

Nils Blümer

Quanten-Monte-Carlo-Untersuchungen von
magnetischen Phasen im Hubbard-Modell
mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen

Quanten-Monte-Carlo-Untersuchungen von
magnetischen Phasen im Hubbard-Modell
mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen

von
Nils Blümer

Diplomarbeit im Fach Physik
vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule
Aachen

06. Mai 1996

angefertigt am
Institut für Theoretische Physik, Lehrstuhl C
bei Prof. Dr. D. Vollhardt
Zweitgutachter: Prof. Dr. H. Capellmann

Danksagung

Ich danke Herrn Prof. Dr. D. Vollhardt für die Aufnahme an seinen Lehrstuhl, die interessante Aufgabenstellung und die exzellente Betreuung. Sein Interesse an meinen Ergebnissen und seine Anregungen waren mir sehr wichtig.

Meinen Betreuern Karsten Held und Jan Schlipf danke ich dafür, daß sie sich so viel Zeit genommen haben, meine Probleme und Ideen mit mir zu diskutieren. Ihnen, Christoph Halboth und Marcus Kollar danke ich auch für das Lesen von größeren Teilen dieser Arbeit.

Bei Herrn Priv.-Doz. Dr. P. van Dongen bedanke ich mich für die aufschlußreichen Diskussionen und die Hilfe beim Auffinden von Original-Zitaten.

Allen Mitarbeitern des Lehrstuhls möchte ich für ihre Hilfsbereitschaft und Offenheit danken. Das Arbeiten in dieser Gruppe war eine sehr wertvolle und schöne Erfahrung. Mein Dank gilt auch Frau Kramp, die sich so nett um die Ausstattung des Diplomanden-Zimmers mit Telefon und Computer gekümmert hat.

Meiner Freundin und Verlobten Birgit Jacob danke ich für ihre liebevolle Unterstützung in allen Phasen der Arbeit und meinen Eltern für die nicht nur ideelle Förderung.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Ferromagnetismus – ein quantenmechanisches Phänomen	3
1.2	Hinführung zum Hubbard-Modell	5
1.3	Magnetische Ordnung	7
1.4	Materie im äußeren Magnetfeld	10
1.5	Aufbau der Arbeit	12
2	Modelle	13
2.1	Hubbard-Modell	13
2.2	Erweitertes Hubbard-Modell	14
2.3	Symmetriebrechung	15
2.4	Limes unendlicher Dimensionen	17
2.4.1	Skalierung und Vereinfachungen im Hubbard-Modell	18
2.4.2	Anwendung auf das erweiterte Hubbard-Modell	19
2.4.3	Abbildung des Hubbard-Modells auf ein Single-Impurity-Modell mit selbstkonsistent zu bestimmendem Medium	20
2.5	Gitter und Zustandsdichte	23
3	Methoden	27
3.1	Quanten-Monte-Carlo Algorithmus	27
3.1.1	Iterationsweg	28
3.1.2	Lösung des lokalen Problems	29
3.1.3	Details zur Implementation	35
3.2	Berechnung von Suszeptibilitäten	37
3.3	Extrapolation und Fehler	40
4	Phasen des erweiterten Hubbard-Modells	45
4.1	Grenze Paramagnetismus – Ferromagnetismus	48
4.1.1	Hartree-Fock-Näherung	48
4.1.2	Ergebnisse der Quanten-Monte-Carlo-Simulationen	53
4.2	Grenze Paramagnetismus – Antiferromagnetismus	59
4.2.1	Hartree-Fock-Näherung	59
4.2.2	Ergebnisse der Quanten-Monte-Carlo-Simulationen	61

