell im Limes hoher Dimensionen. Gestrichelte Kurve: Linearer „least-square fit“ durch die ersten drei Punkte. Pfeil: Kritische Temperatur für das zweidimensionale Gitter.

von der HFN vernachlässigten Fluktuationen in erster Linie durch Quanteneffekte und weniger durch die niedrige Dimensionalität des Systems hervorgerufen werden. Andererseits wird deutlich, daß der Limes hoher Dimensionen bereits eine gute Näherung für thermodynamische Eigenschaften niedrigdimensionaler Systeme sein kann.

3.3. Diskussion

In diesem Kapitel untersuchten wir das Hubbardmodell mit lokal angekoppelten Zwei-Niveau-Systemen (TLS). Es wurde gezeigt, daß die TLS eine effektive attraktive Anziehung zwischen den Elektronen vermitteln können. Die Anziehung ist dann besonders effektiv, wenn die Energien der TLS und die Kopplung zwischen TLS und Elektronen von der gleichen Größenordnung sind, und wenn der elastische Anteil der Streuung der Elektronen an den TLS überwiegt. Bei halber Bandfüllung führt die effektive Anziehung zur Bildung einer A-B-Ladungsdichtewelle. Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung (HFN) werden in Abhängigkeit von den Modellparametern Phasenübergänge erster und zweiter Ordnung beobachtet. Für letztere wurde die effektive lokale Anziehung der Elektronen berechnet und mit dem Ergebnis aus der Unitären Transformation verglichen. Für einen festen Parametersatz konnte mit der Monte-Carlo-Simulation kleiner quadratischer Gitter durch „finite-size“-Analyse die Übergangstemperatur zur Ladungsdichtewelle bestimmt werden. Der Übergang ist kontinuierlich und liegt in derselben Universalitätsklasse wie das zwei-

KAPITEL 3. ZWEI-NIVEAU-SYSTEME

mensionale Isingmodell. Die kritische Temperatur liegt etwa um einen Faktor 7 unterhalb des HF-Ergebnisses. Die Untersuchung des Modells im Limes hoher Dimensionen lieferte für die gleichen Parameter ebenfalls einen Phasenübergang zweiter Ordnung mit einer kritischen Temperatur, die nur leicht oberhalb der im zweidimensionalen Fall liegt.

4. LIMES HOHER DIMENSIONEN

In diesem Kapitel soll das Hubbardmodell mit Unordnung im Rahmen des Limes hoher Dimensionen ($d = \infty$) untersucht werden. Der Schwerpunkt liegt dabei auf dem Wechselspiel von lokaler Wechselwirkung und Unordnung und deren Einfluß auf die magnetischen sowie die metallischen Eigenschaften des Systems. Ferner werden Ergebnisse zum reinen Hubbardmodell in der Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes dargestellt.

Für die Behandlung korrelierter Elektronensysteme wäre es sehr wünschenswert neben analytischen Näherungsmethoden und numerischen Behandlungen kleiner Systeme eine kontrollierte und möglichst für alle Werte der Modellparameter anwendbare „mean field“-Theorie zu konstruieren. Der Prototyp für eine derartige Theorie ist die Weissche Theorie für klassische Spinsysteme. Dabei wird das lokale Feld, das von den benachbarten Spins auf einen Spin am Gitterplatz i wirkt, durch ein mittleres, homogenes Feld¹ ersetzt. Es ist wohl bekannt, daß die Weissche Theorie sowohl bei langreichweitiger Wechselwirkung als auch im Limes hoher Dimensionen bzw. hoher Koordinationszahl Z exakt wird. In diesem Sinne handelt es sich um eine „kontrollierte“ Näherung; $1/Z$ kann als Entwicklungsparameter dienen, um die Physik endlich dimensionaler Systeme besser zu beschreiben. Auch für Systeme beweglicher Elektronen gibt es seit langem „mean field“-artige Theorien, wie z.B. die Hartree-Fock-Näherung, bei denen ein Elektron sich im mittleren „Feld“ der anderen bewegt. Als mittleres Feld dient dabei üblicherweise die lokale Elektronendichte. Dies führt bei der Hubbardwechselwirkung zu der bekannten, auch in Kapitel 3 benutzten Entkopplung der Dichteoperatoren. Aufgrund des lokalen Charakters der Wechselwirkung wird diese Näherung durch die Erhöhung der Anzahl nächster Nachbarn aber nicht besser und daher keinesfalls exakt für $d = \infty$. In diesem Sinn ist die Hubbard-Wechselwirkung ausgezeichnet, da für alle nicht-lokalen Dichte-Dichte-Wechselwirkungen die Hartree-Näherung² für $d = \infty$ exakt wird [MHa89]. Die HFN ist also für das Hubbardmodell keine kontrollierte „mean field“-Theorie im obigen Sinne. Ihre Anwendbarkeit ist a priori nur bei geringen Elektronen- oder Lochdichten oder schwachen Wechselwirkungen gerechtfertigt.

Im folgenden soll eine kurze Einführung in den Limes $d = \infty$ für bewegliche Elektronensysteme gegeben werden. Eine ausführliche Darstellung findet sich in [Vol93]. Zunächst ein-

¹Für dieses mittlere Feld ist im deutschen Sprachgebrauch auch die Bezeichnung „Molekularfeld“ üblich.

²Der „Fock“-Beitrag ist von $\mathcal{O}(1/\sqrt{Z})$ und entfällt in $d = \infty$.

mal stellt sich die Frage, wie der Limes $d = \infty$ überhaupt definiert ist. Wesentlich dabei ist die richtige Skalierung der Energien. Rein lokale Größen wie die Hubbard-Wechselwirkung U sowie das chemische Potential μ und die Unordnungspotentiale ϵ_i brauchen nicht skaliert zu werden. Anders ist es bei der kinetischen Energie: Für freie Elektronen auf dem hyperkubischen Gitter wird die Zustandsdichte für $d = \infty$ gaußverteilt [Met89, MHa89]:

$$N_Z(E) = \sum_q \delta(E - \epsilon_q) \rightarrow \frac{1}{t\sqrt{2\pi Z}} \exp \left[- \left(\frac{E}{t\sqrt{2Z}} \right)^2 \right] \quad (4.1)$$

mit $Z = 2d$. Die korrekte Skalierung des Hüpfterms t , für die die Zustandsdichte nicht trivial wird, d.h. weder unendlich breit verschmiert noch divergent in $E = 0$, ist daher [Met89]:

$$t = \frac{t^*}{\sqrt{Z}}, \quad t^* = \text{const.} \quad (4.2)$$

Diese Skalierung ist nicht auf das hyperkubische Gitter beschränkt. Für ein beliebiges Gitter mit Hüpfern zwischen nächsten Nachbarn gilt die Energierelation:

$$\epsilon_q = -t \sum_{l=1}^Z \cos(qR^{(l)}) \quad (4.3)$$

mit den Z Nächste-Nachbar-Vektoren $R^{(l)}$. Für einen beliebig ausgewählten Impuls q wird für $Z \rightarrow \infty$ ϵ_q die Summe von Z Zufallszahlen aus dem Intervall $[-t, t]$ und wächst daher³ wie $\sim t\sqrt{Z}$. Im allgemeinen sind wegen des Skalarproduktes die Zufallszahlen korreliert⁴, weshalb für nicht-hyperkubische Gitter die Energien nicht gaußverteilt sind. Nur mit der Skalierung (4.2) bleibt die Energie pro Gitterplatz endlich. Die Anzahl nächster Nachbarn, Z , ist dabei nicht notwendig proportional zur Dimension d . So gilt etwa für das fcc -Gitter: $Z_{fcc} = 2d(d-1)$. Für das Hubbardmodell wird die Skalierung (4.2) im Limes $U/t \rightarrow \infty$ besonders anschaulich: Hier kann das Modell, wie in der Einleitung erwähnt, auf das t - J -Modell mit einer antiferromagnetischen Kopplung $J = t^2/U$ zwischen nächsten Nachbarn abgebildet werden. In Spinmodellen muß die Kopplung zwischen nächsten Nachbarn aber mit $1/Z$ skaliert werden, was durch die Skalierung (4.2) erreicht wird.

Für die im folgenden dargestellten Rechnungen wurde in der Regel eine halbelliptische Modellzustandsdichte für die freien Elektronen gewählt:

$$N(E) = \frac{2}{\pi w^2} \sqrt{w^2 - E^2}. \quad (4.4)$$

Sie hat im Gegensatz zur Gaußverteilung scharfe, algebraische Bandkanten, wie sie auch für dreidimensionale Gitter typisch sind. $N(E)$ wird für das Bethegitter mit unendlicher Verzweigungszahl $K = Z - 1$ exakt. Die halbe Bandbreite beträgt $w = 2t\sqrt{K}$ und bleibt daher

³Genaugenommen gilt dies für die Wurzel des Mittelwertes über ϵ_q^2 .

⁴Sie enthalten Produkte unkorrelierter Zufallszahlen mit gleicher Varianz.

– im Gegensatz zum hyperkubischen Gitter – mit der Skalierung (4.2) endlich [Eco79]. Das Bethegitter ist wie das hyperkubische paar, was sich in der symmetrischen Zustandsdichte widerspiegelt. Es ist daher zu erwarten, daß sich Ergebnisse bei der Wahl der gaußschen oder halbelliptischen Zustandsdichte nicht wesentlich unterscheiden. Insbesondere fördert in beiden Fällen die Paarheit der Gitter antiferromagnetische Korrelationen.

Die wesentliche Vereinfachung im Limes $d = \infty$ besteht darin, daß in der diagrammatischen Störungstheorie im Ortsraum die Skelettdiagramme kollabieren. Für rein lokale Wechselwirkungen, wie beim Hubbardmodell, müssen nur solche Diagramme betrachtet werden, die Vertices nur an einem einzigen Gitterplatz besitzen [Met89]. Der Grund dafür liegt darin, daß mit dem Hüpfterm t auch der Einteilchenpropagator G_{ij}^0 für benachbarte Gitterplätze mit $1/\sqrt{Z}$ skaliert. Allgemein gilt [vDon89, Met89a]:

$$G_{ij}^0 \propto d^{-\|R_i - R_j\|/2} . \quad (4.5)$$

Die Metrik $\|R_i\|$ ist definiert als die Mindestanzahl von Kanten für einen Weg vom Ursprung zum Gitterplatz R_i , da die Elektronen nur längs der Kanten hüpfen können⁵. Als Konsequenz wird die irreduzible Selbstenergie im Ortsraum lokal, bzw. ihre Fouriertransformierte impulsunabhängig:

$$\Sigma_{ij}^{\sigma}(\omega) \equiv \Sigma_{ii}^{\sigma}(\omega) \delta_{ij} , \quad \Sigma^{\sigma}(q, \omega) \equiv \Sigma^{\sigma}(\omega) . \quad (4.6)$$

Die Impulsunabhängigkeit führt zu erheblichen Vereinfachungen, die es in verschiedenen Modellen erlauben, die Störungsreihe analytisch aufzusummieren. Beispiele sind das Falicov-Kimball-Modell [Fal69, Bra89, Jan91] sowie das Andersonmodell der Unordnung [And58]. Das letztere wird in $d = \infty$ durch die „coherent potential approximation (CPA)“ [Ell74] exakt gelöst [Vla92]. Für ein Modell spinloser Fermionen mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung und Unordnung bestimmten Uhrig et al. [Uhr93] das Phasendiagramm in $d = \infty$. Auch $1/d$ -Korrekturen konnten hier in erster Ordnung durchgeführt werden.

4.1. Anderson-Hubbard-Modell

Zur Erinnerung sei hier nochmal das Modell angegeben, welches in den folgenden Abschnitten behandelt werden soll:

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} (\epsilon_i - \mu) \hat{n}_{i\sigma} \quad (4.7)$$

Für $U = 0$ handelt es sich um das Unordnungs-Andersonmodell. Wir beschränken uns auf den Fall diagonalen Unordnungs, d.h. wir nehmen an, daß die Unordnung die Hüpf-

⁵Sie wird in Anlehnung an die rechtwinkligen Straßenzüge Manhattens auch als „New York“- oder „taxi cab“-Metrik bezeichnet.

terme t_{ij} nicht beeinflusst. Die atomaren Potentiale ϵ_i unterliegen einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\epsilon_i)$, die rein lokal ist. Das bedeutet, sie sind vollkommen unkorreliert; kurzreichweitige Ordnung wird nicht berücksichtigt. Unter diesen Annahmen wird der Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_H + \sum_{i\sigma} (\epsilon_i - \mu) \hat{n}_{i\sigma}. \quad (4.8)$$

Dabei ist $\hat{H}_0 + \hat{H}_H$ das reine Hubbardmodell. Die thermodynamischen Eigenschaften des Systems lassen sich allgemein aus der gemittelten freien Energie, bzw. dem großkanonischen Potential

$$\Omega_{gem} = -T \langle \ln \text{Sp} \exp(-\beta \hat{H}) \rangle_{gem} \quad (4.9)$$

bestimmen. Die Unordnung ist eingefroren („quenched“), weshalb die freie Energie über die Konfigurationen der atomaren Potentiale gemittelt wird. Diese Mittelung über eine Größe X geschieht wie üblich gemäß:

$$\langle X \rangle_{gem} = \prod_i \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_i P(\epsilon_i) \right] X(\epsilon_1, \dots, \epsilon_N), \quad (4.10)$$

wobei N die Anzahl der Gitterplätze ist.

Die Spur über die fermionischen Freiheitsgrade in (4.9) kann in endlichen Dimension nicht exakt durchgeführt werden. Die starken Vereinfachungen, die sich im Limes $d = \infty$ ergeben, erlauben es aber, das System auf ein effektives *lokales* Problem abzubilden [Jan92, Jan92a]. Die wesentlichen Punkte sollen im folgenden Abschnitt kurz dargestellt werden.

4.2. Freie Energie im Limes $d = \infty$

Die Herleitung des Funktionals der freien Energie beruht auf dem Formalismus der „erhaltenden Näherungen“ [Bay62]. Baym zeigte Kriterien auf, für welche Näherungen bei der Auswahl der Skelettdiagramme der Selbstenergie die thermodynamische Konsistenz einer Theorie erhalten bleibt. Thermodynamische Konsistenz meint hier die makroskopischen Erhaltungssätze sowie thermodynamische Beziehungen wie die Maxwellrelationen. Die Kriterien für eine erhaltende Näherung sind äquivalent zu der Forderung, daß die Selbstenergie nach einem Variationsprinzip aus einem erzeugenden Funktional Φ der vollen Greenfunktion G_{ij}^G bestimmt wird:

$$\Sigma_{ij}^G = \frac{\delta \Phi}{\delta G_{ij}^G}. \quad (4.11)$$

Das großkanonische Potential kann damit als Funktional von Σ geschrieben werden:

$$\beta \Omega\{\Sigma\} = \Phi\{G\} - \text{Sp}(\Sigma G) - \text{Sp} \ln[(G^0)^{-1} - \Sigma]. \quad (4.12)$$

Dabei ist G^0 die freie Greenfunktion, und die Spur (Sp) steht für die Summe über alle Gitterplätze, Frequenzen und Spins. (Hier, wie im folgenden, werden Gitterplatz- und Spinindizes ggf. unterdrückt, wenn der Zusammenhang klar bleibt.) In $d = \infty$ ist die Selbstenergie lokal und ihre selbstkonsistente störungstheoretische Entwicklung enthält nur den lokalen, vollen Propagator G_{ii}^0 . Die Berechnung des Φ -Funktionals führt hier zu einem lokalen Problem und kann explizit durchgeführt werden [Jan86, Jan91]. (4.12) steht für eine feste Unordnungskonfiguration, die Mittelung über alle Verteilungen muß im Anschluß noch durchgeführt werden. Diese vereinfacht sich im Limes $d = \infty$ ebenfalls extrem, da nur über die möglichen Werte von ϵ_i auf einem repräsentativen Gitterplatz gemittelt werden muß. Die Erweiterung auf den Fall mit Unordnung wurde von Janiš und Vollhardt [Jan92a] durchgeführt. Für den homogenen Fall, $\Sigma_{ii}^0 \equiv \Sigma^0$,⁶ wird das Funktional des großkanonischen Potentials schließlich:

$$\begin{aligned} \Omega_{gem}/N = & -T \sum_{\sigma n} \int_{-\infty}^{\infty} dE N(E) \ln [i\omega_n + \mu_\sigma - \Sigma_n^0 - E] \\ & + T \sum_{\sigma n} \ln (G_n^0)^{-1} - T \langle \ln \mathcal{Z} \{ \mathcal{G}^{-1}, \epsilon_i \} \rangle_{gem} . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Dabei erfolgte die Darstellung – wie stets im folgenden – in Matsubarafrequenzen $\omega_n = (2n + 1)\pi T$. Die Summe über die Gitterplätze ist hier durch ein Integral über die freie Zustandsdichte $N(E)$ ersetzt worden. Der letzte Term ist die freie Energie eines lokalen Problems mit der Zustandssumme

$$\mathcal{Z} \{ \mathcal{G}^{-1}, \epsilon_i \} = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* e^{\mathcal{A} \{ \mathcal{G}^{-1}, \epsilon_i \}} , \quad (4.14)$$

geschrieben als ein Funktionalintegral über Grassmannvariablen $\psi_{\sigma n}$ (siehe z.B. [Neg88] und Anhang A). Die Wirkung $\mathcal{A}$ ist eine Funktion des effektiven lokalen Propagators $\mathcal{G}^{-1} = G^{-1} + \Sigma$:

$$\mathcal{A} \{ \mathcal{G}^{-1}, \epsilon_i \} = \sum_{\sigma n} \psi_{\sigma n}^* [(G_n^0)^{-1} - \epsilon_i] \psi_{\sigma n} - U \int_0^\beta d\tau \psi_\uparrow^*(\tau) \psi_\uparrow(\tau) \psi_\downarrow^*(\tau) \psi_\downarrow(\tau) . \quad (4.15)$$

Dabei sind die Grassmannvariablen in gemischter Frequenz- und imaginärer Zeitdarstellung geschrieben worden.

Die drei Terme in (4.13) können im Rahmen „mean field“-artiger Bilder interpretiert werden [Jan92a]: Der erste Term ist die freie Energie unabhängiger Elektronen in einem frequenzabhängigen, homogenen Potential Σ_n^0 . Dieses ist so definiert, daß es die Effekte durch Wechselwirkung und Unordnung im thermodynamische Limes *exakt* wiedergibt. Der zweite Beitrag subtrahiert die freie Energie eines repräsentativen Gitterplatzes i . Nun wird das effektive Potential Σ durch das „wahre“ lokale Potential $\hat{v}_{i\sigma} = \frac{1}{2} U \hat{n}_{i-\sigma} + \epsilon_i - \mu_\sigma$ ersetzt. Bezüglich $v_{i\sigma}$ wird die freie Energie berechnet und über die Unordnung gemittelt

⁶Der Fall mit Symmetriebrechung wird weiter unten behandelt.

(Beitrag drei). Σ ist durch die Forderung bestimmt, daß die freie Energie stationär unter seiner Variation ist: $\delta\Omega_{gem}/\delta\Sigma = 0$.

Die Stationarität von Ω_{gem} gegenüber dem vollen, lokalen Propagator G vervollständigt die thermodynamische Konsistenz; d.h. die physikalischen Werte von Σ und G sind diejenigen, für die Ω_{gem} stationär wird. Es sei allerdings daran erinnert, daß wir es hier nicht – wie etwa in der Weisschen Theorie – mit einfachen Zahlen zu tun haben, sondern mit komplexen Funktionen der Frequenz. Die räumlichen Freiheitsgrade werden in $d = \infty$ auf einen einzigen Gitterplatz abgebildet, dieser wechselwirkt mit allen anderen über eine kompliziertes, dynamisches Potential Σ^7 . Bevor die Selbstkonsistenzgleichungen, erweitert auf den Fall mit Symmetriebrechung, dargestellt werden, sollen kurz die beiden Grenzfälle $U = 0$ und $\epsilon_i = const.$ diskutiert werden.

4.2.1. Zusammenhang mit der „coherent potential approximation“

Im wechselwirkungsfreien Fall wird die Zustandssumme (4.14) ein gaußsches Integral und kann analytisch durchgeführt werden:

$$Z_{U=0}\{\mathcal{G}, \epsilon_i\} = \prod_{\sigma n} [(\mathcal{G}_n^\sigma)^{-1} - \epsilon_i] \quad (4.16)$$

Die freie Energie wird damit:

$$\begin{aligned} \Omega_{gem}(U=0)/N &= -T \sum_{\sigma n} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dE N(E) \ln [i\omega_n + \mu_\sigma - \Sigma_n^\sigma - E] \right. \\ &\quad \left. - (\ln [1 + G_n^\sigma(\Sigma_n^\sigma - \epsilon_i)]) \right\}_{gem}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

und die Variation etwa nach G ergibt

$$\left\langle \frac{\epsilon_i - \Sigma}{1 + G(\Sigma - \epsilon_i)} \right\rangle_{gem} = 0. \quad (4.18)$$

Die linke Seite ist aber gerade die gemittelte Streumatrix (T -Matrix) für die Streuung an den Zufallspotentialen relativ zum effektivem Medium Σ [Ric88, Ell74]. In der „coherent potential approximation“ (CPA) wird Σ als diagonal im Ortsraum angenommen; diese „lokale Näherung“ wird exakt im Limes hoher Dimensionen. Die freie Energie (4.13) kann daher auch als eine feldtheoretische Erweiterung der CPA für wechselwirkende, ungeordnete Systeme betrachtet werden.

4.2.2. Zusammenhang mit Störstellenmodellen

Für das reine Hubbardmodell ohne Unordnung (o.B.d.A. $\epsilon_i \equiv 0$) gewannen Georges und Kotliar [Geo92] mit einem völlig anderen Ansatz dieselbe Gleichung für die lokale Wirkung

⁷Dies ist gewissermaßen ein Gegenstück zur („unrestricted“)-HFN, bei der das effektive Potential rein statisch ist, aber im Ortsraum sehr kompliziert sein kann.

$\mathcal{A}$ (4.15). Sie stellten heraus, daß $\mathcal{A}$ exakt der Wirkung eines Hilfs-Störstellenmodells entspricht (siehe auch [Jar92, Ohk91]). Als Beispiel kann das Einzel-Störstellenmodell von Anderson („single impurity Anderson model“, SIAM) [And61] dienen:

$$\hat{H}_{SIAM} = \sum_{q\sigma} \epsilon_q \hat{a}_{q\sigma}^\dagger \hat{a}_{q\sigma} + \epsilon_d \sum_{\sigma} \hat{c}_{\sigma}^\dagger \hat{c}_{\sigma} + U \hat{n}_{c\uparrow} \hat{n}_{c\downarrow} + V \sum_{q\sigma} (\hat{a}_{q\sigma}^\dagger \hat{c}_{\sigma} + \hat{c}_{\sigma}^\dagger \hat{a}_{q\sigma}). \quad (4.19)$$

$\hat{H}_{SIAM}$ beschreibt Elektronen im Leitungsband (ϵ_q), die mit dem Orbital einer Störstelle hybridisieren. Auf der Störstelle wirkt eine elektronische Abstoßung U . Die freie Greenfunktion ($U = 0$), lautet hier:

$$\begin{aligned} G_{SIAM}^0(i\omega_n) &= i\omega_n - \epsilon_d + \Delta(i\omega_n) \\ \Delta(i\omega_n) &\equiv V^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{N(E)}{i\omega_n - E} \end{aligned} \quad (4.20)$$

mit der Zustandsdichte des Leitungsbandes $N(E)$. Die frequenzabhängige Größe $\Delta(i\omega_n)$ wird als effektive Hybridisierung bezeichnet. Die Wirkung ist in diesem Modell offensichtlich formal durch (4.15) gegeben, wenn man G_{SIAM}^0 mit $\mathcal{G}$ identifiziert. Andersherum ausgedrückt: $\mathcal{A}$ ist die Wirkung eines modifizierten SIAM mit einer effektiven Hybridisierung:

$$\Delta(i\omega_n) = \mathcal{G}(i\omega_n) - i\omega_n + \epsilon_d. \quad (4.21)$$

$\mathcal{G}$ muß dabei selbstkonsistent gemäß (4.13) bestimmt werden, worauf im folgenden Abschnitt noch im einzelnen eingegangen werden soll.

Die Äquivalenz zu Einzel-Störstellenmodellen ist zunächst einmal nur eine andere Formulierung desselben Sachverhalts, doch hat sie verschiedene Gruppen dazu motiviert, Methoden, die aus der Behandlung des SIAM bekannt waren, auch auf das Hubbardmodell in $d = \infty$ anzuwenden. Solche Methoden sind etwa störungstheoretischer Art wie die „non crossing approximation“ (NCA) (siehe [Pru93] und Referenzen darin) oder nichtperturbativ wie Quanten-Monte-Carlo-Simulationen [Hir86] und exakte Diagonalisierung [Caf94]. Das reine Hubbardmodell ist von mehreren Gruppen mit verschiedenen Techniken behandelt worden. Gegenstand der Untersuchungen waren das antiferromagnetische Phasendiagramm [Jar92, Jar93, Geo92a], der Mott-Hubbard-Übergang [Geo92a, Geo93, Geo93a, Gro94, Roz92, Zha93], sowie auch Transporteigenschaften [Pru93]. Auf einige wesentliche Ergebnisse wird bei der Darstellung der Resultate zum ungeordneten Hubbardmodell im folgenden Bezug genommen werden. Georges et al. beobachteten ferner das Auftreten supraleitender Instabilitäten in einer Zweibandversion des Hubbardmodells [Geo93a]; Jarrell et al. wandten die Methoden auch auf andere Modelle wie das periodische Andersonmodell [Jar93a] und das Holsteinmodell [Fre93] an. Die Bildung lokaler magnetischer Momente und der Metall-Isolator-Übergang wurde kürzlich im Anderson-Hubbard-Modell mit zu-

fallsverteilten Hüpfamplituden im wesentlichen mit perturbativen Methoden untersucht [Dob93].