4.3	Nächst-Nachbar-Dichte-Wechselwirkung	63
4.4	Vollständiges Phasendiagramm	64
5	Metamagnetismus	73
5.1	Magnetisierungskurven	74
5.2	Einfluß der Hubbard-Wechselwirkung	79
6	Zusammenfassung	81
A	Formalismus	83
B	Suszeptibilitäten im erweiterten Hubbard-Modell	85
C	Sommerfeld-Entwicklung	87
D	Berechnung des chemischen Potentials	91
	Literaturverzeichnis	93

Kapitel 1

Einleitung

Inhalt dieser Arbeit ist die Untersuchung von bestimmten Eigenschaften von Festkörpern: das Auftreten von magnetischen Phasen sowie das Verhalten im äußeren Magnetfeld. Den Schwerpunkt bildet die Behandlung des Ferromagnetismus. Das Ziel ist dabei, ein Modell zu finden, das die wesentlichen Ingredienzien für die Beschreibung von Ferromagnetismus enthält.

Wir verwenden das Hubbard-Modell bzw. eine naheliegende Erweiterung dieses quantenmechanischen Vielteilchen-Modells. Es mag erstaunen, daß ein so komplexes Modell notwendig ist, um ein alltäglich erfahrbares Phänomen wie das Auftreten von Magnetismus zu erklären.

Diese Notwendigkeit wird im ersten Abschnitt der Einleitung anhand einer chronologischen Darstellung von wichtigen Erkenntnissen zum Magnetismus begründet. Von allgemeinen Prinzipien der Festkörperphysik ausgehend erfolgt im zweiten Abschnitt eine Hinführung zum Hubbard-Modell. Der dritte Abschnitt befaßt sich etwas ausführlicher und besonders im Hinblick auf die im zweiten Abschnitt angesprochenen Gittermodelle mit dem Phänomen magnetische Ordnung. Hier werden auch experimentelle Fakten referiert. Die Einleitung endet mit einer Darstellung des weiteren Aufbaus der Arbeit.

1.1 Ferromagnetismus – ein quantenmechanisches Phänomen

Magnetismus ist der Menschheit schon seit Jahrtausenden bekannt.¹ In griechischen Schriften wird Magnetit ($\text{FeO} - \text{Fe}_2\text{O}_3$) seit etwa 800 v. Chr. erwähnt. Brocken dieses Eisenerzes zeigen ferromagnetische Tendenzen, d.h. sie richten sich im äußeren (Erd-) Magnetfeld aus und ziehen nichtmagnetisches Eisen an. Der Name Magnetit geht auf das griechische *lithos magnetes* zurück und ist dem Römer Lucretius Carus zufolge auf die griechische Provinz Magnesia zurückzuführen [Luk93], in der Eisenerz gewonnen

¹Für eine ausführliche historische Betrachtung siehe [Mat81].

wurde. Andere Quellen behaupten, Mineral und Phänomen seien nach dem Schafhirten Magnes benannt.

Jeder, der selbst einmal mit Magneten experimentiert hat, wird sich vorstellen können, daß die Deutung der von Magneten ausgehenden Kräfte eine große intellektuelle Herausforderung war. Derart deutlich spürbare Fernwirkungskräfte kannte man schließlich nur als von der Erde ausgehende Gravitation. Eine Erklärung für das Phänomen Magnetismus wurde sicher nicht durch die Beobachtung erleichtert, daß die Erde neben ihrem Gravitationsfeld auch ein magnetisches Feld besitzt.

Ein Zusammenhang zwischen Elektrizität und Magnetismus war lange vermutet worden: Man hatte z.B. beobachtet, wie eine Kompaßnadel durch einen Blitzeinschlag ummagnetisiert wurde. Ein Durchbruch auf der Suche nach Ursachen des Magnetismus war die Entdeckung von Hans Christian Oersted (1777-1851), daß eine Kompaßnadel durch das Feld eines stromdurchflossenen Leiters abgelenkt wird. Bald konnte gezeigt werden, daß eine von einem stationären Strom durchflossene Spule sich wie ein Permanentmagnet verhält. Damit war eine Erklärung für Ferromagnetismus in Sicht: Innere Ströme könnten die „Ursache“ für Ferromagnetismus sein. Es blieb jedoch die Frage: Wo fließen die inneren Ströme und was ist ihre Ursache?

Die Maxwell-Gleichungen (James Clerk Maxwell, 1831-1879) liefern eine vereinheitlichte Beschreibung von elektrischen und magnetischen Feldern. Die auf dieser Grundlage aufbauende klassische Elektrodynamik kann die Wechselwirkung der Ferromagneten untereinander und mit Paramagneten sowie die Wirkungsweise von Elektromagneten erklären.

Das Bohr-van-Leeuwen-Theorem² sagt aus, daß in jedem klassischen System geladener Teilchen die Gesamtmagnetisierung verschwindet. Permanentmagnete, das heißt ferromagnetische Materialien, können also nicht wie klassische Elektromagnete erklärt werden.

1921 schlug A.H. Compton vor, daß das Elektron einen Eigendrehimpuls, den sogenannten Spin, mit zugehörigem magnetischen Moment besitzt, was von S. Goudsmit und G.E. Uhlenbeck 1925 experimentell nachgewiesen wurde. Jedes Elektron ist also ein Elementarmagnet. Die makroskopischen magnetischen Eigenschaften der kondensierten Materie hängen folglich von der Ordnung dieser elementaren Magnete ab. Die ferromagnetische Phase war damit als Ordnungszustand der Elektronen erkannt.

Die zunächst naheliegende Vermutung, diese Ordnung könne durch die magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung der Elektronen bewirkt werden, wird leicht durch eine Betrachtung der Energieskalen widerlegt: Die mit der magnetischen Wechselwirkung der Spins assoziierte Energie hat eine Größenordnung von 0.1 Kelvin. Die thermische Bewegung müßte eine durch die Dipol-Dipol-Wechselwirkung induzierte Ordnung also bereits bei Temperaturen von wenigen Kelvin aufbrechen. Die experimentell beobachteten Curie-Temperaturen, unterhalb derer Ferromagnetismus auftritt, haben dagegen häufig eine Größenordnung von 1000 Kelvin (siehe auch Abschnitt 1.3).

²1911 von Niels Bohr in seiner Doktorarbeit und unabhängig von J.H. van Leeuwen in ihrer Diplomarbeit bewiesen. Das einfache Argument kann z.B. in [Ash76] nachgelesen werden.

Heute ist man sich so gut wie sicher, daß das Zusammenspiel von elektrostatischer Coulomb-Wechselwirkung und kinetischer Energie in Verbindung mit dem Pauli-Prinzip (keine zwei Elektronen können im gleichen Zustand, insbesondere Elektronen mit gleicher Spinorientierung nicht am selben Ort sein) für Ferromagnetismus verantwortlich ist. Der genaue Mechanismus ist jedoch nicht unumstritten geklärt. Da die wichtigsten Ferromagneten metallisch sind, erscheint die Frage wichtig, inwieweit der itinerante Charakter (das heißt die Beweglichkeit) der Leitungselektronen für diesen Mechanismus relevant ist.

1.2 Hinführung zum Hubbard-Modell

Die theoretische Beschreibung eines Festkörpers ist vor allem wegen der Vielzahl der zu behandelnden Teilchen eine schwierige Aufgabe. In einem Volumen der Größe 1 cm^3 befinden sich ca. 10^{22} Atome, bestehend aus je einem Atomkern und bis zu 100 Elektronen. Eine wirklich mikroskopische Theorie müßte alle diese (untereinander wechselwirkenden) Atomkerne und Elektronen explizit behandeln. Da wir nur am Verhalten bei Temperaturen bis zu einigen 1000 Kelvin interessiert sind, uns also auf einer Energieskala bewegen, die einige Größenordnungen unter den Ionisationsenergien der am stärksten an den Atomkern gebundenen Elektronen liegt, genügt es, nur die Elektronen zu behandeln, die am wenigsten fest an die Atomkerne gebunden sind. Der Rest der Elektronen bildet mit dem Atomkern zusammen das Rumpfion. Die Anzahl der Elektronen bzw. Energieniveaus, welche pro Atom explizit behandelt werden müssen, hängt jeweils stark von der untersuchten Fragestellung ab.