4.3. Selbstkonsistenzgleichungen in der gebrochenen Phase

Bekanntermaßen weist das reine Hubbardmodell bei halber Bandfüllung und hinreichend großem U antiferromagnetische langreichweitige Ordnung (AFLRO) auf. Zumindest im Limes $d = \infty$ existiert AFLRO auch etwas abseits der halben Bandfüllung sowie für beliebig kleine U im Grundzustand [Jar92]. Um die AF-Phase auch in der Anwesenheit von Unordnung zu studieren, erweitern wir die freie Energie (4.13) auf die symmetriebrochene Phase. Wir beschränken uns dabei auf den Fall paarer Gitter und müssen dazu die Greenfunktionen und Selbstenergien auf den beiden Untergittern unterscheiden. Die Symmetriebrechung durch AFLRO ist analog zu der durch die Ladungsdichtewelle induzierten (siehe Kapitel 3.1). Wie dort kann sie durch ein symmetriebrechendes (hier magnetisches) Feld h_s beschrieben werden:

$$\hat{H}_s = \sum_{i\sigma} e^{iQR_i\sigma} h_s \hat{n}_{i\sigma}. \quad (4.22)$$

mit $Q = (\pi, \dots, \pi)$. $\hat{H}_s$ wirkt also mit unterschiedlichen Vorzeichen auf den beiden Untergittern. Für freie Teilchen mit einem Energieband ε_q kann der Hamiltonoperator mit Symmetriebrechung unter Vernachlässigung der Spinindizes als Summe über 2×2 -Bilinearformen geschrieben werden:

$$\hat{H}_0 + \hat{H}_s = \sum_{q \in \text{RBZ}} \hat{C}_q^\dagger h_q \hat{C}_q, \quad h_q = \begin{pmatrix} \varepsilon_q - \mu & h_s \\ h_s & -\varepsilon_q - \mu \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Dabei ist $C_q^\dagger \equiv (c_q^\dagger, c_{q+Q}^\dagger)$; die q -Vektoren laufen nur über eine halbe Brillouinzone, und es wurde die auf paaren Gittern gültige Beziehung $\varepsilon_{q+Q} = -\varepsilon_q$ ausgenutzt. $\hat{H}_0 + \hat{H}_s$ haben wir bereits in Kapitel 3.1 diagonalisiert. Die Eigenwerte der inversen Greenfunktion $G_q^{-1}(i\omega_n) \equiv \omega I - h_q$ werden damit:

$$\gamma_q^\alpha(i\omega_n) = i\omega_n + \mu + \alpha \sqrt{\varepsilon_q^2 + h_s^2}, \quad (\alpha = \pm 1). \quad (4.24)$$

Die freie Energie ergibt sich aus der „Spur-log“-Formel [Neg88] zu:

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= -\text{Sp} \sum_q \ln G_q^{-1}(i\omega_n) = \sum_{q,n} \ln \gamma_q^\alpha(i\omega_n) \\ &= \sum_{qn} \ln [(i\omega_n + \mu + h_s)(i\omega_n + \mu - h_s) - \varepsilon_q^2]. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Diese Gleichung gilt analog auch für den Fall nicht freier, aber unabhängiger Elektronen, d.h. in der Anwesenheit des lokalen effektiven Potentials Σ , welches nun auch vom

Untergitter abhängt. Die freie Energie (4.13) hat schließlich in der AF-Phase die Form:

$$\begin{aligned} \frac{2}{N} \Omega_{gem} = & -T \sum_{\sigma n} \int_{-\infty}^{\infty} dE N(E) \ln [(i\omega_n + \mu_{A\sigma} - \Sigma_{An}^{\sigma})(i\omega_n + \mu_{B\sigma} - \Sigma_{Bn}^{\sigma}) - E^2] \\ & + T \sum_{\sigma n \gamma} \ln (G_{\gamma n}^{\sigma})^{-1} - T \sum_{\gamma} \langle \ln Z_{\gamma} \{G^{-1}, \epsilon_i\} \rangle_{gem}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

G und Σ erhalten also einen weiteren Index $\gamma \in \{A, B\} \cong \{+1, -1\}$, für die beiden mit „A“ und „B“ bezeichneten Untergitter. Die Zustandssumme Z ist das Produkt der Zustandssummen der beiden Untergitter; bei der Berechnung der Wirkung $\mathcal{A}$ in (4.15) müssen die Grassmannvariablen und Greenfunktionen durch die untergitterabhängigen Größen ersetzt werden, also $\psi_{\sigma n} \rightarrow \psi_{\sigma \gamma n}$ etc. Die Felder $\mu_{\gamma\sigma} \equiv \mu + \gamma\sigma h_s + \sigma h$ enthalten neben dem chemischen Potential das AF-Feld h_s sowie das homogene Magnetfeld h . Es können natürlich noch weitere Felder eingeführt werden, die z.B. Symmetriebrechung durch LDW oder Supraleitung beschreiben. Um die Stabilität der homogenen Phase gegenüber diesen Feldern zu untersuchen, genügt es, aus den zweiten Ableitungen von (4.26) die entsprechenden Suszeptibilitäten bei verschwindendem Feld zu bestimmen. In diesem Fall braucht man nur das homogene Problem selbstkonsistent zu lösen. Will man dagegen die Eigenschaften der gebrochenen Phase selbst bestimmen, so müssen alle relevanten Greenfunktionen und Selbstenergien der Untergitter berücksichtigt werden. Die obigen vier Greenfunktionen $G_{\gamma n}^{\sigma}$ genügen z.B. zur Beschreibung der ferromagnetischen (F)-Phase und der AF-Phase, sowie einer uniaxialen Mischphase (siehe Abschnitt 4.7). Auch eine LDW-Phase könnte dargestellt werden. Für die Untersuchung der reinen AF-Phase genügen unter Ausnutzung der A-B-Symmetrie, $G_{An}^{\sigma} = G_{Bn}^{-\sigma}$ etc., die beiden Greenfunktionen auf einem Untergitter. Wie bereits dargestellt, folgen die physikalischen Werte von G und Σ aus der Stationaritätsbedingung:

$$\frac{\delta \Omega_{gem}}{\delta G_{\gamma n}^{\sigma}} = 0, \quad \frac{\delta \Omega_{gem}}{\delta \Sigma_{\gamma n}^{\sigma}} = 0. \quad (4.27)$$

Dies führt zu zwei gekoppelten Gleichung für $G_{\gamma n}^{\sigma}$ und $\Sigma_{\gamma n}^{\sigma}$:

$$G_{\gamma n}^{\sigma} = \int_{-\infty}^{\infty} dE N(E) \frac{z_{\gamma n}^{\sigma}}{z_{An}^{\sigma} z_{Bn}^{\sigma} - E^2} = - \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle \psi_{\gamma\sigma}(\tau) \psi_{\gamma\sigma}^*(0) \rangle_T \rangle_{gem} \quad (4.28)$$

mit der Abkürzung $z_{\gamma n}^{\sigma} = i\omega_n + \mu_{\gamma\sigma} - \Sigma_{\gamma n}^{\sigma}$. Die thermische Mittelung $\langle \dots \rangle_T$ geschieht mit der lokalen Wirkung Z_{γ} gemäß:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_T = \frac{1}{Z_A Z_B} \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* \mathcal{O} e^{\mathcal{A}_A + \mathcal{A}_B}. \quad (4.29)$$

Die linke Seite von (4.28) bedeutet, daß der lokale Propagator durch das effektive Potential Σ bestimmt wird. Die rechte Seite ist die eigentliche Selbstkonsistenzgleichung für Σ , die die Dynamik des Systems in Abhängigkeit von den Modellparametern T, μ, U und der Unordnungsverteilung bestimmt. Die numerische Behandlung von (4.28) wird in Abschnitt 4.5 dargestellt.

4.4. Bestimmung von Suszeptibilitäten

Eine Lösung der Selbstkonsistenzgleichungen (4.28) ist nicht notwendig die stabile thermodynamische Phase des Modells, da eine stationäre Lösung auch metastabil oder sogar instabil sein kann. Das Auftreten weiterer (meta-)stabiler Phasen kann zu Phasenübergängen erster Ordnung führen, wie es etwa beim TLS-Modell in HFN (Kapitel 3.1) beobachtet wurde. Die thermodynamisch stabile Phase muß in einem solchen Fall durch Vergleich der freien Energien bestimmt werden. Da nicht alle möglichen Phasen untersucht werden können, muß man Annahmen über die vermutlich relevanten Phasen machen. Ein Phasenübergang zweiter Ordnung ist dadurch charakterisiert, daß die selbstkonsistente Lösung gegenüber einem symmetriebrechenden Feld instabil wird. Auch hier muß im allgemeinen eine Auswahl der zu untersuchenden Symmetriebrechungen getroffen werden. Zur Bestimmung der Phasengrenzen (z.B. der kritischen Temperatur) genügt es hier, in der homogenen Phase zu rechnen. Eine Instabilität gegenüber einem Feld x zeigt sich in der Divergenz der dazugehörigen Suszeptibilität X , die sich aus der zweiten Ableitung des großkanonischen Potentials ergibt:

$$X_{gem} = -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 \Omega_{gem}}{\partial x^2}. \quad (4.30)$$

Eine notwendige Voraussetzung für thermodynamische Stabilität ist die Positivität von X ; anders ausgedrückt: Ω_{gem} ist eine konkave Funktion des Feldes x . Allgemein wirken äußere Felder explizit nur über die Terme $\mu_{\gamma\sigma}$ in der freien Energie (4.26). Die Felder wirken auf verschiedenen Untergittern und Spins unterschiedlich, weshalb wir schreiben:

$$\mu_{\gamma\sigma} = x f_{\gamma\sigma}^x, \quad f_{\gamma\sigma}^x = \begin{Bmatrix} \sigma \\ \gamma\sigma \\ 1 \\ \gamma \end{Bmatrix} \quad \text{für } x = \begin{Bmatrix} h \\ h_s \\ \mu \\ \mu_s \end{Bmatrix} \quad (4.31)$$

x wirkt hier auf die homogene und die A-B-Untergittermagnetisierung, bzw. die entsprechenden Elektronendichten. Die erste Ableitung der freien Energie liefert im wesentlichen den Ordnungsparameter der korrespondierenden Phase:

$$\frac{2}{N} \frac{\partial \Omega_{med}}{\partial x} = -T \sum_{\gamma\sigma n} f_{\gamma\sigma}^x G_{\gamma\sigma}^\sigma \quad (4.32)$$

Die Suszeptibilitäten sind also erste Ableitungen der Greenfunktionen. Beim Anderson-Hubbardmodell interessieren wir uns insbesondere für AFLRO und bestimmen daher die AF-Suszeptibilität $\chi_{AF} \equiv \chi_{gem}^{stag}$ mit $x = h_s$. Außerdem soll die Kompressibilität κ_{gem} ($x = \mu$) berechnet werden. κ_{gem} zeigt nicht nur eine eventuelle Instabilität bezüglich Phasenseparation auf ($\kappa_{gem} \rightarrow \infty$), sondern ist auch ein thermodynamisches Kriterium

für einen Metall-Isolator-Übergang ($\kappa_{gem} \rightarrow 0$). Um die Notation übersichtlich zu halten, wird im folgenden die A-B-Symmetrie, $G_{\gamma n}^{\sigma} = G_{-\gamma n}^{-\sigma}$, ausgenutzt, indem wir die Indizes (γ, σ) zu einem einzigen Produktindex $\alpha = \gamma\sigma$ zusammenfassen. Dies ist, wie bereits erwähnt, in der homogenen und der reinen AF-Phase möglich und reduziert die Anzahl unabhängiger Parameter.

Die Suszeptibilitäten (4.30) berechnen wir nun durch Differentiation von (4.32) sowie der Selbstkonsistenzgleichungen (4.28). Letztere schreiben wir in der neuen Notation als:

$$G_{\alpha n} = \langle g_{\alpha n}(E) \rangle_E \quad (4.33)$$

$$G_{\alpha n} = - \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle \langle \psi_{\gamma\sigma}(\tau) \psi_{\gamma\sigma}^*(0) \rangle_T \rangle_{gem} \quad (4.34)$$

mit $g_{\alpha n}(E) = (z_{\alpha n} - E^2/z_{-\alpha n})^{-1}$, $z_{\alpha n} = i\omega_n + \mu_0 + x f_{\alpha}^z - \Sigma_{\alpha n}$.⁸ $\langle \dots \rangle_E$ steht für das Integral über die freie Zustandsdichte $N(E)$. Die Differentiation von (4.34) ergibt:

$$G'_{\alpha n} \equiv \frac{\partial G_{\alpha n}}{\partial x} = T \sum_{\alpha' n'} \Gamma_{nn', n' n}^{\alpha \alpha'} \gamma_{\alpha' n'}^z. \quad (4.35)$$

Dabei ist Γ die lokale Zweiteilchen-Korrelationsfunktion

$$\Gamma_{n_1 n'_1, n'_2 n_2}^{\alpha \alpha'} = \langle \langle \psi_{\alpha n_1} \psi_{\alpha n_2}^* \psi_{\alpha' n'_1} \psi_{\alpha' n'_2}^* \rangle_T \rangle_{gem} - \langle \langle \psi_{\alpha n_1} \psi_{\alpha n_2}^* \rangle_T \rangle_{gem} \langle \langle \psi_{\alpha' n'_1} \psi_{\alpha' n'_2}^* \rangle_T \rangle_{gem}. \quad (4.36)$$

Die Funktion $\gamma_{\alpha n}^z = \frac{\partial}{\partial x} [G_{\alpha n}^{-1} + \Sigma_{\alpha n}]$ mißt die Antwort des effektiven Potentials auf das äußere Feld. Wegen ihrer Frequenzabhängigkeit wird sie als *dynamische Antwortfunktion* bezeichnet. Während Γ eine rein lokale Größe ist, enthält γ die Informationen über langreichweitige Ordnung. Sie hängt zwar nicht explizit vom Impuls q ab, ist aber deshalb nicht lokal, sondern nur *diagonal* im Impulsraum. Die q -Abhängigkeit steckt implizit in dem betrachteten äußeren Feld. So ist $q = (0, \dots, 0)$ für κ_{gem} und $q = (\pi, \dots, \pi)$ für χ_{AF} . γ wird über eine Integralgleichung bestimmt, die im folgenden hergeleitet wird. Dazu differenzieren wir nun (4.33) nach x und erhalten:

$$G'_{\alpha n} = \left(\gamma_{\alpha n}^z + \frac{G'_{\alpha n}}{G_{\alpha n}^2} - f_{\alpha}^z \right) \xi_{\alpha n} + \left(\gamma_{-\alpha n}^z + \frac{G'_{-\alpha n}}{G_{-\alpha n}^2} - f_{-\alpha}^z \right) \eta_{\alpha n} \quad (4.37)$$

mit den Abkürzungen $\xi_{\alpha n} = \langle g_{\alpha n}^2(E) \rangle_E$, $\eta_{\alpha n} = \langle E^2 g_{\alpha n}^2(E) \rangle_E / z_{-\alpha n}^2$. Auflösen von (4.37) nach $G'_{\alpha n}$ und Gleichsetzen mit (4.35) liefert eine Matrixgleichung für γ_{α}^z :

$$\sum_{\alpha' n'} (\delta_{nn'} R_n^{\alpha \alpha'} + T \Gamma_{nn', n' n}^{\alpha \alpha'}) \gamma_{\alpha' n'}^z = v_{\alpha n}^z. \quad (4.38)$$

In dem Untergitterindex sind $R_n^{\alpha \alpha'}$ und $v_{\alpha n}^z$ zweidimensionale Matrizen bzw. Vektoren, die wir wie folgt schreiben können:

$$R_n = -(\det D_n)^{-1} D_n T_n, \quad v_n^z = R_n f^z \quad (4.39)$$

⁸ μ_0 meint ein konstantes chemisches Potential zur Regulierung der Teilchendichte und wird hier formal vom Feld $x = \mu$ unterschieden.

mit $\mathbf{f}^z \equiv (f_A^z, f_B^z)^T$ und den Matrizen:

$$\mathbf{D}_n = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\xi_{-,n}}{G_{-,n}^2} & \frac{\eta_{+,n}}{G_{-,n}^2} \\ \frac{\eta_{-,n}}{G_{+,n}^2} & 1 - \frac{\xi_{+,n}}{G_{+,n}^2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} \xi_{+,n} & \eta_{+,n} \\ \eta_{-,n} & \xi_{-,n} \end{pmatrix}. \quad (4.40)$$

Durch Inversion von (4.38) erhalten wir γ_α^z aus den lokalen Größen $\mathbf{R}_n$ und Γ . $\mathbf{R}_n$ und Γ enthalten Ein- bzw. Zweiteilchen-Greenfunktionen des lokalen Problems mit der Wirkung $\mathcal{A}$ (4.15). Kennen wir γ_α^z , so erhalten wir $G'_{\alpha n}$ etwa mit (4.35) und damit die Suszeptibilität aus (4.30) und (4.32):

$$X = T \sum_{\alpha n} f_\alpha^z G'_\alpha = \frac{T^2}{2} \sum_{\alpha \alpha'} \sum_{nn'} \Gamma_{nn', n'n}^{\alpha \alpha'} \gamma_{\alpha' n'}^z. \quad (4.41)$$

Die Matrixgleichung (4.38) macht auf einer mehr technischen Ebene deutlich, warum $\gamma_{\alpha n}^z$ die entscheidende Größe für die Stabilität gegenüber dem Feld z ist. Während Γ als Integral über Zweiteilchen-Propagatoren immer endlich bleibt, kann $\gamma_{\alpha n}^z$ und damit auch X durch die Inversion der Matrix in (4.38) divergieren. Die Phase wird instabil, wenn (mindestens) ein Eigenwert dieser Matrix verschwindet. Wir werden sehen, daß das Verhalten der dynamischen Antwortfunktion für niedrige Matsubarafrequenzen, also nahe der Fermikante die wesentliche Information in der Nähe einer Instabilität enthält. Die frequenz aufgelöste Funktion $\gamma_{\alpha n}^z$ ist daher eine empfindlichere Größe als die bereits gemittelten Suszeptibilitäten.

4.5. Numerische Behandlung

In diesem Abschnitt soll die numerische Lösung der Selbstkonsistenzgleichungen für G und Σ dargestellt werden. Auf die Berechnung der Suszeptibilitäten wird im Anhang B eingegangen werden. Wir verwenden wieder die Notation des vorherigen Abschnitts, d.h. mit dem kombinierten Spin- und Untergitterindex $\alpha = \gamma\sigma$. Die Bestimmungsgleichungen (4.34) und (4.34) können iterativ gelöst werden. Eine mögliche Iterationsfolge kann folgendermaßen symbolisiert werden:

$$\begin{array}{ccc} \Sigma = \mathcal{G}^{-1} - \tilde{G}^{-1} & \xrightarrow{(4.33)} & G = \langle g(E) \rangle_E \\ \uparrow & & \downarrow \\ \tilde{G} = -\langle \psi \psi^* \rangle & \xleftarrow{(4.34)} & \mathcal{G} = [G^{-1} + \Sigma]^{-1} \end{array} \quad (4.42)$$

Wir starten oben links mit einer Test-Selbstenergie Σ – etwa mit der freien Elektronen ($\Sigma_{\alpha n} \equiv 0$) oder mit der HF-Selbstenergie ($\Sigma_{\alpha n} \equiv U \langle n_{-\alpha} \rangle$) – und berechnen daraus G als Integral über $N(E)$. Dann bestimmen wir den effektiven lokalen Propagator $\mathcal{G}$ und lösen

das dazugehörige lokale Problem (4.34). Damit erhalten wir eine neue Greenfunktion $\tilde{G}$ und ein neues effektives Potential Σ . Diese Schritte werden wiederholt, bis hinreichend gute Konvergenz erzielt worden ist, d.h. bis G und $\tilde{G}$ sich im Rahmen einer vorgegebenen Toleranz nicht mehr unterscheiden. Der schwierige und nicht exakt durchführbare Schritt in der Iteration ist die Lösung des lokalen Problems. Der Grund ist der Wechselwirkungsterm in der Wirkung $\mathcal{A}$. Um verlässliche und im Prinzip näherungsfreie Resultate zu erzielen, verwenden wir die Methode der Monte-Carlo-Simulation. Die Ergebnisse sind im Rahmen statistischer und kontrollierbarer systematischer Fehler exakt. Die Nachteile sind die relativ aufwendigen Rechnungen, sowie die durch die Rechenzeiten auferlegte Beschränkung auf relativ hohe Temperaturen. Auch die Bestimmung dynamischer Eigenschaften erweist sich als numerisch sehr aufwendig. Auf der anderen Seite ist es – neben der recht neuen Methoden der „exakten Diagonalisierung“ [Caf94] – die einzige Möglichkeit, das Modell in $d = \infty$ ohne weitere Näherungen zu lösen. Wegen der Äquivalenz zu Einzel-Störstellenmodellen bietet sich hier das großkanonische Monte-Carlo-Verfahren nach Hirsch und Fye [Hir86] an. Es beruht auf den gleichen Prinzipien wie das GQMC-Verfahren, das in Kapitel 2.1 dargestellt wurde. Hier sollen nur einige wesentlich Punkte und Unterschiede herausgestellt werden.

Die numerische Behandlung des lokalen Problems (untere Zeile in (4.42)) erfolgt wie üblich in imaginärer Zeitdarstellung. Das Intervall $[0, \beta]$ wird in L Abschnitte der Größe $\Delta\tau = \beta/L$ diskretisiert, und wir erhalten die diskretisierte lokale Wirkung:

$$\mathcal{A}\{G, \epsilon_i\} = \Delta\tau^2 \sum_{\alpha} \sum_{l, l'=0}^{L-1} \psi_{\alpha l}^* (G_{\alpha}^{-1}(l-l') - \epsilon_i) \psi_{\alpha l'} - \frac{1}{2} \Delta\tau U \sum_{\alpha l} \psi_{\alpha l}^* \psi_{\alpha l} \psi_{-\alpha l}^* \psi_{-\alpha l}. \quad (4.43)$$

Die obere Zeile in (4.42) berechnet dagegen Größen in Matsubarafrequenzen. Im Fall der halbelliptischen Zustandsdichte (4.4) kann die Integration (4.33) analytisch durchgeführt werden, und wir erhalten:

$$G_{\alpha n} = \frac{2z_{-\alpha n}}{w^2} [1 - \sqrt{1 - w^2/(z_{\alpha n} z_{\beta n})}]. \quad (4.44)$$

Zwischendurch, d.h. zweimal pro Iteration, müssen die zeitabhängigen Größen in frequenzabhängige bzw. umgekehrt durch Fouriertransformation umgerechnet werden:

$$G_{\alpha}(l\Delta\tau) = T \sum_{n=-L/2}^{L/2-1} G_{\alpha n} e^{-i\omega_n l\Delta\tau}, \quad G_{\alpha n} = \Delta\tau \sum_{l=0}^{L-1} G_{\alpha}(l\Delta\tau) e^{-i\omega_n l\Delta\tau}. \quad (4.45)$$

Die Wechselwirkung kann wie üblich durch eine Hubbard-Stratonovich-(HS-)Transformation entkoppelt werden. Die diskrete Version (siehe Kapitel 2.1) liefert bis auf eine Konstante die lokale Zustandssumme als eine Summe über die Werte ± 1 der HS-Hilfsvariablen

$\{s_l\}$:

$$\begin{aligned} Z(\epsilon_i) &= \sum_{\{s_l=\pm 1\}} \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* \exp \left\{ \sum_{\alpha l l'} \psi_{\alpha l}^* M^{\alpha}(s)_{ll'} \psi_{\alpha l'} \right\} \\ &= \sum_{\{s_l=\pm 1\}} \prod_{\alpha} \det M^{\alpha}(s). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Dabei ist $M^{\alpha}(s)_{ll'} = \Delta\tau^2 \mathcal{G}_{\alpha}^{-1}(l-l') - \Delta\tau \delta_{ll'} [\alpha \lambda s_l + \epsilon_i - U/2]$; $\lambda = \text{arcosh}[\exp(\Delta\tau U/2)]$. Der gemittelte Einteilchenpropagator berechnet sich aus:

$$G_{\alpha}((l-l')\Delta\tau) = \left\langle \sum_{\{s_l\}} \frac{1}{Z(\epsilon_i)} (M^{\alpha}(s))_{ll'}^{-1} \det M^{+}(s) \det M^{-}(s) \right\rangle_{gem}. \quad (4.47)$$

G – wie auch die Zweiteilchenkorrelationen – wird also für alle Werte des Potentials ϵ_i berechnet und anschließend gemittelt. Technisch ausgedrückt: Die untere Zeile in (4.42) besteht aus einer Schleife über die ϵ_i -Werte. Die Summation über das HS-Feld wird wieder mit Einzel-Spinflips durchgeführt, die eine effiziente Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten und Greenfunktionen erlaubt. Deren Berechnung erfolgt ähnlich wie in Kapitel 2.1 dargestellt und soll hier deshalb nicht näher ausgeführt werden. Es sei nur bemerkt, daß der Ortsindex hier formal durch den Zeitindex ersetzt worden ist. Wir haben hier zwar nur ein lokales Problem vorliegen, jedoch brauchen wir zur Berechnung der Erwartungswerte stets den vollen zeitabhängigen Propagator. Dieser ist ferner für eine feste Konfiguration des HS-Feldes zeitlich nicht translationsinvariant. Die Dimension der hier auftretenden Matrizen ist L ; der Rechenaufwand für die Neuberechnung der lokalen Greenfunktion für jede HS-Feldkonfiguration analog zu (2.32) ist daher proportional zu L^2 . Für kleine Gitter ($L \leq 22$) ist es möglich, über sämtliche 2^L Konfigurationen zu summieren⁹. Wegen der exponentiell anwachsenden Rechenzeit muß man für $L > 22$ Methoden des „importance sampling“ anwenden. Bei vollständiger Summation konvergiert das Iterationsverfahren in typischerweise 4-8 Iteration mit einer Genauigkeit von $\sim 10^{-5}$. Bei der MC-Summation beträgt der Fehler hier noch etwa 10^{-3} und kann durch weitere Iterationen in der Regel nicht mehr wesentlich verbessert werden. In der Nähe thermodynamischer Instabilitäten wird die Konvergenz erwartungsgemäß deutlich langsamer. Bei großen Werten von U wird das „MC sampling“ zunehmend ineffektiv, so daß, wenn möglich, die vollständige Summation vorzuziehen ist. Bei kleinen und mittleren Werten von U arbeitet die MC-Simulation dagegen auch bei recht tiefen Temperaturen zufriedenstellend.

Alle Resultate müssen schließlich zum Kontinuumsmites $\Delta\tau \rightarrow 0$ extrapoliert werden. Auf der anderen Seite läßt uns der Fehler in $\Delta\tau$ auch Freiheiten etwa bei der Definition der Greenfunktionen, unter der Voraussetzung, daß sie für $\Delta\tau \rightarrow 0$ mit der exakten übereinstimmt. Die Diskretisierung hat nämlich zur Folge, daß die $G_{\alpha}(l\Delta\tau)$ in (4.45) nicht

⁹Die Rechenzeit für eine Iteration beträgt auf einem Prozessor der CRAY Y-MP hier etwa 300 Sekunden.

den Werten der kontinuierlichen Greenfunktion bei $\tau = l\Delta\tau$ entspricht; es treten vielmehr Oszillationen in $G_\alpha(l\Delta\tau)$ auf. Insbesondere gibt der Wert bei $l = 0$ nicht den Limes $G_\alpha(\tau \rightarrow 0+) = n - 1$ wieder, sondern ist z.B. für $\mu = 0$ wegen der Antisymmetrie von $G_{\alpha n}$ auch für beliebig große L exakt gleich null. Ein Ausweg besteht darin, die Zwischenwerte von $G_\alpha(\tau)$ durch lineare Interpolation zu ergänzen, und daraus $G_{\alpha n}$ für *alle* (praktisch: einige tausend) Matsubarafrequenzen zu bestimmen [Geo93]. Dazu sind für jede Iteration aufwendige Fouriertransformationen erforderlich; außerdem muß $\Sigma_{\alpha n}$ für große n geeignet definiert werden. Eine andere Methode besteht darin, $G_{\alpha n}$ wie folgt umzudefinieren:

$$\bar{G}_{\alpha n} = \Delta\tau [\exp(\Delta\tau/G_{\alpha n}) - 1]^{-1} \quad (4.48)$$

$G_\alpha(l)$ ist dann als Fouriertransformierte von $\bar{G}_{\alpha n}$ gemäß (4.45) definiert. Sie wird für $\Delta\tau \rightarrow 0$ gleich der kontinuierlichen Greenfunktion und ist auch für endliche $\Delta\tau$ eine glatte Funktion von τ (siehe Abbildung 4.1). Ferner hat $G_\alpha(0)$ bei $\mu = 0$ den korrekten Wert von -0.5 und konvergiert abseits halber Bandfüllung schnell gegen $n_\alpha - 1$. Bei verschwindender Bandbreite („atomarer Grenzfall“) liefert (4.48) die exakte Greenfunktion ohne jeden Diskretisierungsfehler (siehe Anhang B).