Grundsätzlich unterscheidet man in der Festkörperphysik Systeme, in denen die Rumpfionen ungeordnet sind (Flüssigkeiten und Gläser) und solche, in denen diese auf einem Gitter periodisch angeordnet sind. Wir werden wir uns auf letzteren Fall beschränken, also Kristalle betrachten.

In den Gittertheorien, die wir verwenden wollen, geht man von dem Ideal eines perfekten, in jeder Raumrichtung unendlich weit ausgedehnten Kristalls aus.³ In einem Modell ohne Elektron-Elektron-Wechselwirkung, das wir zunächst betrachten wollen, bewegen sich die (Valenz-)Elektronen in einem Potential mit der Periodizität des Gitters. Dem Bloch-Theorem zufolge lassen sich die Ein-Teilchen-Zustände dann als Produkt einer ebenen Welle mit einer gitterperiodischen Funktion schreiben. Sie werden außer durch den zu der ebenen Welle gehörigen Wellenvektor \mathbf{k} gegebenenfalls durch den die gitterperiodische Funktion charakterisierenden Bandindex γ gekennzeichnet. Wegen der diskreten Translationssymmetrie des Gitters kann man \mathbf{k} auf die erste Brillouin-Zone (\mathcal{BZ}) beschränken.⁴

Die Bandstruktur des freien Elektronengases (in dem auch die Wechselwirkung mit

³Verbesserungen der Theorien müßten Gitterschwingungen und gegebenenfalls Störstellen und Versetzungen einschließen. Besonders bei mesoskopischen Systemen können auch Oberflächen- und andere *finite-size*-Effekte wichtig sein.

⁴Für eine detailliertere Einführung sei auf Lehrbücher wie [Ash76] verwiesen.

den Gitterionen vernachlässigt ist) erhält man aus der Dispersionsrelation

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m_e} \quad (1.1)$$

durch Faltung in eine Brillouin-Zone. Unter dem Einfluß einer *schwachen Elektron-Ion-Wechselwirkung* ändert sich diese Struktur qualitativ nur an den Rändern der Brillouinzone: dort spalten die Bänder auf.

Bei *starker Elektron-Ion-Wechselwirkung* betrachtet man besser den atomaren Limes. Die scharfen atomaren Energieniveaus der Elektronen sind bei unendlichem Abstand der Atome entartet. Diese Niveaus verbreitern sich durch Austausch, wenn der Abstand der Atome geringer wird, und man erhält Bänder. Dabei ist die Verbreiterung für die höchstgelegenen, am wenigsten stark bindenden Niveaus am größten. Die zu fester gebundenen Elektronen gehörenden Bänder bleiben schmal. Die Physik dieser Elektronen ist qualitativ verschieden von der freier Elektronen. Da sie insbesondere für magnetische Ordnung verantwortlich gemacht werden, werden wir uns mit ihnen beschäftigen.

Ausgehend vom atomaren Limes ist die Beschreibung der Elektronen-Zustände im Ortsraum natürlicher als die für die Bloch-Elektronen gewählte Darstellung im Impuls- bzw. Wellenvektorraum. Die um einen Gitterplatz zentrierten Eigenzustände nennt man *Wannier-Zustände*. Beide Betrachtungsweisen sind äquivalent, d.h. sowohl die Bloch- als auch die Wannierzustände bilden vollständige Orthonormalsysteme. Sie sind über eine Fourier-Transformation (F.T.) verknüpft. Für die kinetische Energie⁵ bedeutet das:

$$\mathcal{H}_t = \sum_{\sigma\gamma} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{BZ}} \epsilon_{\mathbf{k}\gamma} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma\gamma} \stackrel{F.T.}{=} \sum_{ij\sigma\gamma} t_{ij\gamma} \hat{c}_{i\sigma\gamma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma\gamma} \quad (1.2)$$