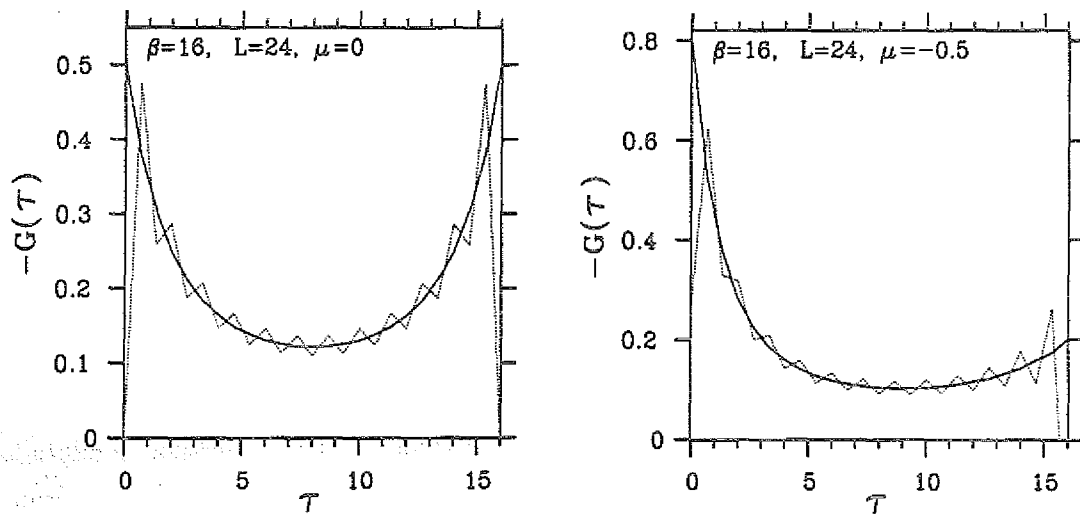


Abbildung 4.1: Diskretisierte Greenfunktion $G(\tau)$ für freie Elektronen (Polygonzüge). Gestrichelte Linien: aus normaler Fouriertransformation von G_n ; durchgezogene Linien: nach Umdefinition von G_n gemäß (4.48). (Die kontinuierliche Greenfunktion liegt innerhalb der Strichstärke.) a) $\mu = 0$, b) $\mu = -0.5$.

4.6. Ergebnisse

Die folgenden Abschnitte stellen Ergebnisse zum Anderson-Hubbardmodell bei halber Bandfüllung dar. Ohne Unordnung weist das Hubbardmodell hier zwei wesentliche physikalische Phänomene auf: Zum einen die Bildung antiferromagnetischer langreichweitiger Ordnung (AFLRO) mit einem durch die Symmetriebrechung induzierten Metall-Isolator-Übergang. Zum anderen einen Metall-Isolator-Übergang (MIÜ) durch die Wechselwirkung, den „Mott-Hubbard“-Übergang. Da, wie bereits erwähnt, der Grundzustand stets AF-geordnet ist, kann der „Mott-Hubbard“-Übergang nur als „Metall-Halbleiter“-Übergang oberhalb der Néel-Temperatur T_N beobachtet werden. Auf der anderen Seite ist es möglich die A-B-Symmetriebrechung künstlich zu unterdrücken indem man die Greenfunktionen auf den Untergittern gleichsetzt, um den „Mott-Hubbard“-Übergang bei tiefen Temperaturen zu studieren. Die so entstandene Phase entspricht einem hypothetischen Modell, in dem - etwa durch Unordnung - die AF-Phase zerstört ist. Eine andere Möglichkeit die AFLRO zu unterdrücken, besteht darin, Zustandsdichten nicht-paariger Gitter, etwa die des *fcc*-Gitters zu verwenden (siehe Abschnitt 4.8).

Unordnung allein kann ebenfalls zu einem isolierendem Verhalten führen. Im Limes $d \rightarrow \infty$ gibt es zwar keine lokalisierten Zustände mehr, aber eine diskrete Verteilung der Unordnungspotentiale kann eine Bandaufspaltung und dadurch einen MIÜ bewirken [Ell74]. Auf der anderen Seite erwartet man, daß die Unordnung jede langreichweite Ordnung unterdrückt. Im Zusammenspiel von Wechselwirkung und Unordnung stellen sich daher folgende Fragen:

1. Gibt es eine kritische Unordnungsstärke, ab der es keine AFLRO mehr gibt?
2. Wird die Néel-Temperatur durch Unordnung stets reduziert?
3. Schwächt die Wechselwirkung stets das metallische Verhalten?
4. Welche Rolle spielt die Wahl der Unordnungsverteilung?

Nach der Definition der verschiedenen untersuchten Unordnungsverteilungen im folgenden Abschnitt, sollen möglichst explizite Antworten auf die obigen Fragen gegeben werden.

4.6.1. Unordnungsverteilungen

Bei der Mittelung über die Zufallspotentiale ϵ_i in (4.10) haben wir noch die Freiheit der Wahl der Unordnungsverteilung $P(\epsilon_i)$. Wir untersuchen drei qualitativ verschiedene Verteilungen:

a) Eine zweiwertige Verteilung:

$$P_{\text{binär}}(\epsilon_i) = \frac{1}{2} \left[\delta(\epsilon_i - \frac{\Delta}{2}) + \delta(\epsilon_i + \frac{\Delta}{2}) \right]. \quad (4.49)$$

Dies entspricht einer ungeordneten Legierung aus zwei Komponenten, deren atomare Potentiale um einen Betrag Δ auseinanderliegen. Wir betrachten hier nur den Fall gleicher Konzentrationen der Komponenten, in dem wir die mittlere Bandfüllung auf $n = 1$ festhalten können. Der freie Parameter Δ ist ein Maß für die Unordnungsstärke. Im Fall $U = 0$ ist aus der CPA bekannt, daß das Modell in $d \rightarrow \infty$ für $\Delta \geq w$ durch Bandaufspaltung isolierend wird. (w ist die halbe Bandbreite, siehe (4.4), die von nun an unsere Energieskala darstellt: $w \equiv 1$.)

b) Eine kontinuierliche Verteilung:

$$P_{\text{kont}}(\epsilon_i) = \frac{8}{\pi \Delta^2} \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 - \epsilon_i^2}. \quad (4.50)$$

Hier sind die Potentiale symmetrisch und kontinuierlich zwischen $-\Delta/2$ und $\Delta/2$ verteilt. Die genaue, hier halbelliptische Form ist dabei nicht wesentlich; Vergleichsrechnungen mit einer konstanten Verteilung ergaben im Rahmen der Genauigkeit fast ununterscheidbare Resultate. Numerisch wird die Integration über kontinuierliche Unordnungsverteilungen mittels der Gauss-Legendre-Quadratur durchgeführt [Pre89]. Eine mittlere Diskretisierung der Zufallspotentiale von $\delta\epsilon \approx 0.2$ liefert eine voll ausreichende Genauigkeit von etwa 10^{-5} für alle Observablen. Bei der größten untersuchten Breite von $\Delta = 6$ entspricht dies 30 Stützstellen. Die kontinuierliche Verteilung kann als ein effektives Modell verstanden werden, das den Einfluß von Gitterverzerrungen auf die Werte der lokalen Potentiale auf eine sehr pauschale Art berücksichtigt.

c) Leerstellenunordnung

$$P_{\text{leer}}(\epsilon_i) = (1 - x) \delta(\epsilon_i). \quad (4.51)$$

Bei dieser Verteilung können Gitterplätze mit einer Wahrscheinlichkeit x nicht besetzt werden. Sie beschreibt zwei verschiedene physikalische Situationen: zum einen zufällig verteilte Leerstellen in einem Kristall, zum anderen Dotierung mit Fremdatomen, deren Orbitale nicht mit dem Leitungsband hybridisieren. Die Elektronendichte wird dabei so gewählt, daß das Leitungsband auf den verbliebenen Gitterplätzen halb gefüllt ist. Wir haben also ein halbgefülltes Hubbardmodell auf einem verdünnten Gitter. Hier ergibt sich ein Zusammenhang mit der Perkolationstheorie: Langreichweitige Ordnung kann sich nur dann ausbilden, wenn die Konzentration $1 - x$ der verbliebenen Gitterplätze größer ist als die kritische Konzentration ρ_{perk} für die Perkolation auf dem Gitter. Da in $d \rightarrow \infty$ $\rho_{\text{perk}} = 0$ gilt [Bun88], ist hier zumindest im Grundzustand für alle x AFLRO zu erwarten.

4.6.2. Antiferromagnetisches Phasendiagramm

Zur Bestimmung der Néel-Temperatur als Funktion von U und Δ bzw. x untersuchen wir die Stabilität der homogenen Phase gegenüber AFLRO. Hier entfällt die Abhängigkeit vom Untergitterindex α , und wir schreiben kurz: $\Sigma_n \equiv \Sigma_{\alpha n}$ etc. und $\gamma_n \equiv \gamma_{\alpha n}^{hs}$. Wie oben dargestellt, ist es die dynamische Antwortfunktion γ_n , die über die Stabilität der homogenen Phase entscheidet. Die AF-Suszeptibilität χ_{AF} divergiert genau dann, wenn der Realteil von γ_n für mindestens eine Matsubarafrequenz ω_n divergiert. Jede Frequenz entspricht einem von unendlich vielen, gekoppelten Freiheitsgraden („Moden“) des quantenmechanischen Systems. Es sei darauf hingewiesen, daß die unabhängigen Moden nicht den Matsubarafrequenzen entsprechen, da die Matrixgleichung (4.38) nicht diagonal in n ist; sie sind vielmehr durch die Eigenvektoren der Matrixgleichung gegeben. Jede unabhängige Mode besitzt ihre eigene kritische Temperatur. Da die Funktionen γ_n Linearkombinationen der unabhängigen Moden sind, divergieren sie deshalb i.a. alle bei der maximalen, physikalisch relevanten kritischen Temperatur T_N . Abbildung 4.2a zeigt γ_n im Fall der binären Unordnungsverteilung für die ersten drei Matsubarafrequenzen als Funktion der Temperatur. Es wird deutlich, daß $\gamma_{n=0}$ am stärksten divergiert, d.h. die Funktionswerte nahe der Fermienergie reagieren am empfindlichsten auf eine Instabilität.

Aus γ_n und der Zweiteilchen-Korrelationsfunktion $\Gamma_{nn'n'n}$ (4.36) berechnen wir dann die AF-Suszeptibilität χ_{AF} gemäß (4.41). Gibt es eine Néel-Temperatur $T_N > 0$, so muß χ_{AF} oberhalb T_N dem Curie-Weiss-Gesetz folgen: $\chi_{AF} \propto (T - T_N)^{-1}$. Aus der Extrapolation $\chi_{AF}^{-1} \rightarrow 0$ kann die Néel-Temperatur ermittelt werden. Eine andere Möglichkeit besteht darin, unterhalb von T_N in der gebrochenen Phase die Untergittermagnetisierung $M_{AF} \equiv |n_{\alpha} - n_{-\alpha}|$ zu bestimmen. Diese sollte mit einem „mean field“-artigen Gesetz $M_{AF} \propto (T_N - T)^{1/2}$ – an der kritischen Temperatur verschwinden. Beide Möglichkeiten sind in Abbildung 4.2b am Beispiel der binären Unordnungsverteilung für $\Delta = 1$ und $U = 2$ gezeigt. χ_{AF} folgt in einem weiten Temperaturbereich dem Curie-Weiss-Gesetz und erlaubt eine sichere Bestimmung von T_N . Die Untergittermagnetisierung zeigt dagegen bei tiefen Temperaturen deutliche Abweichungen vom Wurzelverhalten. Hier tritt eine Sättigung bei einem Wert von $M_{AF} \approx 0.8$ ein, d.h. die Untergitter sind zu 80% polarisiert. Die gestrichelte Kurve zeigt einen „least square fit“ der Wurzelfunktion durch die beiden kleinsten Werte von M_{AF} . Diese Extrapolation und diejenige aus dem Curie-Weiss-Gesetz liefern bis auf eine relative Abweichung von etwa 10^{-3} denselben Wert für die kritische Temperatur. Dabei ist zu bemerken, daß die Daten in Abbildung 4.2b für $T > 0.07$ aus der vollständigen Summation gewonnen wurden, also keine statistischen Fehler auftraten. Bei der MC-Simulation unterliegt der Ordnungsparameter in der Nähe des Phasenübergangs großen Fluktuationen, die mit der starken Suszeptibilität zusammenhängen. χ_{AF}

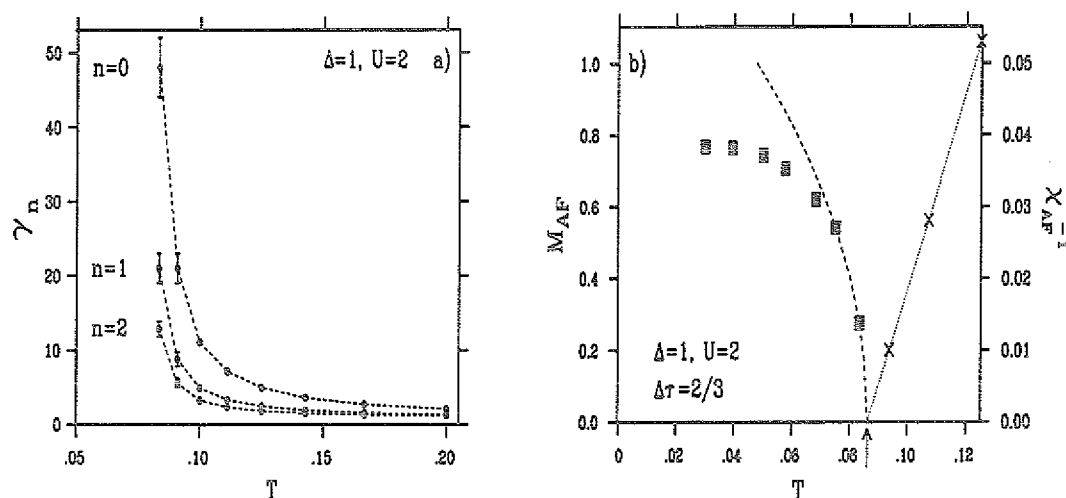


Abbildung 4.2: Antiferromagnetischer Phasenübergang bei der binären Unordnungsverteilung mit $\Delta = 1$ und $U = 2$. a) Dynamische antiferromagnetische Antwortfunktion γ_n vs. T für die drei kleinsten Matsubarafrequenzen. b) Untergittermagnetisierung M_{AF} und inverse Suszeptibilität χ_{AF}^{-1} vs. T . Gestrichelt: „least-square fit“ mit Wurzelfunktion durch die beiden letzten Werte von M_{AF} ; gepunktet: linearer Fit durch die ersten drei Werte von χ_{AF}^{-1} . Pfeil: extrapolierte Néel-Temperatur.

selbst fluktuiert in der homogenen Phase nicht so stark. Außerdem braucht man für die Extrapolation nach dem Curie-Weiss-Gesetz nicht so dicht an die kritische Temperatur herankommen, da es für einen recht großen Temperaturbereich gültig ist. Wegen dieser Vorzüge werden wir im folgenden die kritische Temperatur stets aus dem Curie-Weiss-Gesetz extrapolieren. Hier kann bei relativ hohen Temperaturen gerechnet werden, was die Rechenzeiten reduziert bzw. oft die vollständige Summation erlaubt. Die so ermittelten kritischen Temperaturen hängen noch von der Diskretisierung in imaginärer Zeit ab und müssen für $\Delta\tau \rightarrow 0$ extrapoliert werden.

Wir untersuchen die Stabilität der homogenen Phase für verschiedene Werte der Wechselwirkung U und der Unordnungsstärke Δ zunächst für die zweiwertige Unordnungsverteilung [Jan93]. Dabei treten drei qualitativ verschiedene Temperaturabhängigkeiten von χ_{AF} auf. Diese sind in Abbildung 4.3 für $\Delta = 2$ dargestellt. Ist U deutlich größer als Δ , so finden wir das Curie-Weiss-Gesetz mit einer endlichen Néel-Temperatur wie im Fall ohne Unordnung. Sind U und Δ etwa gleich groß, treten bei tiefen Temperaturen Abweichungen vom Curie-Weiss-Gesetz auf. Eine lineare Extrapolation würde hier negative Übergangstemperaturen ergeben. Ist schließlich Δ die dominierende Energieskala, so wird ein Minimum in χ_{AF}^{-1} beobachtet. Hier kann auch für noch tiefere Temperatu-

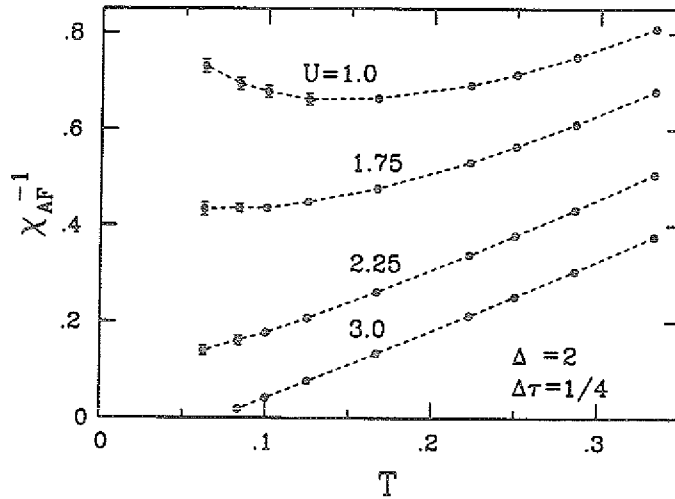


Abbildung 4.3: Inverse antiferromagnetische Suszeptibilität vs. Temperatur. Binäre Unordnungsverteilung mit $\Delta = 2$ und verschiedenen Werten von U .

ren kein Auftreten von AFLRO mehr erwartet werden. Gerade bei tiefen Temperaturen gewinnt die Streuung an den statischen Zufallspotentialen an Bedeutung. Das Minimum in χ_{AF}^{-1} trennt gewissermaßen den temperaturdominierten Bereich vom unordnungsdominierten. Die Rechnungen können schließlich als Phasendiagramme in der $T - U$ -Ebene für verschiedene Werte von Δ zusammengefaßt werden (Abbildung 4.4). Die Werte für das reine Hubbardmodell ($\Delta = 0$) entsprechen den Néel-Temperaturen, die auch von anderen Gruppen [Jar92, Geo93] gefunden worden sind. Für kleine U ist T_N sehr klein, wächst dann schnell bis zu einem Maximum von $T_{N,max} \approx 0.1$ und fällt für große U entsprechend dem Heisenberg-Limes wie $1/U$ ab. Unter dem Einfluß von Unordnung zeigen die Phasengrenzen zwei globale Effekte: Zum einen werden die Kurven mit zunehmendem Δ insgesamt niedriger, zum anderen verschieben sie sich auf der U -Achse etwa um einen Betrag Δ nach rechts. Für kleine U folgt hieraus, daß die AFLRO durch die Unordnung zerstört wird. Unterhalb eines kritischen Wert $U_c \approx \Delta$, finden wir keine Divergenz von χ_{AF} . Die gepunkteten Kurven geben dabei eine Art „Unsicherheitsbereich“ an, indem das Curie-Weiss-Gesetz keine positiven Néel-Temperaturen mehr liefert, χ_{AF}^{-1} aber zumindest im untersuchten Temperaturbereich noch kein Minimum aufweist. Die Unterdrückung von AFLRO durch Unordnung ist das, was man intuitiv auch erwartet. Völlig anders sieht es aber für große U aus. Hier schneiden sich die T_N -Kurven, was bedeutet, daß die Unordnung die AFLRO stabilisiert. T_N wächst also für festes U mit der Unordnung an (siehe Abbildung 4.5). Dieser Anstieg erfolgt bis zu einem Maximum in $T_N(\Delta)$. Bei weiterer Erhöhung von Δ fällt T_N wieder ab und verschwindet etwa bei $\Delta \approx U$ vollständig.

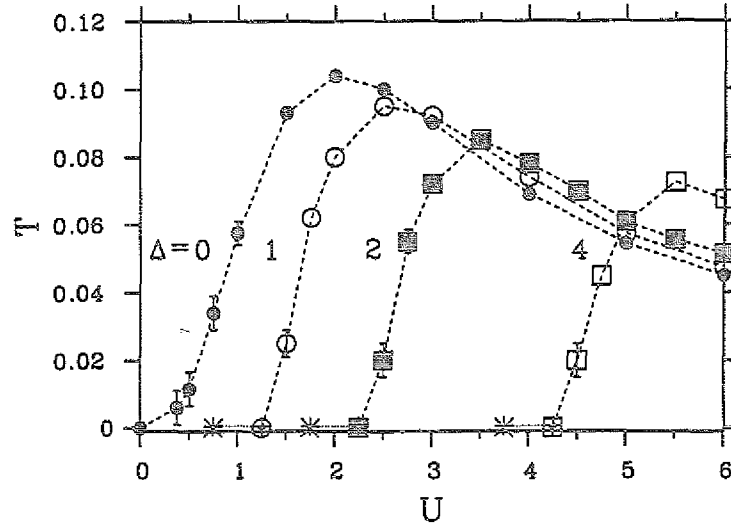


Abbildung 4.4: Antiferromagnetisches $T-U$ -Phasendiagramm für die binäre Unordnungsverteilung mit verschiedenen Werten von Δ . AFLRO ist unterhalb der Kurven stabil. Die gepunkteten Linien entsprechen den U -Werten, für die eine Extrapolation nach dem Curie-Weiss-Gesetz negative Néel-Temperaturen ergibt (siehe Abb. 4.3).

Wie kann dieses der Intuition widersprechende Verhalten erklärt werden? Da es bei großen Werten von U auftritt, liegt es nahe, das Modell im Heisenberg-Limes zu betrachten. Wir nehmen an, daß die kritische Temperatur auch in Anwesenheit von Unordnung proportional zur antiferromagnetischen Kopplung J ist. J berechnet sich aus dem Energiegewinn durch virtuelles Hüpfen eines Elektrons zu einem benachbarten Gitterplatz, der mit einem Elektron der anderen Spinrichtung besetzt ist. Im thermodynamischen Limes erhält man für das reine Hubbardmodell $T_N \propto zt^2/U$. Wenn jedoch die atomaren Potentiale auf benachbarten Gitterplätzen sich um einen Betrag δ unterscheiden, wie im Fall der Zufallspotentiale, so wird die Energie des virtuellen Zustands $U \pm \delta$. Die effektive Kopplung zwischen den Gitterplätzen wird daher [MHa94]:

$$J(\delta) = \frac{2t^2}{U+\delta} + \frac{2t^2}{U-\delta} \approx J(0) \left[1 + \left(\frac{\delta}{U} \right)^2 \right]. \quad (4.52)$$

Die letzte Näherung gilt für $U \gg \delta$. Im Fall der binären Verteilung ist δ mit gleicher Wahrscheinlichkeit entweder gleich null oder gleich Δ , und wir erhalten für T_N mit der Abkürzung $\tilde{\Delta} = \Delta/U$:

$$\frac{T_N(U, \Delta)_{\text{binär}}}{T_N(U, 0)} = \frac{1 - \frac{1}{2}\tilde{\Delta}^2}{1 - \tilde{\Delta}^2} \approx 1 + \frac{1}{2}\tilde{\Delta}^2, \quad (4.53)$$

also einen quadratischen Anstieg der kritischen Temperatur mit der Unordnung. (4.53) gibt das Verhalten von T_N für große U im Rahmen der Fehlergrenzen wieder (Abbildung 4.5).

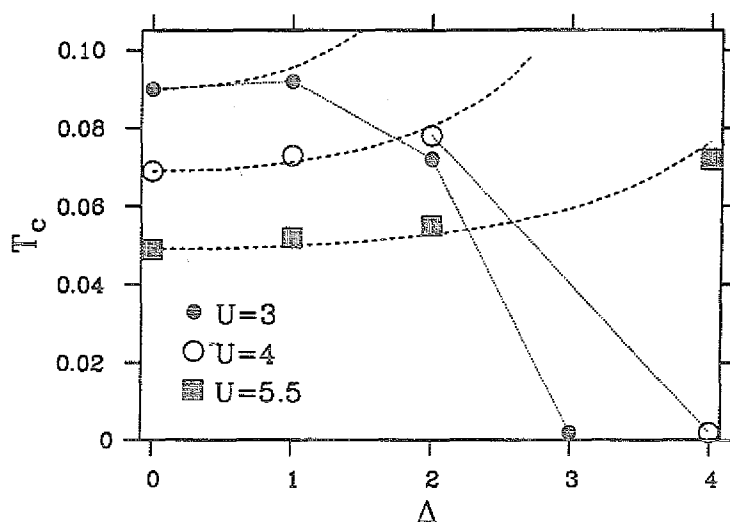


Abbildung 4.5: Néel-Temperatur vs. Δ für die binäre Unordnungsverteilung bei $U=3, 4$ und 5.5 . Gestrichelt: quadratischer Anstieg gemäß (4.53); gepunktete Linien dienen nur der Orientierung.

Allerdings reicht die Genauigkeit nicht für eine sichere Bestätigung aus. Allgemein können wir für eine gegebene Unordnungsverteilung $P(\epsilon)$ (4.52) integrieren, und wir erhalten:

$$\frac{T_N(U, \Delta)}{T_N(U, 0)} \approx 1 + \int \int d\epsilon d\epsilon' \left(\frac{\epsilon - \epsilon'}{U} \right)^2 P(\epsilon) P(\epsilon') = 1 + 2 \frac{\langle \epsilon^2 \rangle_{gem} - \langle \epsilon \rangle_{gem}^2}{U^2}. \quad (4.54)$$

$\langle \dots \rangle_{gem}$ ist wie üblich als Integral über $P(\epsilon)$ definiert. Der Anstieg in T_N ist also proportional zur Varianz der Unordnungsverteilung, solange diese klein gegen U ist. Für die von uns betrachteten symmetrischen Verteilungen verschwindet das erste Moment $\langle \epsilon \rangle_{gem}$, und das mittlere Quadrat $\langle \epsilon^2 \rangle_{gem}$ wird bei gegebener Breite Δ für die binäre Verteilung mit $\Delta^2/4$ maximal; für die halbelliptische Verteilung beträgt es $\Delta^2/16$ und für die konstante $\Delta^2/12$.

Im Phasendiagramm für die binäre Verteilung (Abbildung 4.4) erkennt man, daß für festes Δ der kritische Wert $U_{min}(\Delta)$, bei dem AFLRO einsetzt, d.h., für den wir T_N zu null extrapolieren, genau mit Δ skaliert. Interessanterweise verringert sich auch die maximale kritische Temperatur, $T_{N,max}$, in etwa linear mit Δ . Insgesamt können die T_N -Kurven durch das folgende Skalierungsgesetz zumindest für große U recht gut beschrieben werden (siehe Abbildung 4.6):

$$T_N(U, \Delta) = T_N(U[1 - \bar{\Delta}^2], 0) \left[1 - \frac{1}{2} \bar{\Delta}^2 \right]. \quad (4.55)$$

Dieses Skalierungsgesetz liefert im Heisenberg-Limes gerade (4.53). Es enthält eine Reskalierung sowohl der Wechselwirkung als auch der Funktion der kritischen Temperatur.