Die (nur in dieser Einleitung) durch „Hüte“ gekennzeichneten Operatoren sind im *Besetzungszahlformalismus*, welcher auch als zweite Quantisierung bezeichnet wird, definiert. $\hat{c}_{i\sigma\gamma}^\dagger$ ($\hat{c}_{i\sigma\gamma}$) sind Erzeuger- (Vernichter-Operatoren) für Elektronen am Gitterplatz⁶ i mit Spin σ im Band γ , $\hat{n}_{i\sigma\gamma} = \hat{c}_{i\sigma\gamma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma\gamma}$ ist der zugehörige Anzahloperator im Ortsraum, während $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma\gamma}$ den Anzahloperator im Impulsraum darstellt.

Die im Impulsraum (bezüglich \mathbf{k}) diagonale kinetische Energie ist im Ortsraum nichtdiagonal. Ihre Terme entsprechen einem Hüpfen von Elektronen von Gitterplätzen j zu Gitterplätzen i . Folgerichtig wird die Amplitude t_{ij} für einen solchen Prozeß als *Hüpfamplitude* bezeichnet. Man beachte, daß bei gegebenem Gitter auch die gesamte Information über das Potential der Gitterionen in den Hüpfamplituden steckt. Diese hängen für Bravais-Gitter nur von der Ortsdifferenz $i - j$ ab. Der diagonale Anteil t_{ii} wirkt in diesem Fall als chemisches Potential und wird im Großkanonischen Ensemble dem chemischen Potential zugerechnet.

⁵Zur Unterscheidung von Effekten der Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird die gesamte Energie der Bloch-Elektronen als kinetische Energie bezeichnet, die Wechselwirkung mit den Rumpfnionen ist also eingeschlossen.

⁶Die Indizes i, j stehen jeweils zusammenfassend für die Koeffizienten der Entwicklung eines Gittervektors in der Gitterbasis. Dieser Koeffizientenvektor wird mit dem Gittervektor identifiziert.

Jedes realistische Modell muß natürlich die *Coulomb-Abstoßung* der Elektronen untereinander berücksichtigen. Während die Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen im Vakuum langreichweitig ist, wird sie im Festkörper durch die Anwesenheit der anderen Elektronen abgeschirmt, ist also effektiv kurzreichweitig. In erster Näherung kann man daher annehmen, daß sie nur zwischen Elektronen wirkt, welche sich auf dem gleichen Gitterplatz befinden. Wenn man sich zusätzlich auf die Behandlung nur eines Bandes beschränkt und Hüpfen von Elektronen nur zwischen nächsten Nachbarplätzen des Gitters zuläßt, erhält man das Ein-Band, Spin-1/2 *Hubbard-Modell* mit *on site*-Wechselwirkung U

$$\mathcal{H}_{Hub} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_U = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{i\uparrow}, \quad (1.3)$$

welches in Kapitel 2 besprochen wird. $\sum_{\langle ij \rangle}$ bezeichnet eine Summe über Nächst-Nachbar-„Bindungen“, also über Paare nächster Nachbarn i und j , wobei jedes Paar nur einmal gezählt wird.⁷

Eine Erweiterung des Hubbard-Modells, welche auch die Wirkung der Coulomb-Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn berücksichtigt, wird in Abschnitt 2.2 eingeführt. Auch Hubbard-Modelle mit längerreichweitigem Hüpfen werden in der Literatur diskutiert, sind jedoch nicht Gegenstand dieser Arbeit.

1.3 Magnetische Ordnung

Eine Phase wird im Gittermodell *magnetisch geordnet* genannt, wenn die lokalen magnetischen Momente verschiedener Gitterplätze korreliert sind. Wir werden die verschiedenen Ordnungstypen in diesem Abschnitt am Temperatur-Nullpunkt betrachten. Qualitativ gilt die Charakterisierung auch für endliche Temperaturen.

Der *Ferromagnet* ist dadurch charakterisiert, daß alle lokalen magnetischen Momente gleich ausgerichtet sind.⁸ Das magnetische Moment ist also extensiv. Die resultierende Magnetisierung bricht die Symmetrie im Spinraum global. Die Translationssymmetrie des Gitters bleibt dagegen erhalten. Im Ein-Band-Modell spricht man vom *voll polarisierten Ferromagneten*, falls die lokalen Momente zusätzlich maximal sind. Man erkennt leicht, daß dieser Zustand bei halber Bandfüllung Eigenzustand des Hubbard-Hamilton-Operators zum Eigenwert 0 ist. Für das erweiterte Hubbard-Modell, welches Gegenstand dieser Arbeit sein wird, kann man in Spezialfällen sogar zeigen, daß der voll polarisierte Ferromagnet Grundzustand des Systems ist (siehe Kap. 4). Wie jedes Ordnungsphänomen verschwindet die ferromagnetische Ordnung oberhalb einer material-

⁷Für das reine Hubbard-Modell wird im Gegensatz hierzu die Summe über nächste Nachbarn häufig so ausgeführt, daß jedes Paar doppelt gezählt wird, wobei der hermitesch konjugierte Term (h.c.) in der Summe wegfällt. Die hier verwendete Konvention ist bei Nächst-Nachbar-Modellen üblich. Aus Konsistenzgründen wird sie durchgehend verwendet.

⁸Im realen Kristall gilt das nur innerhalb von sogenannten Domänen. Die Dipol-Dipol-Wechselwirkung und Verunreinigungen, welche die Größe der Domänen dort begrenzen, treten jedoch in unserem Modell nicht auf.

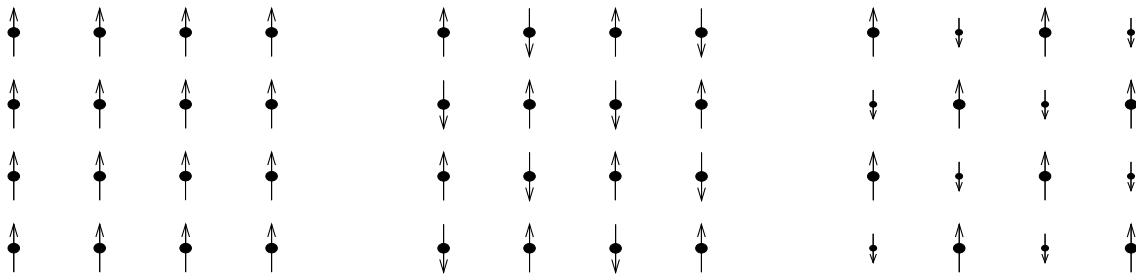


Abbildung 1.1: Magnetische Ordnung von Gitterelektronen: Ferromagnetismus (links), Antiferromagnetismus (Mitte), Ferrimagnetismus (rechts).

bzw. modellspezifischen kritischen Temperatur. Diese wird für Ferromagneten *Curie-Temperatur* genannt.

Im *Antiferromagneten* sind die magnetischen Momente benachbarter Gitterplätze nicht parallel, sondern antiparallel ausgerichtet. Das Gitter wird also gewissermaßen in zwei ferromagnetische Untergitter aufgespalten. Abbildung 1.1, in der eine Magnetisierungsrichtung global ausgezeichnet wird, ist allerdings nicht ganz richtig, da ein solcher schachbrettartiger Zustand kein Eigenzustand des Hamilton-Operators ist. Der Hüpfterm, der ja Elektronen zwischen nächsten Nachbarplätzen verschiebt, führt (bei $U < \infty$) immer zu Doppelbesetzungen. Deswegen kann die Polarisierung der beiden Untergitter nie vollständig sein.