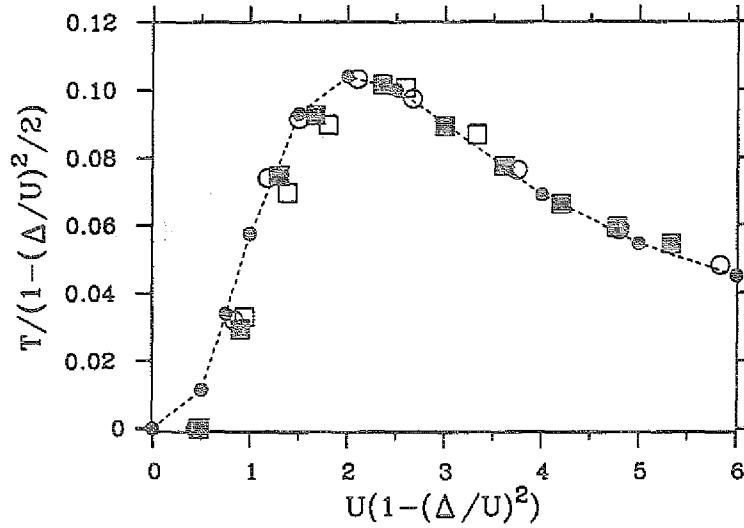
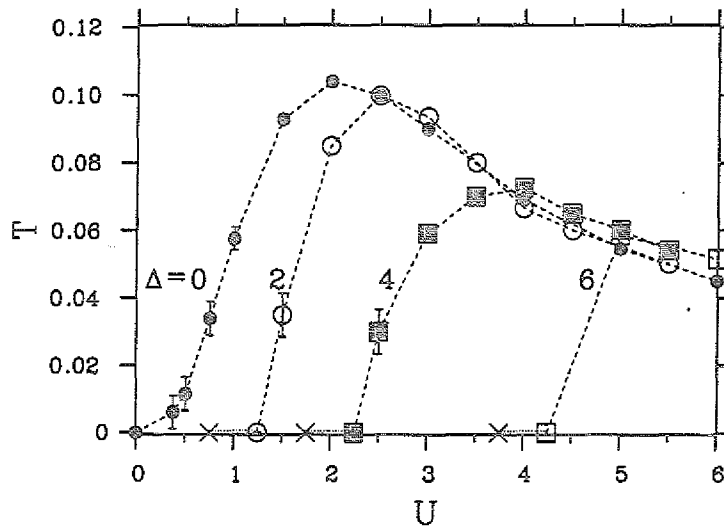


Abbildung 4.6: Skalierung der Néel-Temperatur mit U und Δ für die binäre Unordnungsverteilung gemäß (4.55). Symbole wie in Abbildung 4.4.

Obwohl beide quadratisch mit $\tilde{\Delta}$ abnehmen, bewirkt ihre Kombination eine quasi-lineare Abnahme der maximalen kritischen Temperatur mit Δ . T_N verschwindet in (4.55) offensichtlich für $U \leq \Delta$.

Abbildung 4.7 zeigt das $T - U$ -Phasendiagramm für die semielliptische Unordnungsverteilung. Es zeigt eine ähnliche Struktur wie das für die binäre Verteilung. Wie nach den obigen Überlegungen zu erwarten war, ist die Erhöhung von T_N mit Δ bei großen U hier deutlich schwächer ausgeprägt; der Effekt verschwindet fast in den Fehlergrenzen. Ferner setzt hier die AFLRO für gegebenes Δ bei kleineren Werte $U_{\min}$ ein als im Fall der binäre Verteilung. Dies ist aber verständlich, da der Betrag der Zufallspotentiale hier kontinuierlich zwischen 0 und $\Delta/2$ variiert.

Schließlich betrachten wir den Fall der Leerstellenunordnung. Das Phasengrenze in der $T - x$ -Ebene ist für verschiedene U in Abbildung 4.8 dargestellt. Für große U ($U > 2$) fällt die kritische Temperatur im wesentlichen linear mit der Konzentration x der Leerstellen ab. Dieses Verhalten kann folgendermaßen verstanden werden: Wie bereits erwähnt ist die kritische Konzentration für Perkolation in $d = \infty$ gleich null. AFLRO ist also im Prinzip für alle Werte von x möglich. Was sich durch die „Ausdünnung“ des Gitters ändert, ist die mittlere Anzahl von nächsten Nachbarn, $Z_{\text{eff}}(x) = Z(1 - x)$. Für große U ist wegen der Korrespondenz zum AF-Heisenbergmodell die kritische Temperatur proportional zur Anzahl der nächsten Nachbarn, weshalb wir eine Beziehung: $T_N(x) = T_N(0)(1 - x)$ erwarten können. Interessanterweise ist diese Beziehung bereits für $U = 2$ recht gut erfüllt. $U = 2$ ist der Wert, für den T_N beim reinen Hubbardmodell maximal wird (siehe Abbildung 4.4). Die


 Abbildung 4.7: $T - U$ -Phasendiagramm für die halb-elliptische Unordnungsverteilung.

lineare Abhängigkeit ist ferner das exakte Resultat für das ungeordnete Falicov-Kimball-Modell [Jan92a]. Für kleine Werte von U zeigt $T_N(x)$ dagegen ein konstantes Verhalten bis zu einem Wert x_c und fällt dann sehr stark ab. Das System „bemerkt“ die Unordnung also erst ab einer kritischen Konzentration x_c . Diese verschiebt sich mit kleineren U -Werten in Richtung $x = 1$. Dieses Verhalten widerspricht drastisch dem Hartree-Fock-Resultat, welches einen starken Abfall von T_N mit x und exponentiell kleine Werte für $x \rightarrow 1$ vorhersagt. Im Fall der halbelliptischen Zustandsdichte kann man im Rahmen der HFN das folgende Skalierungsgesetz für T_N ableiten (siehe Anhang C):

$$T_N^{HF}(U, x) = T_N^{HF}(U\sqrt{1-x}, 0) \sqrt{1-x}. \quad (4.56)$$

Aus der HFN für das reine Hubbardmodell (siehe z.B. [vDon90] sowie Kapitel 3.1) wissen wir, daß T_N^{HF} für große U linear mit U ansteigt. Für große Werte von $\tilde{U} = U(1-x)^{1/2}$ erhalten wir daher ein Verhalten: $T_N^{HF}(U, x) \propto U(1-x)$. Bei kleinen $\tilde{U}$, also immer im Limes $x \rightarrow 1$, gilt dagegen $T_N^{HF}(U, x) \propto (1-x)^{1/2} \exp(-c/\tilde{U})$. Obwohl von der HFN im allgemeinen angenommen wird, daß sie für schwache Wechselwirkung eine zumindest qualitativ korrekte Beschreibung liefert, sind die Resultate im Fall der Leerstellenunordnung auch qualitativ völlig anders als die Monte-Carlo-Ergebnisse.

Zur Bildung von magnetischen Korrelationen bedarf es lokaler magnetischer Momente. Ihr statischer Mittelwert, m_{gem} , ist definiert durch $m_{gem}^2 = N^{-1} \sum_i \langle (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})^2 \rangle_T \rangle_{gem} = 1 - 2d_{gem}$, mit der mittleren Doppelbesetzung $d_{gem} = N^{-1} d\Omega_{gem}/dU$. Abbildung 4.9 zeigt m_{gem}^2 als Funktion von U für die binäre und die halbelliptische Unordnungsverteilung bei verschiedenen Δ . Der qualitative Verlauf ist einfach zu verstehen: Ist der Unterschied in

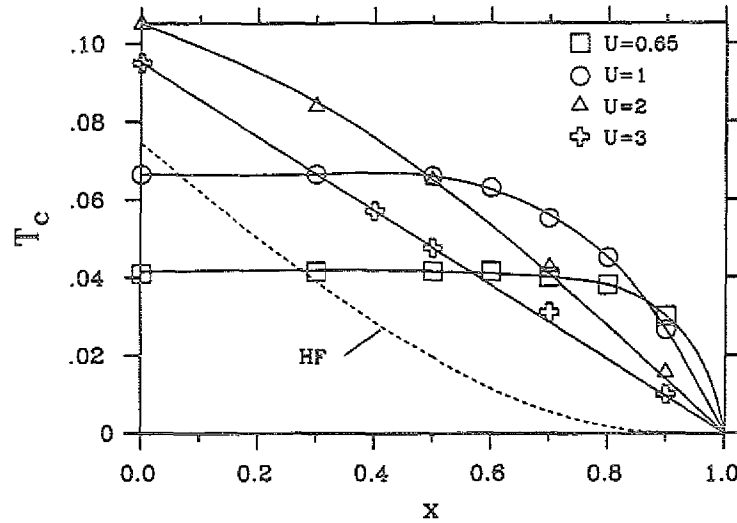


Abbildung 4.8: $T - x$ -Phasendiagramm für die Leerstellenunordnung mit verschiedenen Werten von U . Gestrichelte Kurve: Hartree-Fock-Ergebnis für $U=0.65$.

den Zufallspotentialen deutlich größer als U , können die Elektronen ihre Energie verringern, indem sie sich in den niedrigeren Potentialen sammeln. Dadurch wird d_{gem} erhöht, bzw. m_{gem} verringert. Dieser Effekt ist erwartungsgemäß besonders ausgeprägt für die binäre Verteilung. Bei $U = 0$ verschwindet m_{gem} für endliches Δ nicht, da die kinetische Energie dem entgegenwirkt. Für $U \gg \Delta$ sind die Gitterplätze praktisch einfach besetzt, weshalb m_{gem} nahezu den maximalen Wert eins erreicht. Die m_{gem}^2 -Kurven sind im wesentlichen um einen Wert Δ auf der U -Achse verschoben. Bei der binären Verteilung wird für $\Delta \approx U$ der Wert $m_{gem}^2 = 1/2$ des freien Elektronengases erreicht. Die halbelliptischen Verteilung zeigt ein qualitativ ähnliches Verhalten; die Steigung von $m_{gem}^2(U)$ ist flacher, da die Bildung von Doppelbesetzungen durch diesen Typ von Unordnung nicht ganz so stark gefördert wird. Abbildung 4.10 zeigt schließlich den Einfluß der Leerstellenunordnung auf die Bildung lokaler magnetischer Momente. m_{gem}^2 ist hier normiert auf den Anteil $(1 - x)$ des für die Elektronen verbliebenen Gitters. Die zufällig verteilten Leerstellen fördern die Bildung lokaler Momente, oder anders ausgedrückt: Die Sättigung von m_{gem}^2 mit U setzt mit Unordnung deutlich eher ein als ohne. Der Grund liegt darin, daß durch die effektiv reduzierte Anzahl von Nachbarn die kinetische Energie verringert wird, und die elektronische Abstoßung U relativ an Gewicht gewinnt. Durch die Leerstellen werden also Doppelbesetzungen unterdrückt, d.h. m_{gem}^2 nimmt zu. Die Erhöhung von m_{gem}^2 wirkt der Unterdrückung von AFLRO durch die Unordnung entgegen. Das kann sie aber nur, wenn m_{gem}^2 nicht ohnehin schon gesättigt ist, d.h. nur im Fall kleiner U .

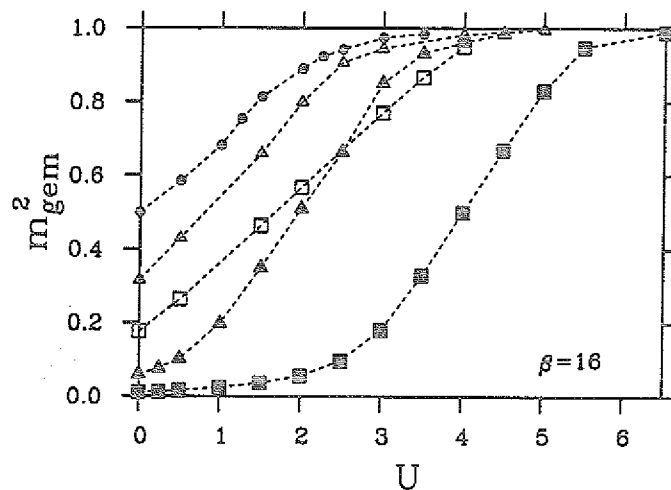


Abbildung 4.9: Quadrat der lokalen Magnetisierung m_{gem}^2 vs. U . Ohne Unordnung ($\circ$); binäre Unordnungsverteilung (volle Symbole) und halb-elliptische Verteilung (offene Symbole). Breite der Verteilungen: $\Delta = 2$ (Dreiecke) und $\Delta = 4$ (Quadrate).

4.6.3. Metall-Isolator-Übergänge

Wie wir gesehen haben, wird die AFLRO bei schwacher Kopplung durch die Unordnung zerstört, d.h. das System ist im Grundzustand ein Paramagnet. Ob es metallisch oder isolierend ist, hängt von der Art und der Stärke der Unordnung ab. Aus der CPA wissen wir, daß in $d = \infty$ und für $U = 0$ das System nur dann isolierend werden kann, wenn das Spektrum der Zufallspotentiale nicht einfach verbunden ist. Wie oben bereits erwähnt tritt im Fall der binären Verteilung ein Metall-Isolator-Übergang (MIÜ) durch Bandaufspaltung für einen Wert $\Delta = 1$ auf. Bei der halbelliptischen und der konstanten Verteilung bleibt das System bei $U = 0$ stets metallisch.

Wir werden im folgenden zwei verschiedene Kriterien verwenden, um den isolierenden vom metallischen Zustand zu unterscheiden. Die *thermodynamische* Definition eines Isolators ist das Verschwinden der elektronischen Kompressibilität κ_{gem} . Diese mißt die Änderung der Elektronendichte bei Änderung des chemischen Potentials, etwa durch Anlegen einer äußeren Spannung. κ_{gem} ist nur im Grundzustand identisch null, bei endlichen Temperaturen ist sie exponentiell klein. Die *spektrale* Definition eines Isolators ist das Verschwinden der elektronischen Zustandsdichte an der Fermikante $N(E_F)$ (unter der Voraussetzung, daß keine lokalisierten Zustände vorliegen). Im Bild unabhängiger Elektronen gilt im Grundzustand: $\kappa_{gem} = N(E_F)$, d.h. beide Definitionen sind äquivalent. In wechselwirkenden Systemen ist dies nicht mehr notwendig der Fall.

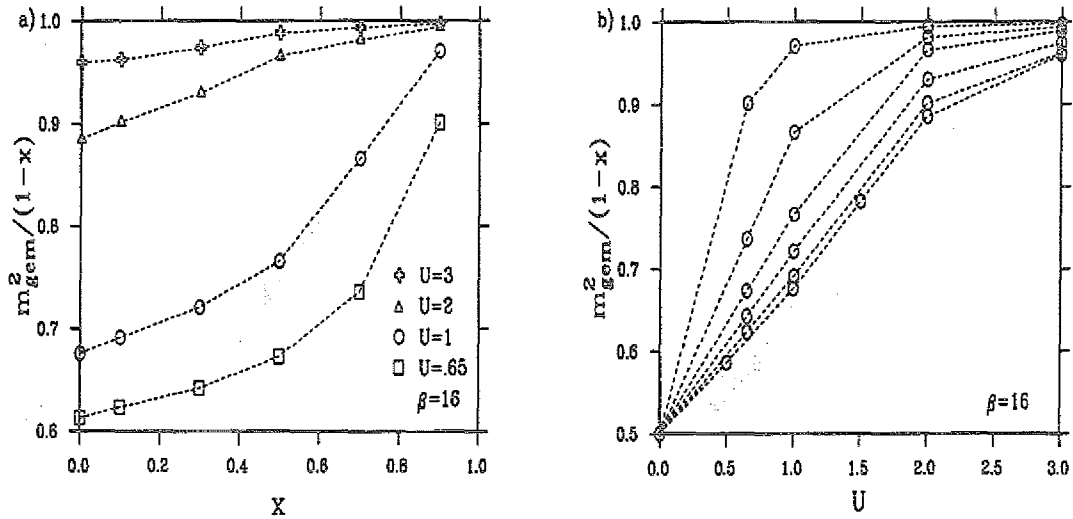


Abbildung 4.10: m_{gem}^2 für die Leerstellenunordnung. a) als Funktion der Konzentration x für verschiedene U . b) dieselben Daten aufgetragen über U mit $x=0,0.1,0.3,\dots,0.9$ (von unten nach oben).

Zunächst untersuchen wir den Einfluß der Wechselwirkung auf κ_{gem} im Fall der binären Unordnungsverteilung in der paramagnetischen Phase (Abbildung 4.11a [Jan94]). Der Einfluß der antiferromagnetischen Ordnung wird im folgenden Abschnitt studiert. Für $\Delta > 1$ zeigen die Kurven den folgenden Verlauf: Bei $U = 0$ ist κ_{gem} nahe bei null, es bleibt zunächst sehr klein, wächst dann deutlich an bis zu einem Maximalwert bei $U \approx \Delta$ und fällt wieder bis auf einen (exponentiell) kleinen Wert. Die Pfeile deuten den Wert $U_c^{AF}(\Delta)$ an, bei dem für die gegebene Temperatur AFLRO einsetzt.

Bei $U = 0$ sind die Elektronen im wesentlichen in den niedrigeren Potentialen gebunden; die kinetische Energie vermag sie nicht zu delokalisieren. Mit wachsendem U werden die Elektronenpaare voneinander getrennt und dadurch weniger lokalisiert. Bei einem kritischen Wert $U_c^{MI,1}$ wird ein makroskopischer Anteil der Elektronen ausgedehnt, und das System wird metallisch. Es kann hierbei nicht mit Sicherheit ausgeschlossen werden, daß $U_c^{MI,1} = 0$ gilt. Dies ist aber nicht zu erwarten, wenn man sich die Physik im Bänderschema anschaut: Bei $U = 0$ haben wir zwei getrennte Bänder, deren Form durch die Wechselwirkung verändert wird. Ihre Bandkanten werden sich annähern, bis sie bei $U_c^{MI,1}$ an der Fermikante überlappen und eine endliche Zustandsdichte ergeben. Wäre $U_c^{MI,1} = 0$, so müßten die vorher algebraischen Bandkanten exponentielle Schwänze ausbilden. Dies kann numerisch natürlich nicht ausgeschlossen werden. In diesem ungeordneten System vermag also die Wechselwirkung das metallische Verhalten zu verbessern, und sogar einen Übergang vom Isolator zum Metall zu induzieren.

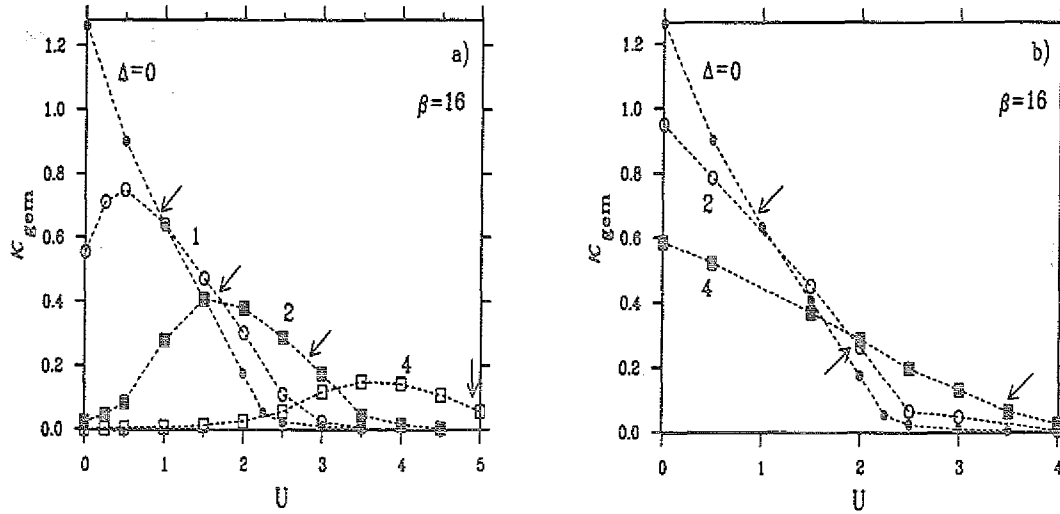


Abbildung 4.11: Kompressibilität κ_{gem} vs. U für die binäre (a) und die halb-elliptische Unordnungsverteilung (b) mit verschiedenen Werten von Δ .

Der Transfer von Zuständen in die ehemalige Bandlücke und damit die Erhöhung von κ_{gem} hört auf, wenn U etwa den Wert Δ erreicht. Für noch größere U werden die durch U transferrierten Zustände über die Fermikante hinaus erzeugt, und κ_{gem} verringert sich von nun an. Für einen kritischen Wert $U_c^{MI,2}$ geschieht ein zweiter Übergang und das System wird wieder isolierend. Hier ist die Doppelbesetzung stark unterdrückt, und die Wechselwirkung zerstört die Beweglichkeit der Elektronen.

Im Fall der kontinuierlichen Unordnungsverteilung gibt es keine Bandspaltung bei $U = 0$, und κ_{gem} verhält sich qualitativ wie im System ohne Unordnung (Abbildung 4.11b). Es fällt zunächst linear mit U bis zu einem sehr kleinen Wert ab, erreicht den Wert null aber wegen der endlichen Temperatur erst im Limes $U \rightarrow \infty$. Die Kurven verlaufen hier mit Unordnung flacher als ohne, da κ_{gem} für $U = 0$ mit Δ kontinuierlich abnimmt, und der MIÜ sich mit Unordnung zu größere Werten von U verschiebt. Deshalb müssen sich die Kurven schneiden, was bedeutet, daß bei festem Wert von U auch hier die Unordnung das metallische Verhalten unterstützen kann.

Es sei noch bemerkt, daß im Fall ohne Unordnung eine lineare Extrapolation der κ_{gem} -Werte auf einen MIÜ bei $U_c^{MI} \approx 2.5$ schließen lassen. Dieser Wert entspricht in etwa den Ergebnissen anderer Gruppen, die mittels Störungstheorie[Zha93], selbstkonsistenter Diagonalisierung[Zha93, Geo93] und analytischer Fortsetzung der QMC-Ergebnisse[Jar92] gewonnen wurden. C. Gros et al. ermittelten aus Cluster-Rechnungen sowie aus der Lösung selbstkonsistenter Bewegungsgleichungen [Gro94] für den Grundzustand ebenfalls einen kritischen Wert von 2.5.

4.6.4. Metallisches Verhalten in der Nähe des magnetischen Übergangs

Im folgenden soll das metallische Verhalten in der Nähe des AF-Phasenüberganges untersucht werden. Abbildung 4.11a macht deutlich, daß der durch Unordnung induzierte Metall-Isolator-Übergang deutlich vor dem Einsetzen von AFLRO eintritt. Der Grund liegt in der Abwesenheit von lokalen magnetischen Momenten in der Isolatorphase. Auf der anderen Seite scheint der zweite MIÜ bei deutlich größeren Werten $U_c^{MI,2}$ als der AF-Übergang stattzufinden. In der Nähe von U_c^{AF} befindet sich das System also noch tief in der metallischen Phase. Hier stellt sich die Frage, was an dem AF-Übergang geschieht. Springt hier – im Grundzustand – die Kompressibilität diskontinuierlich auf null, oder liegt in der Nähe von U_c^{AF} ein antiferromagnetisches Metall vor? Dazu untersuchen wir zunächst den Einfluß der AFLRO auf κ_{gem} . Abbildung 4.12a zeigt, wie sich κ_{gem} durch die AFLRO ändert. Während im Fall $\Delta = 0$ die AFLRO κ_{gem} drastisch reduziert, hat sie im ungeordneten Fall (binäre Verteilung mit $\Delta = 2$) fast keinen meßbaren Effekt. Die kontinuierliche Unordnungsverteilung weist ein ähnliches Verhalten auf (Abbildung 4.12b). Die Unordnung stabilisiert also das metallische Verhalten auch im antiferromagnetisch geordneten System. Diese Ergebnisse lassen vermuten, daß das ungeordnete System in der

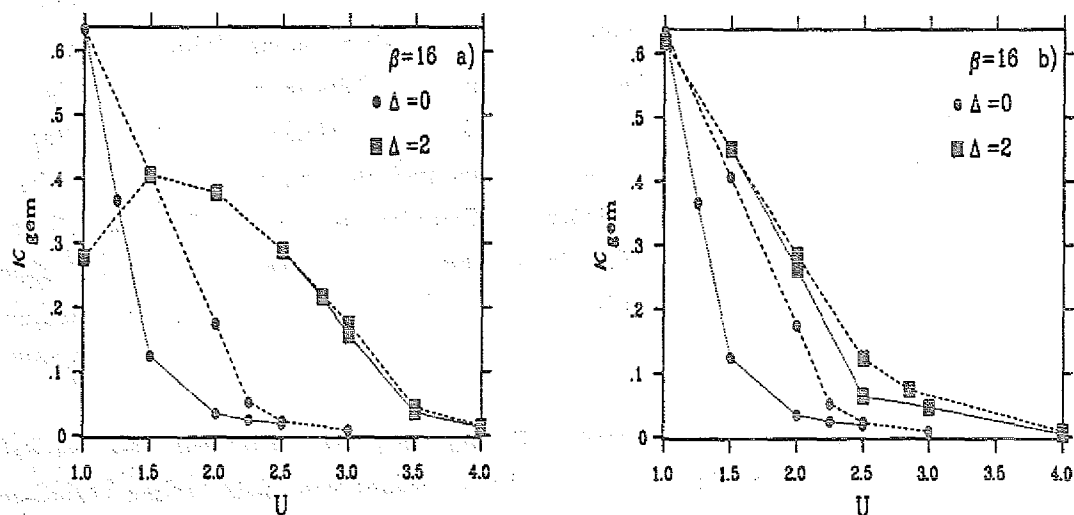


Abbildung 4.12: κ_{gem} vs. U in der paramagnetischen (gestrichelt) und in der antiferromagnetischen (gepunktet) Phase für die binäre (a) und die halb-elliptische Unordnungsverteilung (b).

Umgebung von U_c^{AF} ein *antiferromagnetisches Metall* ist. Jedoch ist dieser Schluß nicht zwingend, da wir bei endlichen Temperaturen rechnen müssen, bei denen es schwierig ist, eine sehr kleine Bandlücke nachzuweisen. Untersuchungen bei tieferen Temperaturen sind

daher erforderlich. Um zunächst einmal zu verstehen, wie sich die Bildung eines Isolators in den untersuchten Größen widerspiegelt, betrachten wir die Kompressibilität, aufgelöst nach Matsubarafrequenzen:

$$\kappa_n \equiv \sum_a \operatorname{Re} \left(\frac{\partial G_{an}}{\partial \mu} \right). \quad (4.57)$$

Die Summe über die Matsubarafrequenzen liefert die Kompressibilität $\kappa_{gem} = T \sum_n \kappa_n$. Abbildung 4.13 zeigt κ_n mit und ohne Unordnung bei einer inversen Temperatur von $\beta = 64$. Die Werte von U wurden jeweils zwischen U_c^{AF} und kritischen Wert $U_c^{MI,2}$ der paramagnetischen Phase gewählt. Wieder ist es das Verhalten bei kleinen Matsubarafrequenzen, das den Übergang, nämlich die Entwicklung des Isolators, anzeigt. Bei großen $|\omega_n|$ fällt κ_n wie $1/\omega_n^2$ ab, und erreicht im paramagnetischen – d.h. im metallischen – Fall ein Maximum bei $n = 0$. Alle Werte sind positiv, die Fläche unter κ_n daher auch. Mit dem Einsetzen von AFLRO werden im Fall $\Delta = 0$ die Werte um $n = 0$ stark negativ, wodurch die Summe κ_{gem} sehr klein wird, für $T = 0$ würde κ_{gem} verschwinden. Bei der binären Unordnungsverteilung ($\Delta = 0$) sind die κ_n -Kurven in beiden Lösungen bis $\beta = 40$ fast ununterscheidbar. Erst bei noch tieferen Temperaturen tritt in der AF-Lösung ein erster negativer Wert bei $n = 0$ auf. Da $\omega_0 = \pi T$ gilt, wird deutlich, daß dieser Effekt erst bei sehr tiefen Temperaturen beobachtet werden kann. Die Fläche unter den Kurven und damit die Kompressibilität ändert sich durch diesen einen Wert kaum. Um zu entscheiden, ob sich hier nun doch eine Bandlücke öffnet, oder es sich etwa um ein Halbmetall mit verschwindender Zustandsdichte an der Fermikante handelt, müßte man noch deutlich tiefere Temperaturen erreichen, die außerhalb der Möglichkeiten der Monte-Carlo-Technik liegen. Die Entwicklung der isolierenden Phase spiegelt sich auch in der gemittelten Einteilchen-Greenfunktion $G_n \equiv (G_{An} + G_{Bn})/2$ wieder. Im Grundzustand ist der Imaginärteil von G_0 gleich der Zustandsdichte an der Fermikante; bei endlichen Temperaturen gilt diese Beziehung nicht, doch kann man versuchen aus den Werten bei endlichen Temperaturen, bzw. bei endlichen Matsubarafrequenzen, das Verhalten im Grundzustand zu extrapolieren.

$\operatorname{Im}(G_n)$ ist in Abbildung 4.14 für dieselben Parameter wie oben aufgetragen. Im Fall ohne Unordnung erkennt man wieder deutlich den Übergang vom metallischen Verhalten ($\operatorname{Im}(G_n) \rightarrow \text{const.}$) im Paramagneten zum isolierenden Antiferromagneten ($\operatorname{Im}(G_n) \rightarrow 0$). Mit Unordnung ist bis zu inversen Temperaturen von $\beta = 40$ kein Unterschied zwischen den beiden Lösungen erkennbar. Für $\beta = 64$ zeigt schließlich der Wert bei der kleinsten Frequenz, ω_0 , eine Änderung im Monotonieverhalten. Damit $\operatorname{Im}(G_0)$ im Grundzustand verschwindet, müßte die Kurve zu $\omega \rightarrow 0$ sehr steil abfallen. Dies kann wiederum mit der MC-Technik nicht abschließend geklärt werden.

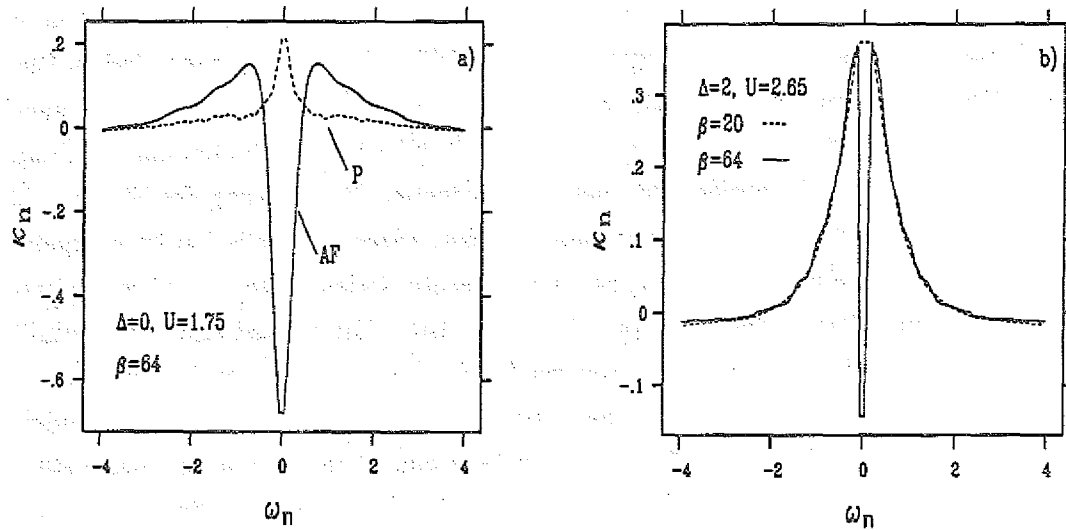


Abbildung 4.13: a) κ_n in der paramagnetischen und in der antiferromagnetischen Phase ohne Unordnung. b) κ_n in der antiferromagnetischen Phase der binären Unordnung für zwei verschiedene Temperaturen.

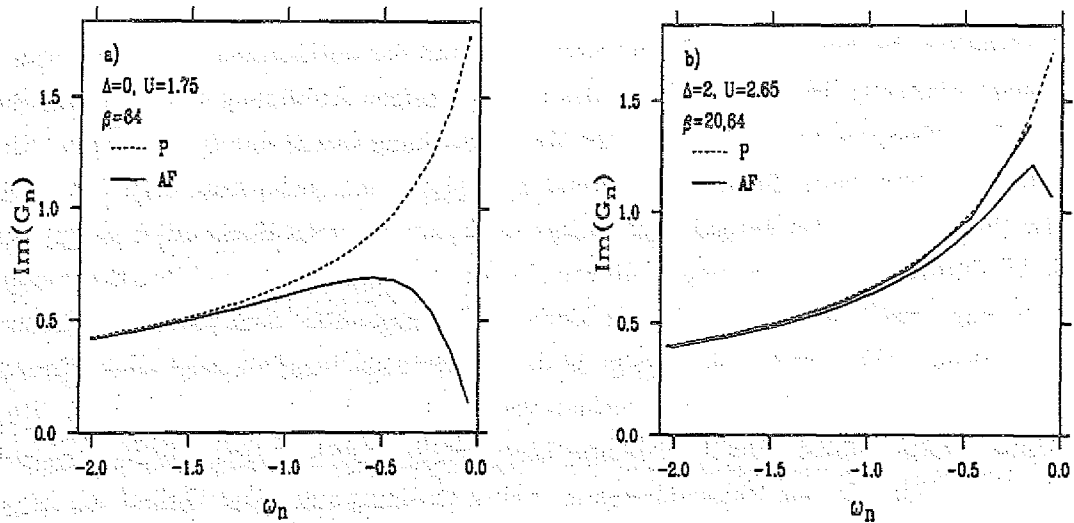


Abbildung 4.14: Imaginärteil der gemittelten Einteilchen-Greenfunktion G_n . Dieselben Parameter wie in Abbildung 4.13.

4.7. Metamagnetismus im Hubbardmodell

In diesem Abschnitt betrachten wir das reine Hubbardmodell, d.h. in Abwesenheit von Unordnung, in einem äußeren (homogenen) Magnetfeld h . In der paramagnetischen Phase ist die Magnetisierungskurve, $M(h)$, in $d = \infty$ von verschiedenen Gruppen untersucht worden [Geo93, Sas94, Zha93]. Gieseke und Brandt [Gie94] betrachteten darüber hinaus den Einfluß von h auf die antiferromagnetische Ordnung. Die Richtung des Magnetfeldes wurde dabei senkrecht zur AF-Orientierung gewählt. Diese Konstellation ist energetisch günstiger als die parallele Orientierung, da bei senkrechter Orientierung die Magnetisierung kontinuierlich in Richtung des Feldes gedreht werden kann. Die magnetische Suszeptibilität ist hier bis zur Sättigung unabhängig von der Stärke des Magnetfeldes. Dennoch ist eine zum Feld h parallele AF-Orientierung dann von Bedeutung, wenn bei einer vorhandenen Spin-Bahn-Kopplung durch eine Kristallanisotropie eine Orientierung der magnetischen Momente ausgezeichnet ist. In solchen uniaxialen Antiferromagneten findet man interessante Übergänge vom Antiferromagneten zum Ferromagneten, sog. „metamagnetische“ Übergänge (z.B. [Jac67]).

Um einen solchen Übergang im Rahmen des Hubbardmodells in $d = \infty$ zu studieren, müssen, wie in Abschnitt 4.5 erwähnt, auf beiden Untergittern die Greenfunktionen und Selbstenergien spinabhängig berechnet werden. Das Feld h wirkt bei paralleler Orientierung wie ein spinabhängiges chemisches Potential ($\sim \sigma h \hat{n}_\sigma$). Im folgenden sollen einige Ergebnisse zum Metamagnetismus dargestellt werden; eine detaillierte Darstellung wird in [Hel94] gegeben.

Das Verhalten der homogenen Magnetisierung M und der antiferromagnetischen Untergittermagnetisierung M_{AF} als Funktion des Feldes h zeigen Abbildung 4.15 und 4.16 für verschiedene Temperaturen. Der Wert der Wechselwirkung wurde mit $U = 2$ so gewählt, daß die Néel-Temperatur für $h = 0$ maximal wird ($T_N \approx 0.1$, siehe Abb. 4.4). Oberhalb von T_N (bei $\beta = 8$) ist das Verhalten paramagnetisch, d.h. M steigt linear mit h an; es liegt keine AF-Ordnung vor. Etwas unterhalb von T_N (bei $\beta = 12$) wird M und ihre Steigung, die ferromagnetische Suszeptibilität, für kleine Felder gegenüber dem paramagnetischen Fall unterdrückt. Ab etwa $h = 0.05$ steigt M dann stärker als linear an, zeigt einen Sprung in der Ableitung bei $h = h_c$ (etwas unterhalb von $h = 0.1$) und wächst dann linear mit h . Die Untergittermagnetisierung M_{AF} nimmt kontinuierlich mit h ab und verschwindet bei $h = h_c$. Hier findet also ein Phasenübergang zweiter Ordnung statt. Der Verlauf von M_{AF} vs. h ist in der Nähe des Übergangs konsistent mit einem kritischen Exponenten von $1/2$ (siehe Abb. 4.16). Zwischen $h = 0$ und $h = h_c$ liegt eine antiferromagnetische Ordnung mit einer endlichen Nettomagnetisierung, ein sog. *Ferrimagnet*, vor. Bei $\beta = 1/64$ findet man ein anderes Verhalten: bis zu einem kritischen Wert $\tilde{h}_c$ vermag das Magnetfeld das System

Abbildung 4.15:

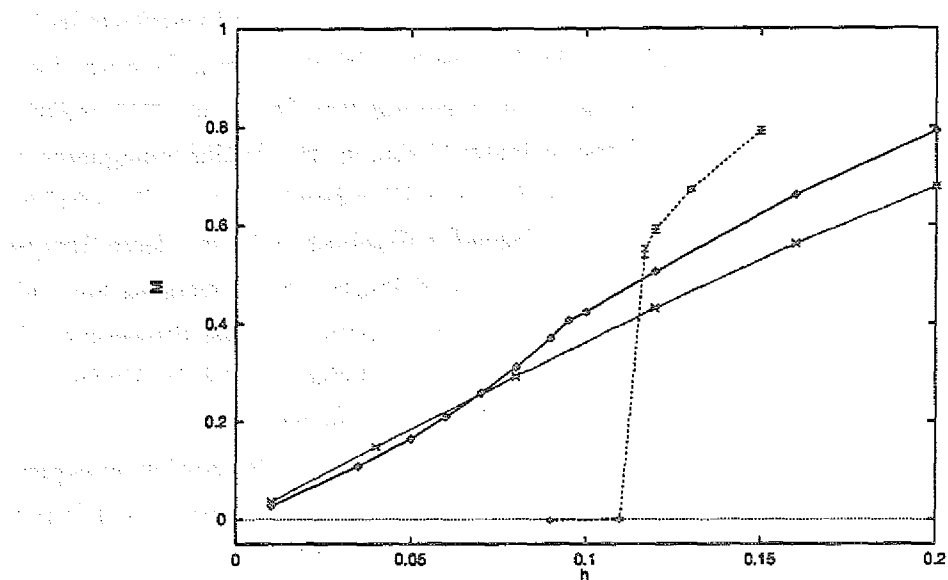


Abbildung 4.15: M vs. h für $U = 2$ und $\beta = 8$ (gepunktet), $\beta = 12$ (durchgezogen) und $\beta = 64$ (gestrichelt).

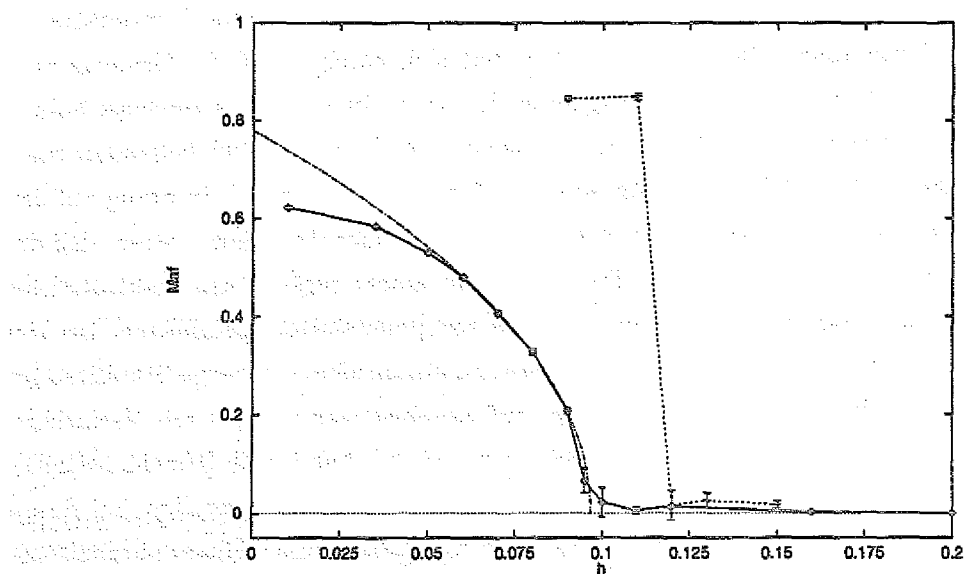


Abbildung 4.16: M_{AF} vs. h für $U = 2$ und $\beta = 12$ (durchgezogen) und $\beta = 64$ (gestrichelt). Strichpunktierter: Wurzel-Fit durch die ersten fünf Punkte unterhalb $h = 0.1$, extrapolierte Übergang bei $h_c = 0.097$.

nicht zu polarisieren. Bei $\tilde{h}_c$ springt M auf einen endlich Wert von ungefähr 0.55 und steigt dann in etwa linear. Umgekehrt bleibt M_{AF} bis $\tilde{h}_c$ konstant und verschwindet dann diskontinuierlich. Zusammenfassend zeigt das Hubbardmodell im äußeren Feld also bei hohen Temperaturen einen Phasenübergang zweiter Ordnung vom Ferri- zum Ferromagneten und bei tiefen Temperaturen einen Übergang erster Ordnung vom Antiferromagneten zum Ferromagneten. Das Einsetzen des diskontinuierlichen Übergangs definiert die trikritische Temperatur T_t . Sie kann mit den bislang vorliegenden Ergebnissen im mittleren Temperaturbereich wegen recht großer statistischer Fehler und langsamer Konvergenz noch nicht sicher bestimmt werden. Bei $\beta = 44$ gibt es allerdings bereits deutliche Hinweise auf Hysterese, d.h. einen Übergang erster Ordnung. Es sei noch bemerkt, daß der Übergang im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung stets von erster Ordnung ist.

Ein ähnliches Verhalten wie hier wird auch experimentell in uniaxialen Antiferromagneten, z.B. $FeCl_2$ [Jac67], beobachtet. $FeCl_2$ besitzt eine Schichtstruktur, und die antiferromagnetisch geordneten Momente stehen senkrecht auf den Schichten. Das äußere Feld wurde in den Messungen parallel zu den Momenten angelegt. Zwischen der Néel-Temperatur von $T_N = 23.5K$ und T_t wird ein kontinuierlicher, unterhalb von T_t ein diskontinuierlicher Übergang gefunden. Für T_t wurde eine obere Schranke von etwa $20K$ ermittelt.

4.8. Das fcc-Gitter in unendlichen Dimensionen

Das Hubbardmodell wurde ursprünglich u.a. zur Beschreibung des Band-Ferromagnetismus der 3-d-Übergangsmetalle eingeführt. Nun hat sich gezeigt, daß die Tendenz zum Antiferromagneten wesentlich stärker ausgeprägt ist. Dies gilt allerdings zunächst einmal nur für den Fall paarer Gitter, in denen das Hubbardmodell für gewöhnlich behandelt wird, und in der Nähe der halben Bandfüllung. Ein wichtiges exaktes Ergebnis in bezug auf den Ferromagnetismus ist das Theorem von Nagaoka [Nag66]. Nagaoka konnte zeigen, daß der Grundzustand für $U \rightarrow \infty$ im halbgefüllten Band mit einem zusätzlichen Elektron¹⁰ für die üblichen Gittertypen (sc, bcc, fcc und hcp) ein voll polarisierter Ferromagnet ist. Um die thermodynamische Relevanz dieses Ergebnisses zu überprüfen, wurde die Stabilität des Nagaoka-Zustandes bei endlichen Dotierungen auf verschiedenen Gittern mit Variationsverfahren untersucht. Einen Überblick über diese Untersuchungen geben z.B. [Hirs94, MHa91]. Damit konnten obere Schranken für die Elektronendichten angegeben werden, bei denen der Nagaoka-Zustand stabil ist. Besondere Stabilität findet man im fcc-Gitter oberhalb der halben Bandfüllung. Hier bleibt der Nagaoka-Zustand im Rahmen der Variationsrechnungen auch im Limes hoher Dimensionen stabil, während er beim einfach kubischen Gitter wegen der divergierenden Bandkanten instabil ist. Die freie Zustandsdichte des fcc-Gitters

¹⁰Bei paarigen Gittern gilt dies auch für ein Loch im sonst halbgefüllten Band. Beim fcc- und hcp-Gitter ist dagegen der Nagaoka-Zustand mit einem Loch instabil (Hüpfparameter $t > 0$ vorausgesetzt).

in $d \rightarrow \infty$ ist dagegen nach oben beschränkt und hat die explizite Form [MHa89]:

$$N_{fcc}(E) = e^{-(1-\sqrt{2E})/2} / \sqrt{\pi(1-\sqrt{2E})} \quad (4.58)$$

mit der Skalierung $t_{fcc} = 1/\sqrt{2d(d-1)}$. Die Neigung des fcc-Gitters zum Ferromagnetismus wird sich bei endlichen U wohl nicht in einem vollpolarisierten Zustand niederschlagen, weshalb allgemein ferromagnetische Instabilitäten untersucht werden sollen. Die Struktur des Gitters geht in den in Abschnitt 4.5 beschriebenen Formalismus zur Behandlung des Limes hoher Dimensionen nur über die freie Zustandsdichte $N(E)$ ein. Im allgemeinen, so auch beim fcc-Gitter, werden die Integrationen über $N(E)$ bei der Bestimmung von Ein- und Zweiteilchengrößen (siehe Anhang B) numerisch durchgeführt. Der zusätzliche numerische Aufwand ist im Vergleich zur eigentlichen Monte-Carlo-Simulation unwesentlich. Es wurde die Stabilität der paramagnetischen Phase des fcc-Gitters gegen Ferromagnetismus bei einer Elektronendichte um $n \approx 1.15^{11}$ für $U \leq 3.5$ untersucht. Abbildung 4.17 zeigt die inverse ferromagnetische Suszeptibilität χ_F^{-1} als Funktion der Temperatur, berechnet aus der vollständigen Summation über die Hilfsfeld-Konfigurationen. Es zeigt sich zwar zunächst ein deutliches Signal, d.h. ein starkes Anwachsen von χ_F^{-1} mit sinkender Temperatur, jedoch flacht χ_F^{-1} bei tiefen Temperaturen wieder ab bzw. erreicht sogar ein Minimum. Eine ferromagnetische Instabilität ist in diesem Parameterbereich mittlerer Werte von U daher auch bei tieferen Temperaturen nicht zu erwarten.

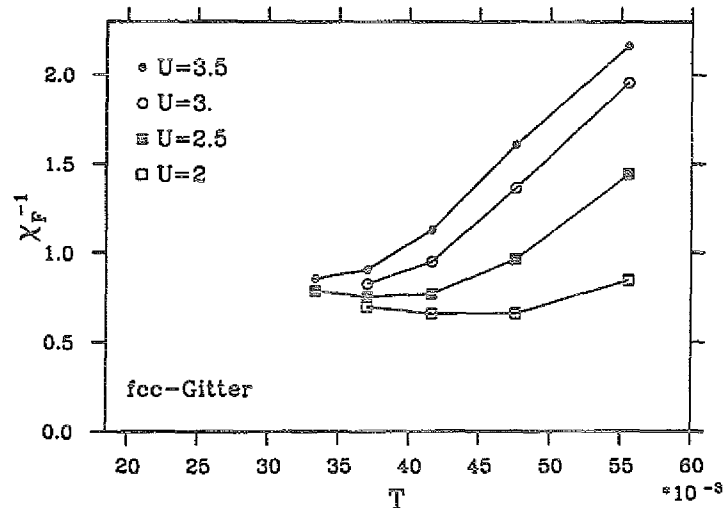


Abbildung 4.17: χ_F^{-1} vs. T für das fcc-Gitter bei verschiedenen Werten von U . Elektronendichte $n = 1.15$.

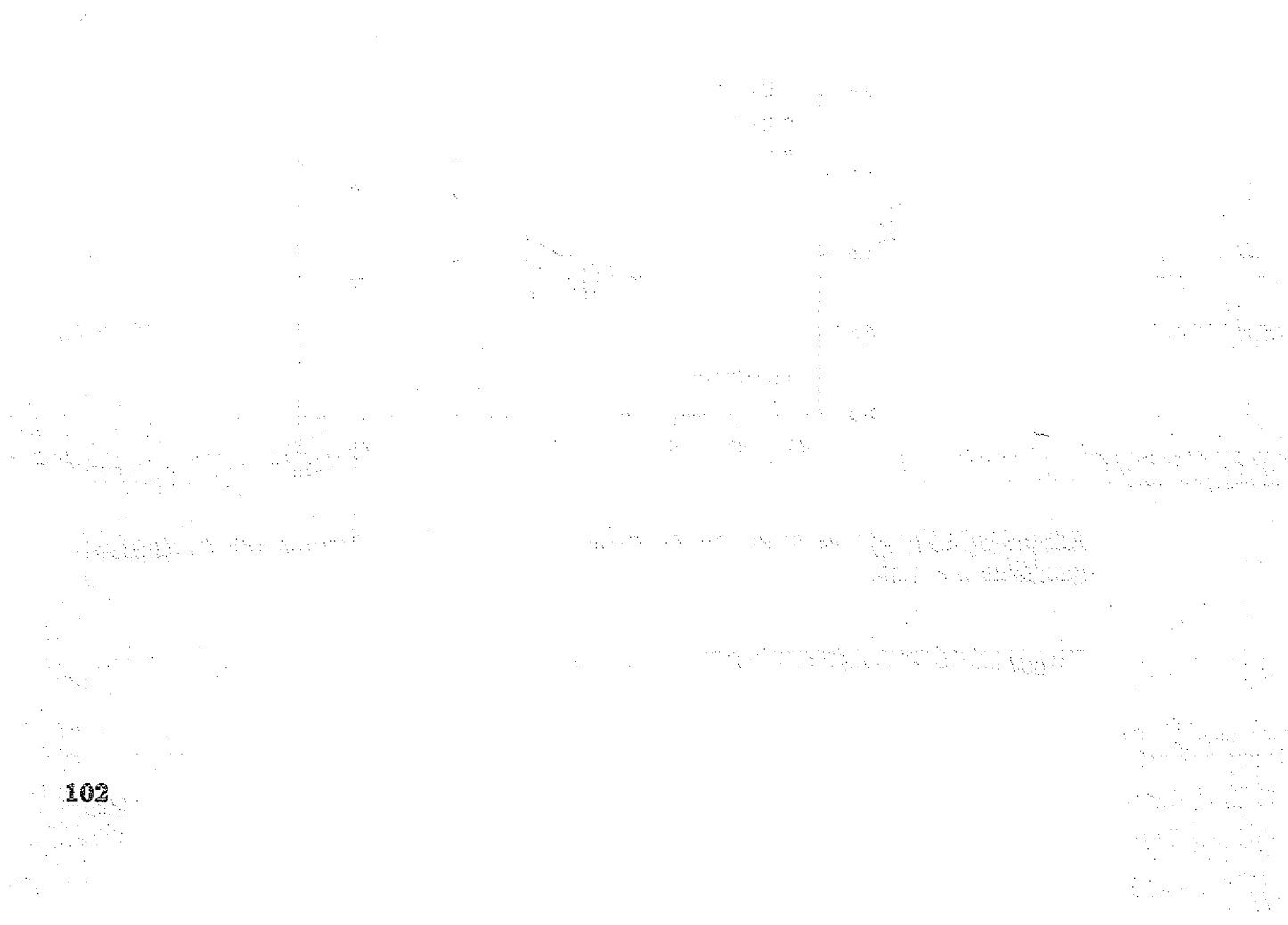
¹¹Hier war das ferromagnetische Signal am ausgeprägtesten.

KAPITEL 4. LIMES HOHER DIMENSIONEN

Abbildung 4.1: Ein Diagramm, das die Beziehung zwischen Dimensionen und Limes zeigt.

Abbildung 4.2: Ein Diagramm, das die Beziehung zwischen Dimensionen und Limes zeigt.

Abbildung 4.3: Ein Diagramm, das die Beziehung zwischen Dimensionen und Limes zeigt.



5. ZUSAMMENFASSUNG

In den vorangegangenen Kapiteln wurden Modelle korrelierter Elektronen mit verschiedenen Methoden behandelt. Der Schwerpunkt lag in der Untersuchung von Phasenübergängen, die durch die elektronische Wechselwirkung, durch Kopplung an äußere Freiheitsgrade oder durch Unordnung induziert werden. Im folgenden sollen die wesentlichen Ergebnisse zusammengefaßt werden.

5.1. Zu den Methoden

Es wurden drei Methoden zur Behandlung von Systemen korrelierter Elektronen angewandt. Erstens die Untersuchung endlicher Systeme durch das großkanonische Quanten-Monte-Carlo-Verfahren (GQMC), zweitens die Hartree-Fock-Näherung ohne und mit Symmetriebrechung und schließlich der Limes hoher Dimensionen.

Eine effiziente und numerisch stabile Anwendung der GQMC-Methode wurde in Kapitel 2 dargestellt. Sie erlaubt bei den heutigen Rechnerleistungen das Studium von Systemgrößen mit etwa 100 Gitterplätzen, was deutlich über die Möglichkeiten exakter Diagonalisierung (weniger als 20 Elektronen) hinausgeht. Die Anwendung der Monte-Carlo-Simulation für fermionische Systeme ist in erster Linie durch das Vorzeichenproblem beschränkt (siehe Kapitel 2). Eine Idee zur Minderung dieses Problems durch die Ausnutzung des Diskretisierungsfehlers in imaginärer Zeit lieferte keine Verbesserung. Die Resultate von Monte-Carlo-Simulationen sind naturgemäß nur bis auf statistische Fehler exakt. Ferner arbeiten sie bei „imaginären“ Zeiten, weshalb die Berechnung dynamischer Größen erhebliche Schwierigkeiten bereitet. Aus diesem Grund ist die GQMC-Methode in erster Linie als ein Verfahren zur Bestimmung thermodynamischer Eigenschaften fermionischer Systeme zu betrachten. Der GQMC-Algorithmus ist auf das Zwei-Niveau-Modell (Kapitel 3) erweitert worden, wobei die Zwei-Niveau-Systeme im Gegensatz zu den Elektronen mit einem Weltlinienverfahren behandelt werden. Hier konnte bei halber Bandfüllung in Abwesenheit der Coulombwechselwirkung der Phasenübergang zur A-B-Ladungsdichtewelle bestimmt werden (dazu unten mehr).