Offensichtlich hat der Antiferromagnet (ohne äußeres Feld) keine makroskopische Magnetisierung. Dieser Ordnungstyp wird daher experimentell nicht durch Messungen in makroskopischen Magnetfeldern, sondern durch niederenergetische Neutronenstreuung festgestellt. Das durch die antiferromagnetische Ordnung bestimmte Übergitter führt wegen der Spinabhängigkeit der Elektron-Neutron-Wechselwirkung (Spin-Bahn-Kopplung) zu Überstruktureflexen, die oberhalb der *Néel-Temperatur* verschwinden.⁹

Eine Mischform von Ferro- und Antiferromagnetismus, ist der *Ferrimagnetismus*. Wie bei Antiferromagneten sind die lokalen Momente der Untergitter entgegengesetzt ausgerichtet. Da sie aber verschieden groß sind, ergibt sich wie bei Ferromagneten eine nichtverschwindende extensive Magnetisierung.

Spindichtewellen zeichnen sich dadurch aus, daß die lokalen magnetischen Momente von Gitterplatz zu Gitterplatz regelmäßig um einen konstanten Winkel rotiert sind. Im wesentlichen lassen sich diese Phasen (bei gegebener Bandfüllung) durch ihren Wellenvektor \mathbf{k} charakterisieren, der ihre Periodizität im Gitter kennzeichnet. Die Spezialfälle $\mathbf{k} = 0$ und $\mathbf{k} = (\pi, \pi, \dots)$ entsprechen der ferro- bzw. (idealisierten) antiferromagneti-

⁹Neuerdings ist es gelungen, Licht direkt an den antiferromagnetischen Ordnungsparameter anzukoppeln. Der ausgenutzte nichtlineare, nicht zeitumkehrinvariante Prozeß, die Erzeugung von zirkular polarisierten zweiten Harmonischen, erlaubt direkte Fotografien von antiferromagnetischen Domänen [Fie94, Fie96].

Material	T_c (K)	M_0 (Gauß)	Material	T_N (K)
Fe	1043	1752	Cr	311
Co	1388	1446	FeO	198
Ni	627	510	CoO	291
Gd	293	1980	NiO	600
Dy	85	3000	MnO	122
Cu ₂ MnAl	630	726	VS	1040
MnBi	670	675	FeF ₂	78
GdCl ₃	2	550	FeCl ₂	23

Tabelle 1.1: Ferromagnetische (links) und antiferromagnetische (rechts) Materialien. Bei den Ferromagneten ist neben der Curie-Temperatur T_c die Remanenz M_0 bei $T = 0$ angegeben, bei den Antiferromagneten die Néel-Temperatur [Ash76].

schen Ordnung. Alle anderen Fälle sollen im folgenden als *inkommensurable Spinwellen* bezeichnet werden.

Phasen ohne lokale magnetische Momente werden (wegen ihrer Eigenschaften im äußeren Magnetfeld, vgl. Abschnitt 1.4) *paramagnetisch* genannt.

Experimentelle Fakten

Man kennt eine ganze Reihe von ferromagnetischen Elementen und Verbindungen. Außer der Curie-Temperatur ist in Tabelle 1.1 jeweils die Remanenz M_0 angegeben, worunter man das Magnetfeld versteht, welches von außen angelegt werden muß, um das Material umzumagnetisieren. Letztere bezieht sich auf den Temperatur-Nullpunkt $T = 0$. Man erkennt, daß unter den Elementen neben Eisen auch Kobalt und Nickel bis zu hohen Temperaturen ferromagnetisch sind, während Gadolinium gerade bei Raumtemperatur paramagnetisch wird und Dysprosium nur bei tiefen Temperaturen ferromagnetische Ordnung zeigt. Von den Verbindungen, die sich teilweise durch eine hohe Remanenz auszeichnen (wichtig für Permanentmagnete, insbesondere in der Ton- und Datenspeicherung), ist nur eine kleine Auswahl aufgeführt.