Die Hartree-Fock-Näherung (HFN) stellt eine Einteilchennäherung dar, in dem Sinne, daß jedes Elektron nur die mittlere Dichte der anderen Elektronen „spürt“. Sie ist gerechtfertigt bei geringen Elektronen- oder Lochdichten sowie bei schwacher Wechselwirkung.

Selbst im Rahmen der stark vereinfachenden HFN kann das Hubbardmodell oder seine Erweiterungen nicht allgemein analytisch gelöst werden. Es müssen vielmehr Annahmen über die Symmetrien der relevanten Phasen gemacht werden. Die HFN wurde angewandt auf das Zwei-Niveau-Modell (Kapitel 2) für die A-B-Ladungsdichtewelle, sowie für den Antiferromagnetismus im Hubbardmodell mit Leerstellenunordnung im Limes hoher Dimensionen (Anhang C).

Der Limes hoher Dimensionen $d \rightarrow \infty$ liefert ebenfalls eine „mean field“-artige Näherung. Das System wird auf ein selbstkonsistentes lokales Problem abgebildet, wobei hier im Gegensatz zur HFN die Wechselwirkung (genauer: die Selbstenergie) *dynamisch* bleibt, d.h. es liegen unendlich viele gekoppelte quantenmechanische Freiheitsgrade, charakterisiert durch die Matsubarafrequenzen, vor. Das dynamische lokale Problem wird, um weitere Näherungen zu vermeiden, wieder mit einem Monte-Carlo-Verfahren gelöst. Die Anwendung des Limes hoher Dimensionen auf fermionische Systeme hat in den letzten Jahren zu einer Fülle von Arbeiten auf diesem Gebiet geführt. In dieser Arbeit wurde in erster Linie das Hubbardmodell mit Unordnung, das sog. Anderson-Hubbardmodell, in $d \rightarrow \infty$ untersucht (Kapitel 4). Weiter wurde der Limes hoher Dimensionen auf das Hubbardmodell im äußeren Magnetfeld sowie auf dem fcc-Gitter angewandt.

5.2. Zu den Zwei-Niveau-Systemen

Sowohl die HFN, als auch die GQMC-Simulation zeigte, daß die Zwei-Niveau-Systeme (TLS) in bestimmten Parameterbereichen des Modells eine effektive lokale elektronische Anziehung vermitteln können. Diese wird dann besonders effektiv, wenn die TLS-Energien Ω und die TLS-Elektron-Kopplung g von gleicher Größenordnung sind, und wenn der Anteil elastischer Streuung der Elektronen an den TLS überwiegt. Bei halber Bandfüllung kann diese Anziehung zur Ausbildung einer A-B-Ladungsdichtewelle (LDW) führen. Im Rahmen der HFN wurde der Übergang zur LDW-Phase für verschiedene Werte der Modellparameter bestimmt. Dabei traten Phasenübergänge erster und zweiter Ordnung auf. Im letzteren Fall konnte ein Ausdruck für die effektive lokale Anziehung der Elektronen gefunden werden, die in Konkurrenz zur Hubbard-Wechselwirkung steht. Für einen festen Parametersatz konnte mit der GQMC-Methode durch „finite-size“-Analyse ein Phasenübergang zweiter Ordnung zur A-B-Ladungsdichtewelle bestimmt werden. Die Übergangstemperatur liegt etwa um einen Faktor 7 unterhalb des HF-Ergebnisses. Die Anwendung des Limes hoher Dimensionen auf das TLS-Modell lieferte eine kritische Temperatur von der gleichen Größenordnung wie die GQMC-Simulation. Diese Ergebnisse machen deutlich, daß die langreichweitige Ordnung im zweidimensionalen System vor allem durch quantenmechanische Fluktuationen und weniger durch die niedrige Dimensionalität unterdrückt wird.

Schließlich wurde der Einfluß der Hubbardwechselwirkung, der Dotierung sowie einer durch Hüpfterme zwischen übernächsten Nachbarn geänderten Bandstruktur auf das zweidimensionale System mit der GQMC-Methode qualitativ untersucht. Alle drei Effekte bewirkten erwartungsgemäß eine Unterdrückung der LDW-Struktur; eine Tendenz zur Ausbildung von inkommensurablen Strukturen konnte nicht beobachtet werden.

Als Gegenstand weiterer Untersuchungen bietet sich zunächst einmal der Limes hoher Dimensionen an, da hier mit bescheidenem Rechenaufwand relevante Ergebnisse erzielt werden können. Zum einen wäre die Untersuchung von Phasenübergängen erster Ordnung interessant, zum anderen der Effekt von Dotierung auf die LDW-Struktur sowie auf supraleitende Eigenschaften.

5.3. Zur Unordnung

Das Zusammenspiel von Wechselwirkung und Unordnung spielt eine wichtige Rolle in elektronischen Systemen. Es vereinigt allerdings auch zwei sehr komplexe und schwierig zu behandelnde Effekte. Bei der Behandlung endlicher Systeme tritt durch die Unordnung die zusätzliche Schwierigkeit auf, über die ungeordneten Konfigurationen zu mitteln. Darüber hinaus gibt es bei der Monte-Carlo-Simulation insbesondere im Fall der diagonalen Unordnung erhebliche Beschränkungen durch das Vorzeichenproblem. Aus diesen Gründen wurde das Hubbardmodell mit Unordnung ausschließlich im Limes hoher Dimensionen behandelt. Es wurde diagonale Unordnung mit diskreten und kontinuierlichen Verteilungen der lokalen Potentiale betrachtet. Von besonderem Interesse ist hier die Stabilität der antiferromagnetischen Phase bei halber Bandfüllung sowie Metall-Isolator-Übergänge. Als wichtiges und zunächst überraschendes Ergebnis stellte sich heraus, daß die Unordnung bei starker Wechselwirkung, U , die antiferromagnetische Ordnung stabilisieren kann. Dieser Effekt tritt vor allem bei der binären Unordnungsverteilung aber in abgeschwächter Form auch bei kontinuierlichen Verteilungen auf. Er kann durch eine im Mittel erhöhte antiferromagnetische Heisenberg-Kopplung zwischen benachbarten magnetischen Momenten erklärt werden. Die Leerstellen-Unordnung führt bei schwacher Wechselwirkung zu einer starken Erhöhung der lokalen magnetischen Momente und dadurch zu einer Stabilisierung der antiferromagnetischen Ordnung.

Im Fall der binären Unordnungsverteilung wurden zwei Metall-Isolator-Übergänge (MIÜ) gefunden. Der erste, bei kleinen U , ist unordnungsinduziert, der zweite, bei großen U , wechselwirkungsinduziert. Dazwischen liegt ein metallischer Bereich, in dem der Übergang zum Antiferromagneten geschieht. Es wurde beobachtet, daß die Unordnung das metallische Verhalten des Systems in der Nähe des magnetischen Übergangs deutlich fördert, so daß hier möglicherweise ein antiferromagnetisches Metall vorliegt. Diese Frage kann mit

der Monte-Carlo-Methode für den Grundzustand nicht abschließend beantwortet werden. Als konsequente Erweiterung des Modells bietet sich für die Zukunft die Einführung von zufallsverteilten Hüpfamplituden an. Weiter ist das Verhalten abseits der halben Bandfüllung sowie bei binärer Unordnungsverteilung mit unterschiedlichen Konzentrationen der Komponenten von Interesse, da diese Situationen eher einen Vergleich mit experimentellen Befunden erlaubt.

A. ZUR GRASSMANNDARSTELLUNG DER FERMIONISCHEN ZUSTANDSSUMME

Hier soll die Spurbildung über die fermionischen Freiheitsgrade (2.20) durchgeführt werden. Die Rechnung basiert auf der Grassmannndarstellung der Zustandssumme, wie sie z.B. in [Neg88] gegeben ist.

Sei U ein Produkt aus bilinearen „Zeitentwicklungsoperatoren“:

$$U = \prod_{l=1}^L U(l) \quad , \quad U(l) = e^{-\Delta\tau c^\dagger K(l) c} \quad (\text{A.1})$$

mit $\Delta\tau = \beta/L$. $c^\dagger$ und c können dabei allgemein als Vektoren aufgefaßt werden, z.B. mit den Gitterindizes $i = 1, \dots, N$; in diesem Fall ist $K(l)$ eine $N \times N$ -Matrix.

Die Form von U ist z.B. nach Trotter-Zerlegung und HS-Transformation in Kapitel 2.1 gegeben. Die Zustandssumme ist:

$$Z = \text{Sp } U = \int d\psi^* d\psi \langle \psi | U | -\psi \rangle \quad (\text{A.2})$$

Dabei sind ψ^* und ψ Grassmannvariablen. Durch Einschieben von $L-1$ Einheitsoperatoren:

$$I = \int d\psi_i^* d\psi_i e^{-\psi_i^* \psi_i} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (\text{A.3})$$

in (A.2) erhalten wir

$$Z = \int \prod_{l=1}^L d\psi_l^* d\psi_l e^{-\sum_l \psi_l^* \psi_l} \prod_{l=1}^L \langle \psi_l | U(l) | \psi_{l-1} \rangle \quad (\text{A.4})$$

mit $\psi_0 \equiv -\psi_L = -\psi$. Die Operatoren $U(l)$ sind bis in 1. Ordnung in $\Delta\tau$ normalgeordnet. Da durch die Trotter-Zerlegung bereits einen Fehler der Ordnung $\Delta\tau^2$ gemacht wurde, ändert sich die Ordnung des Fehlers nicht, wenn die $U(l)$ als normalgeordnet behandelt werden. Für normalgeordnete Operatoren kann das Skalarprodukt ausgeführt werden und wir erhalten:

$$\begin{aligned} Z \approx \bar{Z} &= \int \prod_{l=1}^L d\psi_l^* d\psi_l e^{-\sum_l \psi_l^* \psi_l} \prod_{l=1}^L e^{\psi_l^* \psi_{l-1}} e^{-\Delta\tau \psi_l^* K(l) \psi_{l-1}} \\ &= \int \prod_{l=1}^L d\psi_l^* d\psi_l \exp \left(-\sum_{ll'} \psi_l^* M_{ll'} \psi_{l'} \right) \\ &= \det M \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Die letzte Gleichung erhält man durch Diagonalisierung von M , siehe auch [Neg88]. Die $(NL) \times (NL)$ -Matrix M hat die Form.

$$M = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 & \cdots & B_L \\ -B_1 & I & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -B_2 & I & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -B_{L-1} & I \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

mit den $N \times N$ -Matrizen $B_l = I - \Delta\tau K(l)$. I ist dabei die $N \times N$ -Einheitsmatrix.

Damit wird die Zustandssumme

$$\tilde{Z} = \det M = \det \left[I + \prod_{l=1}^L (I - \Delta\tau K(l)) \right] \quad (\text{A.7})$$

Dies Ergebnis ist zwar korrekt im Limes $\Delta\tau \rightarrow 0$, aber es konvergiert sehr langsam. Im wechselwirkungsfreien Fall z.B. ist $K_l \equiv K$ für alle l und wir erhalten:

$$\tilde{Z}_0 = \det M = \det [I + (I - \Delta\tau K)^L] \quad (\text{A.8})$$

im Vergleich zum exakten Resultat: $Z_0 = \det [I + \exp(-\beta K)]$. Hat K die Eigenwerte $\epsilon_k - \mu$, so folgt für die Elektronendichte:

$$\rho \equiv \langle \hat{n} \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} \quad (\text{A.9})$$

$$\tilde{\rho}_0 = \sum_k \frac{(1 - \Delta\tau(\epsilon_k - \mu))^{-1}}{1 + (1 - \Delta\tau(\epsilon_k - \mu))^{-L}} \quad , \quad \rho_0 = \sum_k \frac{1}{1 + \exp(\beta(\epsilon_k - \mu))} \quad (\text{A.10})$$

D.h. selbst die Elektronendichte ist nur näherungsweise korrekt.

Nun wollen wir (A.1) als gegeben betrachten und $\Delta\tau$ als endliches Intervall ernstnehmen.

Wir schieben dazu in (A.3) noch einmal M Einheitsoperatoren ein und führen dann den Grenzwert $M \rightarrow \infty$ aus:

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{l=1}^L \prod_{m=1}^M d\psi_{lm}^* d\psi_{lm} e^{-\sum_{lm} \psi_{lm}^* \psi_{lm}} \prod_l \prod_m \langle \psi_{lm} | \tilde{U}(l) | \psi_{l,m-1} \rangle \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_l \prod_m d\psi_{lm}^* d\psi_{lm} \exp \left(- \sum_{ll'} \sum_{mm'} \psi_{lm}^* O_{ll'mm'}^{lm} \psi_{l'm'} \right) \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \det O \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

mit $\psi_{l,0} \equiv \psi_{l-1,M}$ für $l > 1$, $\psi_{1,0} \equiv -\psi_{L,M}$ und $\tilde{U}(l) = \exp(-\Delta\tau K(l)/M)$. O ist eine $(NLM) \times (NLM)$ -Matrix mit

$$O_{ll'mm'}^{lm} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} - \left(I - \frac{\Delta\tau}{M} K(l) \right) \delta_{ll'} \delta_{m,m'+1} \quad (\text{A.12})$$

O hat eine ähnliche Gestalt wie die Matrix M in (A.6), nur mit dem Unterschied, daß die $N \times N$ Matrizen $B_l' = I - \Delta\tau K(l)/M$ auf der Nebendiagonalen jeweils M -mal auftauchen. Damit wird

$$\det O = \det \left[I + \prod_{l=1}^L \left(I - \frac{\Delta\tau}{M} K(l) \right)^M \right] \quad (\text{A.13})$$

$$Z = \lim_{M \rightarrow \infty} \det O = \det \left[I + \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau K(l)} \right] \quad (\text{A.14})$$

Dies ist die gewünschte Form der Zustandssumme (2.20), die im wechselwirkungsfreien Fall für alle $\Delta\tau$ exakt wird.

B. ZUR NUMERISCHEN BEHANDLUNG DES LIMES HOHER DIMENSIONEN

B.1. Glättung der diskretisierten Greenfunktion

Die lokale Greenfunktion wurde in Kapitel 4 folgendermaßen umdefiniert:

$$G_{\alpha n} = \int dE \frac{N(E)}{z_{\alpha n} - E^2/z_{-\alpha n}} \quad (\text{B.1})$$

$$\bar{G}_{\alpha n} = \Delta\tau [\exp(\Delta\tau/G_{\alpha n}) - 1]^{-1} \quad (\text{B.2})$$

$$\bar{G}_{\alpha}(l\Delta\tau) = T \sum_{n=-L/2}^{L/2-1} \bar{G}_{\alpha n} e^{-i\omega_n l\Delta\tau}. \quad (\text{B.3})$$

Dabei ist $n \in \{-L/2, \dots, L/2 - 1\}$ und $L \in \{0, \dots, L-1\}$. Motiviert wurde die Wahl von $\bar{G}$ durch den Wunsch, den inversen Einteilchenpropagator $M^{\alpha}(s)$ aus (4.46) für feste HS-Feldkonfiguration, $s \equiv \{s_l\}$, in einer analogen hamiltonschen Form zu schreiben wie im endlich-dimensionalen Fall (siehe Kapitel 2.1):

$$M^{\alpha}(s) = I + p e^{-\Delta\tau K^{\alpha}} e^{-\Delta\tau V^{\alpha}(s)}. \quad (\text{B.4})$$

Dabei sind $M^{\alpha}(s)$, K^{α} und $V^{\alpha}(s)$ $L \times L$ -Matrizen; I ist die $L \times L$ -Einheitsmatrix. Bis auf einen Fehler von $\mathcal{O}(\Delta\tau^2)$ ist dies möglich, wenn wir

$$K_{ll'}^{\alpha} \equiv \Delta\tau \mathcal{G}_{\alpha}^{-1}((l-l')\Delta\tau) \quad (\text{B.5})$$

$$V_{ll'}^{\alpha}(s) \equiv \delta_{ll'} [\alpha \lambda s_l + \epsilon_i - U/2] \quad (\text{B.6})$$

und $p = -1$ setzen. Die Definition von K^{α} ist äquivalent zu (B.2). In diesem Fall sind die Gleichungen zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten und der geänderten Greenfunktionen vollkommen analog zu den in Kapitel 2.1 gegebenen.

Die Darstellung (B.2) hat aber noch einen tieferliegenden Vorzug, der im folgenden gezeigt werden soll. Dazu betrachten wir den Modellfall verschwindender Bandbreite, d.h. nur ein einziges Energieniveau ε , auch „atomarer Grenzfall“ genannt. Im nichtwechselwirkenden Fall ist die lokale Wirkung:

$$\mathcal{A} = \int_0^{\beta} d\tau [\psi^*(\tau) \partial_{\tau} \psi(\tau) + \varepsilon \psi^*(\tau) \psi(\tau)]. \quad (\text{B.7})$$

B.1. GLÄTTUNG DER DISKRETISIERTEN GREENFUNKTION

Die Diskretisierung in imaginärer Zeit liefert (siehe z.B. [Neg88])

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_L &= - \sum_{l,l'=1}^L \psi_l^* \gamma_{ll'} \psi_{l'} \\ \gamma_{ll'} &= -\delta_{l,l'} + \delta_{l,l'+1} (1 - \Delta\tau\epsilon) \quad (l \geq l') \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

mit antiperiodischen Randbedingungen, d.h. $\psi_0 \equiv -\psi_L$ und $\gamma_{l,l'+L} = -\gamma_{ll'}$. Zur Unterscheidung der diskretisierten von den kontinuierlichen Größen bekommen erstere ab nun einen zusätzlichen Index L . γ ist die *Matrix*-Inverse der Greenfunktion-Matrix:

$$G_L((l-l')\Delta\tau) \equiv G_{ll'} = (\gamma)_{ll'}^{-1}. \quad (\text{B.9})$$

Aus $\mathcal{A}_L$ berechnen wir die Zustandssumme

$$\mathcal{Z}_L = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* e^{\mathcal{A}_L} = \det[-\gamma] = 1 + (1 - \Delta\tau\epsilon)^L, \quad (\text{B.10})$$

die für $L \rightarrow \infty$ gegen den exakten Wert $1 + e^{-\beta\epsilon}$ konvergiert. Die Inversion der Matrix γ ist elementar und liefert die Greenfunktion

$$G_L(l\Delta\tau) = -\frac{(1 - \Delta\tau\epsilon)^l}{1 + (1 - \Delta\tau\epsilon)^L} \rightarrow -\frac{e^{-l\Delta\tau\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon}} \quad (\text{B.11})$$

für $L \rightarrow \infty$. Ähnlich wie in Anhang A können wir hier die Konvergenz in $\Delta\tau$ drastisch verbessern, indem wir eine neue inverse Greenfunktion

$$\bar{\gamma}_{ll'} = -\delta_{l,l'} + \delta_{l,l'+1} e^{-\Delta\tau\epsilon} \quad (\text{B.12})$$

definieren. Mit $\bar{\gamma}_{ll'}$ ist $\bar{\mathcal{Z}}_L$ für jedes L gleich der exakten Zustandssumme, und die diskretisierte Greenfunktion ist gleich der kontinuierlichen an den Stützstellen $l\Delta\tau$: $\bar{G}_L(l\Delta\tau) = G(l\Delta\tau)$. Der Übergang zu Matsubarafrequenzen ergibt:

$$\begin{aligned} (\bar{G}_n)^{-1} = \bar{\gamma}_n &= \frac{1}{\Delta\tau} \sum_l \bar{\gamma}_{1,1+l} e^{i\omega_n l \Delta\tau} \\ &= \frac{1}{\Delta\tau} [e^{\Delta\tau/G_n} - 1] \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

mit der Greenfunktion $G_n = 1/[i\omega_n - \epsilon]$ des atomaren Grenzfalles. Dies ist aber gerade die Neudefinition (B.2). Exakt wird (B.2) zwar nur im atomaren Grenzfall, doch ist allgemein der Fehler von $\mathcal{O}(\Delta\tau^2)$ und damit von derselben Ordnung wie die Trotterzerlegung. Es zeigt sich numerisch, daß die Konvergenz der Resultate mit $\Delta\tau$ durch (B.2) sich nicht verschlechtert. Observablen wie die Elektronen- und die Doppelbesetzungsdichte, zu deren Bestimmung wir die Werte von $G(0)$, bzw. die Diagonalelemente von $M^\alpha(s)$ (siehe (4.46)) während der Summation, benötigen, können nun ohne weitere Hilfsmittel berechnet werden. Im Fall der halben Bandfüllung ist G_n rein imaginär und antisymmetrisch in

den Matsubarafrequenzen: $G_{-n-1} = -G_n$. Hier liefern die wie üblich aus G_n berechneten Elektronendichten:

$$n \equiv 1 + T \sum_n G_n = 1, \quad \bar{n} \equiv 1 + T \sum_n \bar{G}_n = \frac{1}{2}, \quad (\text{B.14})$$

d.h. die Umdefinition liefert für beliebige $\Delta\tau$ das korrekte Ergebnis.

B.2. Berechnung von Suszeptibilitäten

Die Bestimmung der Suszeptibilitäten ist durch die Gleichungen (4.36) bis (4.41) im Prinzip vollständig definiert. Hier soll ihre Berechnung auf einer mehr technischen Ebene dargestellt werden.

Die numerische Behandlung erfolgt in imaginärer Zeitdarstellung. Dies ist kein wesentlicher Punkt, er erspart uns nur einen Teil der Fouriertransformationen, da die Zweiteilchen-Korrelationen während der MC-Summation in imaginären Zeiten τ berechnet werden. Die diskrete Fouriertransformation der Matrixgleichung (4.38) lautet:

$$\Delta\tau \sum_{\alpha''} \left[R(l' - l)^{\alpha\alpha'} + \Lambda^{\alpha\alpha'}(l, l') \right] \gamma_{\alpha''}^x(l') = v_{\alpha}^x(l) \quad (\text{B.15})$$

mit den üblichen Konventionen aus (4.45). Der Faktor $\Delta\tau$ in den Argumenten wurde hier zur besseren Übersichtlichkeit weggelassen. Die Matrix $\Lambda^{\alpha\alpha'}$ ist eine Summe über die zeitabhängigen Zweiteilchen-Korrelationen:

$$\Lambda^{\alpha\alpha'}(l, l') = \Delta\tau \sum_{l_1} \Gamma^{\alpha\alpha'}(l_1, l_1 - l, l'_1, l'_1 - l') \quad (\text{B.16})$$

$$\Gamma^{\alpha\alpha'}(l_1, l_2, l_3, l_4) = \langle \langle \psi_{\alpha}(l_1) \psi_{\alpha}^*(l_2) \psi_{\alpha'}(l_3) \psi_{\alpha'}^*(l_4) \rangle_T \rangle_{\text{gem}} - \langle \langle \psi_{\alpha}(l_1) \psi_{\alpha}^*(l_2) \rangle_T \rangle \langle \langle \psi_{\alpha'}(l_3) \psi_{\alpha'}^*(l_4) \rangle_T \rangle_{\text{gem}}. \quad (\text{B.17})$$

Es sei bemerkt, daß $\Lambda^{\alpha\alpha'}(l, l')$ nicht als Funktion von $l - l'$ dargestellt werden kann. Wir müssen daher die vollständige $2L \times 2L$ -Matrix berechnen und speichern. Andererseits hängt (B.16) gar nicht vom Index l_1 ab; l_1 ist ein stummer Index, den wir willkürlich festsetzen können. Deshalb erfordert jedes Element von $\Lambda^{\alpha\alpha'}$ nur L Operationen, so daß der gesamte Rechenaufwand proportional zu L^3 und damit von der gleichen Größenordnung wie der für die MC-Simulation ist. Allerdings genügt es, $\Lambda^{\alpha\alpha'}$ nur in der letzten Iteration zu bestimmen. Zur Berechnung der Zweiteilchen-Korrelationen können wir für eine gegebene Konfiguration des HS-Feldes $s \equiv \{s_l\}$ das Wicksche Theorem anwenden:

$$\langle \psi_{\alpha}(l_1) \psi_{\alpha}^*(l_2) \psi_{\alpha'}(l_3) \psi_{\alpha'}^*(l_4) \rangle_T = \langle g_{l_1 l_2}^{\alpha} g_{l_3 l_4}^{\alpha'} \rangle - \delta_{\alpha\alpha'} \langle g_{l_1 l_4}^{\alpha} g_{l_3 l_2}^{\alpha} \rangle. \quad (\text{B.18})$$

Dabei steht $\langle \dots \rangle$ für die Mittelung über das HS-Feld; $g_{ll'}^{\alpha} \equiv (M^{\alpha}(s))_{ll'}^{-1}$ (siehe (4.46)) ist der unkorrelierte Einteilchenpropagator für eine feste HS-Feldkonfiguration. Die Zeitargumente in (B.16) können auch negative Werte annehmen. Für negative Indizes ist die Matrix

$g_{ll'}^\alpha$ zwar eigentlich nicht definiert, wir können sie aber konsistent verallgemeinern, indem wir sie *indexweise* antiperiodisch fortsetzen: $g_{l+L, l'}^\alpha = g_{l, l'+L}^\alpha = -g_{l, l'}^\alpha$. Die Berechnung von $R^{\alpha\alpha'}(l-l')$ ist numerisch weniger aufwendig: In Matsubarafrequenzen ist $R^{\alpha\alpha'}$ diagonal und besteht aus jeweils drei Integralen über die Zustandsdichte $N(E)$, die entweder numerisch oder – wie etwa bei der halbelliptischen Zustandsdichte – analytisch durchgeführt werden. Die drei Integrale sind:

$$\begin{aligned} G_{an} &= \langle g_{an} \rangle_E = \frac{2z_{an}}{w^2} [1 - q_n] \\ \xi_{an} &= -\frac{\partial G_{an}}{\partial z_{an}} = \langle g_{an}^2 \rangle_E = -\frac{1}{q_n z_{an}^2} \\ \eta_{an} &= -\frac{\partial G_{an}}{\partial z_{-an}} = \frac{\langle E^2 g_{an}^2 \rangle_E}{z_{-an}^2} = -\frac{G_{an}}{z_{-an}} + \frac{z_{an}}{z_{-an}} \xi_{an} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

mit $g_{an}(E) = (z_{an} - E^2/z_{-an})^{-1}$ und $z_{an} = i\omega_n + \mu - \Sigma_{an}$. Die rechten Seiten gelten für die halbelliptische Zustandsdichte (4.4) mit der halben Bandbreite w und der Abkürzung $q_n = [1 - w^2/(z_{An}z_{Bn})]^{1/2}$. Aus G_{an} , ξ_{an} und η_{an} wird nach den Gleichungen (4.39f) $R_n^{\alpha\alpha'}$ berechnet und anschließend fouriertransformiert. Die Inversion von (B.15) liefert schließlich $\gamma_\alpha^z(l)$, woraus wir die dazugehörige Suszeptibilität gemäß (4.41) berechnen.

C. ZUR HARTREE-FOCK-NÄHERUNG MIT UNORDNUNG

Hier soll das Hubbardmodell mit Leerstellenunordnung im Limes hoher Dimensionen im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung (HFN) behandelt werden. Wir ersetzen in der Hartree-Fock-Näherung wie üblich das Produkt der Dichteoperatoren in der Wirkung $\mathcal{A}$ (4.15) durch das Produkt von Operator und Erwartungswert:

$$\frac{U}{2} \sum_{\alpha} n_{\alpha}(\tau) n_{-\alpha}(\tau) \rightarrow U \sum_{\alpha} \left[n_{\alpha}(\tau) \langle n_{-\alpha}(\tau) \rangle - \frac{1}{2} \langle n_{\alpha}(\tau) \rangle \langle n_{-\alpha}(\tau) \rangle \right] \quad (\text{C.1})$$

mit $n_{\alpha}(\tau) = \psi^*(\tau) \psi(\tau)$. Hier verwenden wir wieder unter Ausnutzung der A-B-Symmetrie des Gitters ($G_{\gamma}^{\sigma} = G_{-\gamma}^{-\sigma}$ etc.) den kombinierten Index $\alpha = \gamma\sigma$, wobei γ das Untergitter und σ den Elektronenindex bezeichnet. Der Mittelwert $\langle \dots \rangle = \langle \dots \rangle_T$ ist wie üblich als thermischer Erwartungswert, gemittelt über die Unordnungskonfigurationen zu verstehen. Die letztere Mittelung bedeutet im Fall der Leerstellenunordnung (4.51) mit einer Konzentration x von Gitterfehlstellen einfach:

$$\langle f(\epsilon) \rangle_{gem} = (1-x) f(0). \quad (\text{C.2})$$

In HFN wird die Zustandssumme $\mathcal{Z}^1$ (4.14) ein Gaußsches Integral, und wir erhalten bis auf eine Konstante:

$$\mathcal{Z}\{\mathcal{G}\} = \prod_{\alpha n} \left[g_{\alpha n}^{-1} - \epsilon_i - U n_{\alpha} \right] \quad (\text{C.3})$$

mit dem effektiven lokalen Propagator $\mathcal{G} = (G^{-1} + \Sigma)^{-1}$ und der mittleren Elektronendichte $n_{\alpha} \equiv \langle n_{\alpha}(0) \rangle$. Die Stationaritätsbedingung der freien Energie (4.26) liefert hier die folgende Selbstkonsistenzgleichung für den Einteilchenpropagator G :

$$G_{\alpha n} = z_{-\alpha n} \langle g_{\alpha n}(E) \rangle_E = (1-x) [G_{\alpha n}^{-1} + \Sigma_{\alpha n} - U n_{-\alpha}]^{-1}. \quad (\text{C.4})$$

Dabei haben wir die Abkürzungen $g_{\alpha n}(E) = (z_{\alpha n} - E^2/z_{-\alpha n})^{-1}$ und $z_{\alpha n} = i\omega_n + \alpha\hbar^2 + \mu - \Sigma_{\alpha n}$ benutzt. $\langle \dots \rangle_E$ ist das Integral über die freie Zustandsdichte $N(E)$. Die Auflösung nach der Hartree-Fock-Selbstenergie Σ liefert:

$$\Sigma_{\alpha n} = U n_{-\alpha} - x G_{\alpha n}^{-1}. \quad (\text{C.5})$$

¹ Da wir in diesem Abschnitt nicht den Rahmen der Hartree-Fock-Näherung verlassen, werden wir auf einen Index „HF“ zu ihrer Kennzeichnung verzichten.

Wir setzen das chemische Potential zu $\mu = U/2$, wodurch sichergestellt wird, daß das verbliebene Gitter halb gefüllt ist. Die gesamte Elektronendichte ist daher $1 - x$. Mit der Untergittermagnetisierung $M_{AF} = n_A - n_B = 2n_A - 1$ können wir die Selbstkonsistenzgleichungen für G folgendermaßen zusammenfassen:

$$\begin{aligned} G_{\alpha n} &= z_{-\alpha n} \langle g_{\alpha n}(E) \rangle_E \\ z_{\alpha n} &= i\omega_n + \alpha \hbar^s + \frac{\alpha}{2} U M_{AF} + x G_{\alpha n}^{-1} \\ M_{AF} &= T \sum_{\alpha n} \alpha G_{\alpha n}. \end{aligned} \quad (C.6)$$

Im Fall ohne Unordnung ($x = 0$) kann die Summation über Matsubarafrequenzen durch eine analytische Fortsetzung (siehe z.B. [Ric88]) explizit durchgeführt werden, und wir erhalten neben der trivialen Lösung, $M_{AF} = 0$, die folgende Bestimmungsgleichung für M_{AF} :

$$1 = \frac{U}{2} \int dE \frac{N(E)}{\lambda(E)} \tanh\left(\frac{\lambda(E)}{2T}\right) \quad (C.7)$$

mit $\lambda(E) = [(UM_{AF}/2)^2 + E^2]^{1/2}$. Diese Beziehung kann auch direkt aus der freien Energie gewonnen werden (siehe z.B. [vDon90] und Kapitel 3.1). Die Néel-Temperatur $T = T_N$ erhält man, indem anschließend $M_{AF} = 0$ gesetzt wird. Für $x > 0$ kann die Selbstkonsistenz (C.6) numerisch etwa durch Iteration gelöst werden.

Auf der anderen Seite ist T_N durch die Divergenz der antiferromagnetischen Suszeptibilität $\chi_{AF} = dM_{AF}/dh^s$ in der paramagnetischen Phase definiert. Die Differentiation von (C.6) nach h^s liefert:

$$\begin{aligned} G'_{\alpha n} &= \frac{z'_{-\alpha n}}{z_{\alpha n}} G_{\alpha n} - (z_{\alpha n} z'_{-\alpha n} + z_{-\alpha n} z'_{\alpha n}) \frac{\langle g_{\alpha n}^2(E) \rangle_E}{z_{-\alpha n}} \\ z'_{-\alpha n} &= \alpha \left(1 + \frac{1}{2} U M'_{AF}\right) - x \frac{G'_{\alpha n}}{G_{\alpha n}^2} \\ \chi_{AF} &= M'_{AF} = T \sum_{\alpha n} \alpha G'_{\alpha n}. \end{aligned} \quad (C.8)$$

(Der Strich steht für die Ableitung nach h^s .) Nun betrachten wir die paramagnetische Phase. Mit $M_{AF} = h^s = 0$ gilt hier: $G_{\alpha n} = G_{-\alpha n}$ etc., und für die differenzierten Größen $G'_{\alpha n} = -G'_{-\alpha n}$ etc., da das Feld h^s mit unterschiedlichen Vorzeichen auf den beiden Untergittern wirkt. Wir können von nun an den Index α unterdrücken, und betrachten nur das Untergitter mit $\alpha = A \equiv +1$. Die erste Zeile in (C.8) vereinfacht sich dann zu: $G'_n z_n = -G_n z'_n$. Mit z_n und z'_n aus (C.6) und (C.8) findet man für $M_{AF} = h^s = 0$ nach einigen Umformungen:

$$G'_n = -(1 + \frac{U}{2} \chi_{AF}) \frac{G_n}{i\omega_n}. \quad (C.9)$$

Dies setzt man nun in die untere Zeile von (C.8) ein, und löst nach χ_{AF} auf:

$$\chi_{AF} = 2T \sum_n G'_n = \frac{2K(T)}{1 - UK(T)} \quad (C.10)$$

$$K(T) = -T \sum_n \frac{G_n}{i\omega_n}. \quad (C.11)$$

(Der Faktor 2 kommt aus der Summation über die beiden Untergitter.) Die Néel-Temperatur ist durch die Divergenz von χ_{AF} , also durch die Bedingung

$$UK(T_N) = 1 \quad (C.12)$$

definiert. $K(T)$ ist bis auf den Faktor 2 gleich der Suszeptibilität im Fall $U = 0$, daher insbesondere positiv definit. Bei gegebener Temperatur, d.h. gegebenem $K(T)$, ist χ_{AF} für kleine U positiv, divergiert dann für einen kritischen Wert $U_c(T)$ und wird dann negativ, d.h. die paramagnetische Phase ist instabil. Im Grundzustand liefert (C.12) eine Art „Stoner-Kriterium“, $UK(0) > 1$, für den Antiferromagnetismus. Für $x = 0$ können wir die Summe wieder ausführen und gelangen zurück zu (C.7) mit $M_{AF} \rightarrow 0$. Hier divergiert $K(T)$ im Grundzustand, so daß dieser für jedes positive U antiferromagnetisch geordnet ist². Hier gilt übrigens $K(T) = 1/I(T, \bar{\mu} = 0)$ mit der Funktion I aus (3.23).

Für $x > 0$ ist G_n auch in der paramagnetischen Phase nur implizit gegeben:

$$G_n = \int dE \frac{N(E)}{i\omega_n + xG_n^{-1} - E}, \quad (C.13)$$

so daß wir die Summe in (C.11) nicht durch analytische Fortsetzung bestimmen können. Bei der halbelliptischen Zustandsdichte (4.4) können wir jedoch das Integral ausführen (siehe (4.44)) und erhalten nach Auflösung nach G_n :

$$G_n = \frac{2i\omega_n}{w^2} \left[1 - \sqrt{1 - (1-x)w^2/(i\omega_n)^2} \right] = \sqrt{1-x} G^{(0)}(i\omega_n/\sqrt{1-x}) \quad (C.14)$$

mit der Greenfunktion $G^{(0)}$ des Modells ohne Unordnung ($x = 0$). Es sei aber daran erinnert, daß diese Skalierung von G_n nicht für beliebige Zustandsdichten gültig ist. Mit (C.14) können wir die Summe $K(T)$ aus (C.11) umformen zu:

$$\begin{aligned} K(T) &= -\sqrt{1-x} T \sum_n \frac{G^{(0)}(i\omega_n/\sqrt{1-x})}{i\omega_n} \\ &= -\sqrt{1-x} \int dE N(E) T \sum_n \left[i\omega_n(i\omega_n/\sqrt{1-x} - E) \right]^{-1} \\ &= -\sqrt{1-x} \int dE \frac{N(E)}{E} T \sum_n \left[\frac{1}{i\omega_n - E\sqrt{1-x}} - \frac{1}{i\omega_n} \right] \\ &= -\sqrt{1-x} \int dE \frac{N(E)}{2E} [f_{FD}(E\sqrt{1-x}/T) - f_{FD}(0)]. \end{aligned} \quad (C.15)$$

²Dies gilt genaugenommen nur, wenn die freie Zustandsdichte an der Fermikante nicht verschwindet.

Die Differenz zweier Fermi-Dirac-Verteilungen, $f_{FD}(x) = (1 + \exp(x))^{-1}$, ergibt sich wieder mittels analytischer Fortsetzung [Ric88]. Die Bestimmungsgleichung für die Néel-Temperatur (C.12) wird schließlich:

$$U \sqrt{1-x} \int dE \frac{N(E)}{2E} \tanh\left(\frac{E\sqrt{1-x}}{2T_N}\right) = 1 \quad (\text{C.16})$$

Diese Bestimmungsgleichung ist aber äquivalent zu der für das reine Hubbardmodell mit renormierten Energien $\tilde{U} = U\sqrt{1-x}$ und $\tilde{T}_N = T_N/\sqrt{1-x}$. Anders formuliert: die Néel-Temperatur genügt folgendem Skalierungsgesetz:

$$T_N(U, x) = \sqrt{1-x} T_N(U\sqrt{1-x}, 0). \quad (\text{C.17})$$

Die Unordnung beeinflusst T_N also auf zwei Weisen: erstens wird die effektive Wechselwirkung um einen Faktor $\sqrt{1-x}$ verringert, zweitens die Funktion der kritischen Temperatur selbst. Im Fall starker effektiver Wechselwirkung ($\tilde{U} \gg w$) gilt $\tilde{T}_N \approx \tilde{U}/4$ und somit $T_N(U, x) = T_N(U, 0)(1-x)$, d.h. T_N nimmt linear mit x ab. Bei kleinen $\tilde{U}$ ist T_N dagegen exponentiell klein. Dies ist stets der Fall (auch für große U), wenn die Konzentration x gegen 1 geht. In der HFN wird T_N also immer mindestens linear oder sogar exponentiell mit x unterdrückt. Dieses Ergebnis steht in deutlichem Widerspruch zu den QMC-Resultaten, bei denen für kleine U die Néel-Temperatur in einem weiten Bereich von x konstant bleibt. Dieser Widerspruch bei schwacher Wechselwirkung ist überraschend, da hier die HFN (zumindest im reinen Modell) als gute Näherung betrachtet wird. Eine mögliche Erklärung liegt in der durch die Unordnung induzierten, starken Erhöhung der lokalen magnetischen Momente, die von der HFN nicht erfaßt wird.

D. EINIGE UNTERPROGRAMME FÜR DIE BEHANDLUNG IN $d = \infty$

```

c *****
c
c Einige wichtige Unterprogramme f"ur die Monte-Carlo-Simulation
c des Anderson-Hubbard-Modells im Limes hoher Dimensionen.
c Hier f"ur den Fall der bin"aren Unordnungsverteilung.
c -> Monte-Carlo-Berechnung der Einteilchen Greenfunktion
c -> Bestimmung der Doppelbesetzungsdichte
c -> Bestimmung der Zweiteilchen-Korrelationen
c -> Subtraktion des unkorrelierten Anteils derselben
c -> Berechnung der Kompressibilit"at in der A-B-Phase
c
c *****
c
c ~~~~~
c
c Laufparameter:
c beta      : inverse Temperatur
c cp1, cp2  : chemisches Potential f"ur Spin up und down
c U         : Hubbard-Wechselwirkungsst"arke
c D         : halbe Bandbreite der freien Zustandsdichte
c Delta     : Breite der Unordnungsverteilung
c prob      : Konzentration der Komponente A (bin"are Legierung)
c L         : Anzahl der Trotter-Schritte
c dt = beta/L : Diskretisierung in der Trotter-Dimension
c abr       : Abbruchkriterium (Toleranz) f"ur die Iteration
c itmax     : Maximale Anzahl von Iterationen
c Nwu       : Anzahl der "worm-up sweeps"
c Nmc       : Anzahl der MC-Sweeps mit Bestimmung der Observablen
c
c Bestimmung der Boltzmann-Gewichte:
c   xl = dt*abs(U)/2.D0
c   rlamb = log(exp(xl)+sqrt(exp(2.D0*xl)-1.D0))
c   Bf(1) = dexp(-rlamb)
c   Bf(3) = dexp(rlamb)
c
c Vorzeichen von U:
c   Bf(2) = 1.1D0
c   if (U.lt.0.D0) Bf(2) = -1.1D0
c
c ~~~~~
c
c *****
c
c Unterprogramm MCSWEEP
c
c - Auswahl von L Hubbard-Stratonovich (HS) - Spins
c - Berechnung der "Ubergangswahrscheinlichkeiten
c - Bei Akzeptanz: Berechnung der neuen Greenfunktionen
c
c Input:
c G1,G2 : Einteilchen-Greenfunktionen f"ur Spin up und down
c        Real - Matrix (Lmax,Lmax)
c Is     : Konfiguration der HS-Spins
c        Integer - Vektor (Lmax)
c Bf     : Boltzmann-Gewichte
c        Real - Vektor (3)
c L      : Anzahl von Trotter-Schritten, L kleiner gleich Lmax
c        Integer - Variable
c dseed  : Startwert f"ur den Zufallszahlen-Generator
c        Real - Variable
c sig    : Vorzeichen der Fermionendeterminante
c        Real - Variable
c
c Output:
c G1,G2 : neue Greenfunktionen
c Is     : neue HS-Feldkonfiguration
c dseed  : neuer Startwert
c Akz    : Anzahl akzeptierter Einzel-Spinflips
c        Real - Variable
c sig    : neues Vorzeichen der Fermionendeterminante
c
c Aufgerufenes Unterprogramm:
c DURAND : Zufallszahlengenerator nach Kirkpatrick und Stoll
c
c *****
c
c subroutine MCSWEEP1(G1,G2,Is,Bf,L,dseed,Akz,sig)

```

```

implicit real*8(a-h,o-z)
parameter (Lmax=129)
dimension G1(Lmax,Lmax), G2(Lmax,Lmax)
dimension Is(Lmax), Rnd(2*Lmax)
dimension Bf(3), f(3)
dimension Cl1(Lmax), Cl2(Lmax)
dimension Cr1(Lmax), Cr2(Lmax)

c Vorzeichen von U
isU = Bf(2)

f(1) = Bf(1)**2-1.D0
f(3) = Bf(3)**2-1.D0

c Aufruf des Zufallszahlen-Generators
call durand(dseed,2*L,Rnd)

c Loop ueber den Zeitindex
do 10 il=1,L

c Auswahl eines Ising-Spins
m = Rnd(il)*L+1
ism = Is(m)

c Flip-Wahrscheinlichkeit
R1 = (1.D0+G1(m,m))*f(2-ism) + 1.D0
R2 = (1.D0+G2(m,m))*f(2+isU*ism) + 1.D0
PS = R1*R2
if (isU.lt.0) PS = PS*(f(2+ism)+1.D0)
bPS = abs(PS)
PV = Rnd(il+L)

c Heat-Bath
c bPS = bPS/(1.D0+bPS)

if (bPS.gt.PV) then

c ----- Flip akzeptiert -----
Is(m) = -ism
If (PS.lt.0.D0) sig = -sig
Akz = Akz+1.D0

c Update der Greenschen Funktionen
f1 = f(2-ism)/R1
f2 = f(2+isU*ism)/R2

C Cl(j) := f*G(j,m) , Cr(j) := G(m,j) + delta(m,J)
do j=1,L
  Cl1(j) = f1*G1(j,m)
  Cl2(j) = f2*G2(j,m)
  Cr1(j) = G1(m,j)
  Cr2(j) = G2(m,j)
enddo
Cr1(m) = Cr1(m) + 1.D0
Cr2(m) = Cr2(m) + 1.D0

c G := G-Cl*Cr
do j=1,L
  do 20 i=1,L
    G1(i,j) = G1(i,j)-Cl1(i)*Cr1(j)
    G2(i,j) = G2(i,j)-Cl2(i)*Cr2(j)
  20 enddo
enddo

c -----
endif

10 continue

return
end

c *****
c
c Unterprogramm DOPPEL
c

```

ANHANG D. EINIGE UNTERPROGRAMME FÜR DIE BEHANDLUNG IN $D = \infty$

```

c Berechnung der Doppelbesetzungsdichte f"ur gegebene
c HS-Feldkonfiguration, Multiplikation mit dem Vorzeichen
c der Fermionendeterminante und Aufaddition
c
c Input:
c G1,G2,L,sig (siehe oben)
c d : Doppelbesetzungsdichte
c Real - Variable
c
c Output:
c d : erh"obt um den aktuellen Wert
c
c *****
c subroutine DOPPEL(G1,G2,L,d,sig)
c
c implicit real*8(a-h,o-z)
c parameter (Lmax=129)
c dimension G1(Lmax,Lmax), G2(Lmax,Lmax)
c
c x = 0.D0
c x1 = 0.d0
c x2 = 0.d0
c
c do i=1,L
c x = x+(1.d0+G1(i,i))*(1.d0+G2(i,i))
c enddo
c d = d+x/L*sig
c
c return
c end
c *****
c
c Unterprogramm KORREL2
c
c Berechnung der Zweiteilchen-Korrelationsfunktion f"ur gegebene
c HS-Feldkonfiguration, Multiplikation mit dem Vorzeichen
c der Fermionendeterminante und Aufaddition
c
c Input:
c G1,G2,L,sig (siehe oben)
c corG1,corG2 : Elektronendichten - 1 f"ur Spin up und down
c Real - Variablen
c Y : Zweiteilchen-Korrelationsfunktion
c Real - Matrix (2*Lmax,2*Lmax)
c
c Output:
c Y : erh"obt um die aktuellen Werte
c
c Hilfsfelder:
c G1ex,G2ex : Real - Matrizen (2*Lmax,2*Lmax)
c
c *****
c subroutine KORREL2(G1,G2,L,Y,corG1,corG2,sig)
c
c implicit real*8(a-h,o-z)
c parameter (Lmax=129)
c dimension G1(Lmax,Lmax), G2(Lmax,Lmax)
c dimension G1ex(2*Lmax,2*Lmax), G2ex(2*Lmax,2*Lmax)
c dimension Y(2*Lmax,2*Lmax)
c
c Eingabe der erweiterten Greensfunktionen
c do j=1,L
c do i=1,L
c G1ex(i,j) = G1(i,j)*fak
c G2ex(i,j) = G2(i,j)*fak
c G1ex(i+L,j) = -G1(i,j)*fak
c G2ex(i+L,j) = -G2(i,j)*fak
c enddo
c G1ex(j,j) = G1ex(j,j) - corG1
c G2ex(j,j) = G2ex(j,j) - corG2
c G1ex(j+L,j) = G1ex(j+L,j) + corG1
c G2ex(j+L,j) = G2ex(j+L,j) + corG2
c enddo
c do j=1,L
c do i=1,L

```

```

        G1ex(i,j+L) = -G1(i,j)*fak
        G2ex(i,j+L) = -G2(i,j)*fak
        G1ex(i+L,j+L) = G1(i,j)*fak
        G2ex(i+L,j+L) = G2(i,j)*fak
    enddo
    G1ex(j,j+L) = G1ex(j,j+L) + corG1
    G2ex(j,j+L) = G2ex(j,j+L) + corG2
    G1ex(j+L,j+L) = G1ex(j+L,j+L) - corG1
    G2ex(j+L,j+L) = G2ex(j+L,j+L) - corG2
enddo

c 'Dummy'-Index
l2 = 1
do l1=1,L
    do l3=1,L
        do l0 la=1,L
            lap = la+l3-1
            l2p = l1+l2-1

            Y(la+L,l1+L) = Y(la+L,l1+L) + G2ex(lap,l3)*G2ex(l2,l2p)
            & Y(la,l1+L) = Y(la,l1+L) - G2ex(lap,l2p)*G2ex(l2,l3)
            + G1ex(lap,l3)*G2ex(l2,l2p)

10        enddo
        enddo
    enddo

    l2 = 1
    do l1=1,L
        do l3=1,L
            do l0 la=1,L
                lap = la+l3-1
                l2p = l1+l2-1
                Y(la,l1) = Y(la,l1) + G1ex(lap,l3)*G1ex(l2,l2p)
                & Y(la+L,l1) = Y(la+L,l1) - G1ex(lap,l2p)*G1ex(l2,l3)
                + G2ex(lap,l3)*G1ex(l2,l2p)

20        enddo
    enddo
enddo

do l1=1,2*L
    do l1=1,2*L
        Y(l1,l2) = Y(l1,l2)*sig
    enddo
enddo

return
end

c *****
c
c Unterprogramm VERTEX
c
c Berechnung des unkorrelierten Anteils der Zweiteilchen-
c Korrelationsfunktion f"ur gegebenen Wert des Zufallspotentials
c und Subtraktion von Y
c
c Input:
c G1,G2,Y,L (siehe oben)
c pges : Gewicht des betrachteten Zufallspotentials
c Real - Variable
c
c Output:
c Y : vermindert um den unkorrelierten Anteil
c
c Hilfsfelder:
c Gilin,G2lin : Real - Vektoren (Lmax)
c
c *****
c subroutine VERTEX(G1,G2,Y,L,pges)
c
c implicit real*8(a-h,o-z)
c parameter (Lmax=129)
c dimension Y(2*Lmax,2*Lmax)

```

ANHANG D. EINIGE UNTERPROGRAMME FÜR DIE BEHANDLUNG IN $D = \infty$

```

dimension G1(Lmax,Lmax), G2(Lmax,Lmax)
dimension G1lin(Lmax), G2lin(Lmax)

c Berechnung der "linearisierten" Greensfunktionen
do i=1,L
  G1lin(i) = 0.D0
  G2lin(i) = 0.D0
enddo

do j=1,L
  do i=1,j-1
    l1 = j-i+1
    l2 = L-j+i+1
    G1lin(l2) = G1lin(l2) - G1(i,j)
    G2lin(l2) = G2lin(l2) - G2(i,j)
    G1lin(l1) = G1lin(l1) + G1(j,i)
    G2lin(l1) = G2lin(l1) + G2(j,i)
  enddo
  G1lin(1) = G1lin(1) + G1(j,j)
  G2lin(1) = G2lin(1) + G2(j,j)
enddo

do i=1,L
  G1lin(i) = G1lin(i)/L
  G2lin(i) = G2lin(i)/L
enddo
G1lin(1) = 0.D0
G2lin(1) = 0.D0

do j=1,L
  js = L-j+2
  if (j.eq.1) js = 1
  do i=1,L
    Y(i,j) = Y(i,j) /L + G1lin(i)*G1lin(js)
    Y(i+L,j) = Y(i+L,j) /L + G2lin(i)*G1lin(js)
    Y(i,j+L) = Y(i,j+L) /L + G1lin(i)*G2lin(js)
    Y(i+L,j+L) = Y(i+L,j+L)/L + G2lin(i)*G2lin(js)
  enddo
enddo

return
end

c *****
c
c Unterprogramm KOMPSTAG
c
c Berechnung des Kompressibilit"at in der A-B-Phase
c aus der Zweiteilchen-Korrelationsfunktion Y
c Hier nur f"ur den Fall der halbelliptischen Zustandsdichte
c (Die Bestimmung anderer Suszeptibilit"aten erfolgt analog.)
c
c Input:
c Slf,S2f : Selbstenergien in Matsubarafrequenzen
c          Real - Vektoren (Lmax)
c cp1,cp2 : chemische Potentiale f"ur Spin up und down
c          Real - Variablen
c Y,L      : siehe oben
c beta     : inverse Temperatur
c D        : Halbe Bandbreite der freien Zustandsdichte
c Fcoef    : Fourierkoeffizienten
c           (Fcoef(i,k) ist der Fourierkoeffizient zwischen
c            Zeit-Schritt 1 und Matsubarafrequenz k)
c           Real - Matrix (Lmax,Lmax)
c
c Output:
c compaf : Kompressibilit"at
c
c Hilfsfelder (zum Teil zu Testzwecken):
c Y1      : Real - Matrix (2*Lmax,2*Lmax)
c X,Gs,R  : Real - Vektoren (2*Lmax)
c X1f,X2f : Real - Vektoren (Lmax)
c R1f,R2f : Real - Vektoren (Lmax)
c
c Aufgerufenes Unterprogramm:

```

```

c LINRG : IMSL-Routine zur Inversion einer reellen Matrix *
c *
c *****
subroutine KOMPSTAG(S1f,S2f,cp1,cp2,Y,beta,D,L,Fcoef,compaf)

implicit real*8(a-h,o-z)
parameter (Lmax=129)
dimension Y(2*Lmax,2*Lmax), X(2*Lmax), Gs(2*Lmax)
dimension Y1(2*Lmax,2*Lmax)
dimension R1(Lmax), R2(Lmax), R3(Lmax), R(2*Lmax)
complex*16 S1f(Lmax), S2f(Lmax)
complex*16 X1f(Lmax), X2f(Lmax)
complex*16 R1f(Lmax), R2f(Lmax), R3f(Lmax)
complex*16 Fcoef(Lmax,Lmax)
complex*16 xsil,xsi2,wurz,ca,cb,cc,cD,Gf,Gqf

cD = dcmplx(D*D)
pi = acos(-1.D0)
alfa = pi/beta
dt = beta/L
f = dt**2*L

c Berechnung von <g> und <g^2>
do k=1,L
  xsil = (-L-1+2*k)*alfa*(0.D0,1.D0)+S1f(k)+cp1
  xsi2 = (-L-1+2*k)*alfa*(0.D0,1.D0)+S2f(k)+cp2
  wurz = sqrt(dcmplx(1.d0)-cD/xsil/xsi2)
  Gf = xsil**2.D0/cD*((1.D0,0.D0)-wurz)
  Gqf = (1.d0,0.d0)/(xsil**2*wurz)
  ca = (1.d0,0.d0)-Gqf/Gf**2
  cc = xsil/xsi2
  cb = (1.d0,0.d0)/(xsil*Gf)+ca-(1.d0,0.d0)
  R1f(k) = -(ca*Gqf+(Gf*cb)**2)/(ca*ca-cb*cb)
  R2f(k) = (Gqf+ca*Gf**2)*cb*cc/(ca*ca-cb*cb)
  R3f(k) = cc*cc*R1f(k)
enddo

c Fouriertrafo zur Temperaturdarstellung
do j=1,L
  R1(j) = 0.d0
  R2(j) = 0.d0
  R3(j) = 0.d0
enddo
do k=1,L
  do j=1,L
    R1(j) = R1(j)+Fcoef(j,k)*R1f(k)
    R2(j) = R2(j)+Fcoef(j,k)*R2f(k)
    R3(j) = R3(j)+Fcoef(j,k)*R3f(k)
  enddo
enddo
do j=1,L
  R1(j) = R1(j)/beta
  R2(j) = R2(j)/beta
  R3(j) = R3(j)/beta
enddo

c Berechnung der zu invertierenden Matrix Y1:=dt**2*L*Y+dt*R
do j=1,L
  do i=1,j-1
    Y1(i,j) = f*Y(i,j) -dt*R1(i-j+L+1)
    Y1(i+L,j) = f*Y(i+L,j) -dt*R2(i-j+L+1)
    Y1(i,j+L) = f*Y(i,j+L) -dt*R2(i-j+L+1)
    Y1(i+L,j+L) = f*Y(i+L,j+L) -dt*R3(i-j+L+1)
  enddo
  do i=j,L
    Y1(i,j) = f*Y(i,j) +dt*R1(i-j+1)
    Y1(i+L,j) = f*Y(i+L,j) +dt*R2(i-j+1)
    Y1(i,j+L) = f*Y(i,j+L) +dt*R2(i-j+1)
    Y1(i+L,j+L) = f*Y(i+L,j+L) +dt*R3(i-j+1)
  enddo
enddo

c Inversion von Y1
call LINRG(2*L,Y1,2*Lmax,Y1,2*Lmax)

c Berechnung von Gamma = Y1*R =: X

```

ANHANG D. EINIGE UNTERPROGRAMME FÜR DIE BEHANDLUNG IN $D = \infty$

```

do j=1,L
  R(j) = R1(j)+R2(j)
  R(j+L) = R2(j)+R3(j)
enddo
do j=1,2*L
  X(j) = 0.D0
enddo
do i=1,2*L
  do j=1,2*L
    X(i) = X(i) + Y1(i,j)*R(j)
  enddo
enddo
ctttttttt Fouriertrafo von X -> Xf
do j=1,L
  X1f(j) = 0.d0
  X2f(j) = 0.d0
enddo
do k=1,L
  do j=1,L
    X1f(k) = X1f(k)+X(j)/Fcoef(j,k)
    X2f(k) = X2f(k)+X(j+L)/Fcoef(j,k)
  enddo
enddo
do j=1,L
  X1f(j) = X1f(j)*dt
  X2f(j) = X2f(j)*dt
enddo
c ttttttt Ausgabe von Gf' = Kappa_n
write(32,*) ':cmd: nic col sym'
write(32,*) L
do k=1,L
  xsi = (-L-1+2*k)*alfa
  Gf = R1f(k)*(1.d0-X1f(k))+R2f(k)*(1.d0-X2f(k))
  Gqf = R2f(k)*(1.d0-X1f(k))+R3f(k)*(1.d0-X2f(k))
  write(32,'(5f14.7)') xsi,Gf,Gqf
enddo

c Berechnung von G' = dt**2*L*Y*X =: Gs
do i=1,2*L
  Gs(i) = 0.d0
enddo
do i=1,2*L
  do j=1,2*L
    Gs(i) = Gs(i) + f*Y(i,j)*X(j)
  enddo
enddo
write(6,'(4e20.8)') dt,Gs(1),Gs(1+L)
compaf = Gs(1)+Gs(1+L)

c nochmal als TEST : Berechnung von G' = R+gamma'*R =: Gs
Gs(1) = 0.d0
Gs(1+L) = 0.d0
do i=1,L
  Gs(1) = Gs(1) +R1f(i)*(1.d0-X1f(i))+R2f(i)*(1.d0-X2f(i))
  Gs(1+L) = Gs(1+L)+R2f(i)*(1.d0-X1f(i))+R3f(i)*(1.d0-X2f(i))
enddo
Gs(1) = Gs(1) /beta
Gs(1+L) = Gs(1+L)/beta
write(6,'(4e20.8)') dt,Gs(1),Gs(1+L)
write(6,*)

return
end
c *****

```

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

2.1	Abhängigkeit der Erwartungswerte von der Diskretisierung $\Delta\tau$	27
2.2	Mittleres Vorzeichen für verschiedene Systemgrößen und Temperaturen . . .	29
2.3	Energieniveaus der π -Elektronen auf C_{60} ohne und mit Bandalternierung .	33
3.1	Graphische Bestimmung der kritischen Temperatur für die LDW-Phase in Hartree-Fock-Näherung	49
3.2	Effektive attraktive Elektron-Elektron-Wechselwirkung	50
3.3	Beispiele für Selbstkonsistenzgleichung des Ordnungsparameters n_1	52
3.4	Freie Energie als Funktion des Ordnungsparameters n_1	52
3.5	LDW-Ordnungsparameter vs. Temperatur in HFN bei halber Bandfüllung .	53
3.6	Phasendiagramm des TLS-Modells in HFN bei halber Bandfüllung	54
3.7	GQMC-Resultate für das TLS-Modell auf dem 12-er Ring.	57
3.8	Strukturfaktoren für das 6×6 -Gitter	60
3.9	Dichte-Dichte-Strukturfaktor bei verschiedenen Bandfüllungen	61
3.10	Dichte-Dichte-Strukturfaktor auf unpaarem Gitter	62
3.11	LDW-Strukturfaktor vs. Temperatur auf verschiedenen quadratischen Gittern	63
3.12	Skalierung der LDW-Strukturfaktoren mit N_z und β	64
3.13	Phasenübergang im TLS-Modell im Limes hoher Dimensionen	65
4.1	Diskretisierte Greenfunktionen in imaginärer Zeit	81
4.2	Antiferromagnetischer Phasenübergang im Limes hoher Dimensionen	85
4.3	Inverse antiferromagnetische Suszeptibilität vs. Temperatur.	86
4.4	$T - U$ -Phasendiagramm für die binäre Unordnungsverteilung.	87
4.5	Néel-Temperatur vs. Δ für die binäre Unordnungsverteilung.	88
4.6	Skalierung der Néel-Temperatur mit U und Δ	89
4.7	$T - U$ -Phasendiagramm für die kontinuierliche Unordnungsverteilung. . .	90
4.8	$T - x$ -Phasendiagramm für die Leerstellenunordnung.	91
4.9	Quadrat der lokalen magnetischen Momente m_{gem}^2 vs. U	92
4.10	m_{gem}^2 für die Leerstellenunordnung.	93
4.11	Kompressibilität κ_{gem} vs. U für die binäre und die halb-elliptische Unord- nungsverteilung.	94

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

4.12 κ_{gem} vs. U in der paramagnetischen und in der antiferromagnetischen Phase	95
4.13 κ_n in der paramagnetischen und in der antiferromagnetischen Phase.	97
4.14 Imaginärteil der gemittelten Einteilchen-Greenfunktion	97
4.15 Homogene Magnetisierung für das Hubbardmodell im äußeren Feld	99
4.16 Untergittermagnetisierung für das Hubbardmodell im äußeren Feld	99
4.17 Inverse ferromagnetische Suszeptibilität vs. T für das fcc-Gitter	101

ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS

AF	Antiferromagnet
AFLRO	Antiferromagnetische langreichweitige Ordnung
BZ	Brillouinzone
CPA	Coherent Potential Approximation
F	Ferromagnet
GQMC-	Großkanonisches Quanten-Monte-Carlo-
HFN	Hartree-Fock-Näherung
HF-	Hartree-Fock-
HTSL	Hochtemperatur-Supraleiter
LDW	Ladungsdichtewelle
MC-	Monte-Carlo-
MIÜ	Metall-Isolator-Übergang
MFT	Mean-Field-Theorie
P	Paramagnet
PQMC-	Projektor-Quanten-Monte-Carlo-
QMC-	Quanten-Monte-Carlo-
SD	Stochastische Diagonalisierung
SDW	Spindichtewelle
SIAM	Einzel-Störstellen-Andersonmodell („single impurity Anderson model“)
TLS	Zwei-Niveaux-Systeme („two level systems“)
UT	Unitäre Transformation

LITERATURVERZEICHNIS

- [Abr79] E. Abrahams, P. W. Anderson, G. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett 42, 673 (1979)
- [And58] P. W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958)
- [And61] P. W. Anderson, Phys. Rev. 124, 41 (1961)
- [And87] P. W. Anderson, Science 234, 1196 (1987)
- [Bat90] G. G. Batrouni, R. T. Scalettar, Phys. Rev. B 42, 2282 (1990)
- [Bat93] G. G. Batrouni, F. de Forcrand, Phys. Rev. B 48, 589 (1993)
- [Bay62] G. Baym, Phys. Rev. 127, 1391 (1962)
- [Bel94] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. 66 (2), 261, (1994)
- [Bin86] *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Band 7 der Reihe *Topics Curr. Phys.*, Hrsg.: K. Binder, Springer, Berlin (1986);
Applications of Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Band 36 der Reihe *Topics Curr. Phys.*, Hrsg.: K. Binder, Springer, Berlin (1987);
- [Bla81] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, Phys. Rev. D 24, 2278 (1981)
- [Blo28] F. Bloch, Z. Phys. 52, 555, (1928)
- [Bra89] Brandt and Mielsch, Z. Phys. B 75, 365, (1989); *ibid.* B 79, 295 (1990); *ibid.* B 82, 37 (1991)
- [Bue86] G. M. Buendia, Phys. Rev. B 33, 3519 (1986)
- [Bun88] *Fractals and disordered systems*, Hrsg.: A. Bunde, S. Havlin, Springer, Berlin (1991)
- [Caf94] M. Caffarel, W. Krauth, Phys. Rev. Lett. 72, 1545 (1994)
- [Cas84] C. Castellani, C. Di Castro, P. A. Lee and M. Ma, Phys. Rev. B 30, 527 (1984);
C. Castellani, C. Di Castro and M. Grilli, Phys. Rev. B 34, 5907 (1986)

- [Cas84a] C. Castellani, C. Di Castro, P. A. Lee, M. Ma. S. Sorella, and E. Tabet, Phys. Rev. B **30**, 1596 (1984); ibid. B **33**, 6169 (1986)
- [Cas87] C. Castellani, G. Kotliar, and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **59**, 323 (1987)
- [Cha92] S. Chakravarty, M. P. Gelfand, S. Kivelson, Science **254**, 970 (1991)
- [Ciu93] S. Ciuci, F. Pasquale, C. Masciovecchio, D. Feinberg, Europhys. Lett. **24**, 575 (1993)
- [Czy86] G. Czychol, Phys. Rep. **143**, 277 (1986)
- [Dob93] V. Dobrosavljević and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **71**, 3218 (1993); Phys. Rev. B **50**, 1430 (1994)
- [dRae81] H. De Raedt, A. Lagendijk, Phys. Rev. Lett. **46**, 77 (1981)
- [dRae85] H. De Raedt, A. Lagendijk, Phys. Rep. **127**, 233 (1985)
- [dRae92] H. de Raedt, W. von der Linden in *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*, Band 71 der Reihe *Springer Topics in Applied Physics*, Hrsg.: K. Binder, Springer, Berlin (1992)
- [dRae93] H. De Raedt, M. Frick, Phys. Rep. **231**, 107 (1993)
- [Eco79] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer, Berlin (1979)
- [Elk79] K. Elk, W. Gasser, *Die Methode der Greenschen Funktionen in der Festkörperphysik*, Akademie-Verlag, Berlin (1979)
- [Ell74] R. J. Elliot, J. A. Krumhansl, P. L. Leath, Rev. Mod. Phys. **46** (3), 465, (1974)
- [Fal69] L. M. Falicov, J. C. Kimball, Phys. Rev. Lett. **22**, 997 (1969)
- [Fin83] A. M. Finkelshtein, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **84**, 168 (1983) [Sov. Phys.- JETP **57**, 97 (1983)].
- [Fin84] A. M. Finkelshtein, Z. Phys. B **56**, 189 (1984)
- [Fre93] J. K. Freericks, M. Jarrell, D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **48**, 6302 (1993); Europhys. Lett. **25**, 37 (1994)
- [Fri90] M. Frick, Doktorarbeit, HD-TVP-90-13, Heidelberg (1990), M. Frick, W. von der Linden, I. Morgenstern, H. de Raedt, Z. Phys. B **81**, 327 (1990)
- [Fri91] M. Frick, W. von der Linden, I. Morgenstern, Z. Phys. B **82**, 339 (1991)

- [Fri92] M. Frick, H. de Raedt, Z. Phys. B 88, 173 (1992)
- [Geo92] A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B 45, 6479 (1992); A. Georges, G. Kotliar and Q. Si, Int. J. Mod. Phys. B 6, 705 (1992)
- [Geo92a] A. Georges and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. 69, 1240 (1992)
- [Geo93] A. Georges and W. Krauth, Phys. Rev. B 48, 7167 (1993); L. Lalau, A. Georges and W. Krauth, preprint
- [Geo93a] A. Georges, G. Kotliar and W. Krauth, Z. Phys. B 92, 313 (1993)
- [Gie94] A. Gieseke, U. Brandt, Phys. Rev. B 48, 10311 (1994)
- [Gro94] C. Gros, W. Wenzel, R. Valenti, G. Hülsebeck, J. Stolze, Europhys. Lett. 27, 299 (1994)
- [Gun81] *Glassy Metal I*, Band 46 der Reihe *Springer Topics in Applied Physics*, Hrsg.: H. J. Güntherodt, H. Beck, Springer, Berlin (1981)
- [Gut63] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. 10, 159 (1963)
- [Han62] D. C. Handscomb, Proc. Cambridge Philos. Soc. 58, 594 (1962); *ibid.* 60, 115 (1964)
- [Har67] A. B. Harris, R. V. Lange, Phys. Rev. 157, 295 (1967)
- [Heb91] A. F. Hebard et al., Nature 350, 600 (1991)
- [Hel94] K. Held, V. Janiš, M. Ulmke, D. Vollhardt in Vorbereitung
- [Hir81] J. E. Hirsch, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, R. Blankenbecler, Phys. Rev. Lett. 47, 1628 (1981)
- [Hir82] J. E. Hirsch, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, R. Blankenbecler, Phys. Rev. B 26, 5033 (1982)
- [Hir82a] J. E. Hirsch, E. Fradkin, Phys. Rev. Lett. 49, 402 (1982), Phys. Rev. Lett. B 27, 4302 (1983)
- [Hir83] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B 28, 4059 (1983)
- [Hir85] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B 31, 4403 (1985)
- [Hir86] J. E. Hirsch and R. M. Fye, Phys. Rev. Lett. 56, 2521 (1986)

- [Hir88] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B 38, 12023 (1988)
- [Hirs94] R. Hirsch, *Zum Magnetismus stark korrelierter Fermionensysteme*, Dissertation, Köln (1994)
- [Hol60] T. Holstein, Ann. Phys. 8, 325 (1960)
- [Hub63] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A 276, 238 (1963)
- [Jan86] V. Janiš, Czech.J. Phys. B 36, 1107 (1986); Phys. Rev. B 40, 11331 (1989)
- [Jan91] V. Janiš, Z. Phys. B 83, 227 (1991)
- [Jan92] V. Janiš and D. Vollhardt, Int. J. Mod. Phys. B 6, 731 (1992)
- [Jan92a] V. Janiš and D. Vollhardt, Phys. Rev. B 46, 15172 (1992)
- [Jan93] V. Janiš, M. Ulmke, D. Vollhardt, Europhys. Lett. B 24, 287 (1993)
- [Jan94] V. Janiš, M. Ulmke, D. Vollhardt, Physica B 194-196, 1069 (1994)
- [Jac67] I. S. Jacobs, P. E. Lawrence, Phys. Rev. 164, 866 (1967)
- [Jar92] M. Jarrell, Phys. Rev. Lett. 69, 168 (1992)
- [Jar93] M. Jarrell and T. Pruschke, Z. Phys. B90, 187 (1993)
- [Jar93a] M. Jarrell, H. Akhlaghpour, and T. Pruschke, Phys. Rev. Lett. 70, 1670 (1993)
- [Jon89] R. O. Jones, O. Gunnarson, Rev. Mod. Phys. 61, 689 (1989)
- [Kan63] J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. 30, 275 (1963)
- [Koo82] S. E. Koonin, G. Sugiyama, H. Friederich, *Proceedings of the International Symposium Bad Honnef*, Hrsg.: K. Goeke, P. G. Reinhard, Springer, Berlin (1982)
- [Kro85] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, Nature 318, 162 (1985)
- [Lee85] P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. 57 (2), 287, (1985)
- [Lieb68] E. H. Lieb, F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. 20, 1445 (1968)
- [Lieb89] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. 61, 1201 (1989)
- [Loh89] E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, R. L. Sugar, S. R. White in *Proceedings of the Workshop on Interacting Electrons in Reduced Dimensions*, Hrsg.: D. Baeriswyl, D. Campbell, Plenum, New York (1989)

- [Loh90] E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, *Phys. Rev. B* **41**, 9301 (1990)
- [Ma81] M. Ma, *Phys. Rev. B* **26**, 5097 (1981)
- [Mar90] F. Marsiglio, *Phys. Rev. B* **42**, 2416 (1990)
- [Mat81] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism*, Band 17 der Reihe *Springer Series in Solid State Science*, Springer, Berlin (1981)
- [Mer66] N. D. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966)
- [Met89] W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989)
- [Met89a] W. Metzner, *Z. Phys. B* **77** 253 (1989); *Phys. Rev. B* **43**, 8549 (1989)
- [MHa89] E. Müller-Hartmann, *Z. Phys. B* **74**, 507 (1989); *ibid B* **76**, 211 (1989)
- [MHa91] E. Müller-Hartmann, *Proc. V. Symp. Phys. of Metals*, Polen, (1991)
- [MHa94] E. Müller-Hartmann, persönliche Mitteilung (1994)
- [Mon92] *The Hubbard Model, A reprint volume*, Hrsg.: A. Montorsi, World Scientific, Singapore (1992)
- [Mor85] I. Morgenstern, D. Würtz, *Z. Phys. B* **61**, 219 (1985)
- [Mott90] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis, London (1990)
- [Nag66] Y. Nagaoka, *Phys. Rev.* **147**, 392 (1966)
- [Neg88] J. W. Negele, H. Orland, *Quantum Many Particle Systems*, Band 68 der Reihe *Frontiers in Physics*, Addison Wesley, Redwood City (1988)
- [Noa91] R. M. Noack, D. J. Scalapino, R. T. Scalettar, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 778 (1991)
- [Ohk91] F. J. Ohkawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 3218 (1991); *ibid.* **61**, 1615 (1991)
- [Pan94] H. Pang, S. Liang and J. F. Annett, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4377 (1994)
- [Pre89] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, Cambridge (1988)
- [Pru93] T. Pruschke, D. L. Cox and M. Jarrell, *Phys. Rev.* **47**, 3553 (1993); M. Jarrell and T. Pruschke, *Phys. Rev. B* **49**, 1458 (1994)

- [Ric88] G. Rickayzen, *Green's Functions and Condensed Matter* Academic Press, London (1988)
- [Roz92] M. J. Rozenberg, X. Y. Zhang and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **69**, 1236 (1992)
- [San92] A. W. Sandvik, J. Phys. A **25**, 3667 (1992)
- [San93] A. W. Sandvik, D. J. Scalapino, C. Singh, Phys. Rev. B **48**, 2112 (1993)
- [Sas94] T. Saso, T. Hayashi, J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1994)
- [Scp81] D. J. Scalapino, R. L. Sugar, Phys. Rev. B **24**, 4295 (1981)
- [Sct88] R. T. Scalettar, N. E. Bickers, D. J. Scalapino, *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics*, Band 33 der Reihe *Springer Proceedings in Physics*, Hrsg.: D. P. Landau, K. K. Mon, H.-B. Schüttler, Springer, Berlin (1992)
- [Sct89] R. T. Scalettar, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, D. Toussaint, Phys. Rev. B **39**, 4711 (1989)
- [Sct89a] R. T. Scalettar, N. E. Bickers, D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **40**, 197 (1989)
- [Shi72] H. Shiba, P. A. Pincus, Phys. Rev. B **5**, 1966 (1972); H. Shiba, Prog. Theor. Phys. **48**, 2171 (1972)
- [Sor88] S. Sorella, E. Tosatti, S. Baroni, P. Car, M. Parinello in *Proceedings of the Adriatico Research Conference "Towards the theoretical understanding of the high-T_c Superconductors"*, Hrsg.: S. Lundquist, E. Tosatti, M. P. Tosi, Y. Lu, World Scientific, Singapore (1988)
- [Sor89] S. Sorella, S. Baroni, P. Car, M. Parinello, Europhys. Lett. **8**, 663 (1989)
- [Sta71] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (1971)
- [Sto92] G. Stollhoff, M. Häser, Phys. Rev. B **45**, 3703 (1992)
- [Sug85] R. L. Sugar in *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics II*, Band 45 der Reihe *Springer Proceedings in Physics*, Hrsg.: D. P. Landau et al., Springer, Berlin (1990)
- [Suz76] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56**, 1454 (1976)
- [Suz86] *Quantum Monte Carlo Methods*, Band 74 der Reihe *Springer Ser. Solid State*, Hrsg.: M. Suzuki, Springer, Berlin (1986)

- [Tro59] H. F. Trotter, Proc. Am. Math. Soc. 10, 545 (1959)
- [Uhr93] G. S. Uhrig and R. Vlaming, Phys. Rev. Lett. 71, 271 (1993), G. S. Uhrig, *Symmetriebrechung und Leitfähigkeit für spinlose Fermionen in hohen Dimensionen*, Band 11 der Reihe *Aachener Beiträge zur Physik der kondensierten Materie*, Verlag der Augustinus-Buchhandlung, Aachen (1994)
- [Ulm91] M. Ulmke, Heft Nr. 2417 der *Berichte des Forschungszentrums Jülich*, Jülich (1991)
- [Ulm92] M. Ulmke, H. Müller-Krumbhaar, Z. Phys. B 86, 383 (1992); ibid. B 89, 239 (1992)
- [vdLi90] W. von der Linden, I. Morgenstern, H. de Raedt, Phys. Rev. B 41, 4669 (1990)
- [vDon89] P. G. J. van Dongen, F. Gebhard, D. Vollhardt, Z. Phys. B 76, 199 (1989)
- [vDon90] P. G. J. van Dongen, in *Magnetismus von Festkörpern und Grenzflächen*, Vorlesungsmanuskripte des 24. IFF-Ferienkurses im Forschungszentrum Jülich, Jülich (1993)
- [Vec92] M. Vekić, R. M. Noack, S. R. White, Phys. Rev. B 46, 271 (1992)
- [Vla92] R. Vlaming and D. Vollhardt, Phys. Rev. B 45, 4637 (1992)
- [Vol93] D. Vollhardt, in *Correlated Electron Systems*, Hrsg.: V. J. Emery, World Scientific, Singapore (1993)
- [Whi88] S. R. White, R. L. Sugar, R. T. Scalettar, Phys. Rev. B 38, 11665 (1988)
- [Whi89] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, Phys. Rev. B 40, 506 (1989)
- [Whi92] S. R. White, S. Chakravarty, M. P. Gelfand, S. A. Kivelson, Phys. Rev. B 45, 5062 (1992)
- [Wil65] J. H. Wilkinson, *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford University Press, New York (1965)
- [Zha93] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. 70, 1666 (1993); M. J. Rozenberg, G. Kotliar and X.Y. Zhang, Phys. Rev. B 49, 10181 (1994); Q. Si, M.J. Rozenberg, G. Kotliar, and A. E. Ruckenstein, preprint
- [Zim79] J. M. Ziman, *Models of Disorder*, Cambridge University Press, Cambridge (1979)

VERÖFFENTLICHUNGEN

Teile der vorliegenden Arbeit wurden an folgenden Stellen veröffentlicht.

1. M. Ulmke, H. Müller-Krumbhaar,
*Linear scaling of computer time with the inverse temperature
for the grand canonical quantum Monte Carlo method*
Z. Phys. B 89, 239 (1992)
2. V. Janiš, M. Ulmke, D. Vollhardt,
*Disorder vs. Interaction in the Hubbard Model:
Phase Diagram in Infinite Dimensions*
Europhys. Lett. B 24, 287 (1993)
3. V. Janiš, M. Ulmke, D. Vollhardt,
Metal-Insulator Transitions in the Disordered Hubbard Model
Physica B 194-196, 1069 (1994)
4. M. Ulmke, V. Janiš, D. Vollhardt,
Anderson-Hubbard Model in Infinite Dimensions
erscheint in Phys. Rev. B 51 (15. April 1995)

1. The first part of the report

2. The second part of the report

3. The third part of the report

4. The fourth part of the report

5. The fifth part of the report

6. The sixth part of the report

DANKSAGUNG

Herzlich bedanken möchte ich mich bei Professor H. Müller-Krumbhaar für wichtige Anregungen und lehrreiche Diskussionen, für seine Hilfsbereitschaft und nicht zuletzt für die Unterstützung der Teilnahme an verschiedenen Konferenzen und Schulen im In- und Ausland.

Bei Professor D. Vollhardt bedanke ich mich für die sehr interessante Zusammenarbeit auf dem Gebiet der hohen Dimensionen, für die Gastfreundschaft am Institut für Theoretische Physik der RWTH Aachen sowie für die Übernahme des Korreferats.

Mein besonderer Dank gilt auch Dr. V. Janiš, der dafür sorgte, daß ich in den hohen Dimensionen nicht die Orientierung verlor. Die Zusammenarbeit mit ihm hat mir viel Freude gemacht, und ich habe viel von ihm gelernt.

Dasselbe gilt für die vielen interessanten und fruchtbaren Diskussionen mit Herrn Karsten Held. Es war ein Vergnügen, ihn in das Projekt „hohe Dimensionen“ mit einzuarbeiten. Prof. Müller-Hartmann und Dr. R. Hirsch von der Universität zu Köln danke ich für wertvolle Anregungen, die für meine Arbeit sehr hilfreich waren.

Ohne sie namentlich aufzuzählen möchte ich mich bei allen Mitarbeitern der Gruppe Theorie 3 des IFF herzlich für die angenehme Atmosphäre am Institut sowie für ihre stetige Hilfsbereitschaft bedanken.

Herrn Karsten Held und Herrn Peter Richard danke ich für das Korrekturlesen dieser Arbeit.

Schließlich danke ich meiner lieben Frau, Susanne Ulmke, für ihre Unterstützung und ihre Geduld in einer erlebnisreichen, nicht immer leichten aber sehr schönen Zeit.

The first of these is the fact that the
government has been unable to
obtain the necessary funds to
carry out its policy.

The second is the fact that the
government has been unable to
obtain the necessary funds to
carry out its policy. The third is
the fact that the government has
been unable to obtain the necessary
funds to carry out its policy.

The fourth is the fact that the
government has been unable to
obtain the necessary funds to
carry out its policy. The fifth is
the fact that the government has
been unable to obtain the necessary
funds to carry out its policy.

The sixth is the fact that the
government has been unable to
obtain the necessary funds to
carry out its policy. The seventh is
the fact that the government has
been unable to obtain the necessary
funds to carry out its policy.

1900

1900

Jül-3034
Februar 1995
ISSN 0944-2952