Antiferromagnetismus tritt bei Cr, α -Mn und einer Reihe von Verbindungen auf, von denen wiederum nur eine kleine Auswahl in der Tabelle angegeben ist. Interessant ist, daß die zweiwertigen Oxide der Ferromagnete Fe, Co und Ni in diese Klasse fallen.

Zu den Ferrimagneten sei nur gesagt, daß das historisch so bedeutsame Mineral Magnetit Fe₂O₃ diese Ordnung hat. Der einzige „natürliche Ferromagnet“ ist also gar keiner. Der relativ großen Magnetisierung dieses Ferrimagneten ist möglicherweise zu verdanken, daß das Phänomen Magnetismus frühzeitig entdeckt wurde und anders als beispielsweise die Supraleitung nicht (mehr) als spektakulär betrachtet wird.

1.4 Materie im äußeren Magnetfeld

Bisher war nur von spontaner Symmetriebrechung ohne äußere Felder die Rede. Interessant ist aber auch das Verhalten von Festkörpern im äußeren Magnetfeld.

Bringt man nicht magnetisch geordnete Metalle oder Isolatoren in ein äußeres Magnetfeld h , wird dieses in der Regel verstärkt, selten geschwächt. Ersteres Verhalten nennt man *paramagnetisch*, das zweite *diamagnetisch*. In beiden Fällen ist die Magnetisierung M bei kleinen äußeren Feldern näherungsweise linear in h . Daher ist das Verhalten durch die Angabe der *Suszeptibilität*

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h}, \quad (1.4)$$

der Ableitung der Magnetisierungsdichte nach dem äußeren Feld, zu charakterisieren.

Die Wechselwirkung des Magnetfeldes mit abgeschlossenen Schalen der Rumpffionen ist schwach diamagnetisch und nur in Isolatoren ohne ungepaarte Elektronen zu beobachten. Bei der Wechselwirkung mit den äußeren Elektronen muß man differenzieren: Stark lokalisierte Elektronen entsprechen unabhängigen Spins¹⁰, diese zeigen eine stark temperaturabhängige paramagnetische Suszeptibilität,

$$\chi = \frac{C}{T} \quad \text{Curie-Gesetz für unabhängige Spins,} \quad (1.5)$$

während freie Elektronen eine in erster Näherung von der Temperatur unabhängige paramagnetische Suszeptibilität aufweisen, die proportional der Zustandsdichte an der Fermi-Kante ist (Bohr-Magneton μ_B):

$$\chi = \mu_B^2 N(\epsilon_F) \quad (1.6)$$

Wie in Abb. 1.2 (links) gezeigt, erreicht die zunächst dem äußeren Feld h proportionale Magnetisierungsdichte M bei großen Werten von h eine Sättigung.

Ferromagnetische Substanzen zeichnen sich dadurch aus, daß sie schon in Abwesenheit von äußeren Feldern eine endliche Magnetisierung aufweisen. Durch Anlegen von (vergleichsweise starken) magnetischen Feldern kann eine Probe entmagnetisiert bzw. die Richtung der magnetischen Ordnung geändert werden: es tritt *Hysterese* auf. Die Ursache für dieses Verhalten liegt in den schon angesprochenen Domänen. Innerhalb dieser Bereiche liegt stets Ordnung vor. Die Ordnung der Domänen untereinander ist von der Vorgeschichte abhängig: im äußeren Magnetfeld erfolgt eine Ausrichtung. Die mit dem Umklappen einzelner Domänen verbundenen Änderungen der magnetischen Flußdichte lassen sich messen und auf einem Lautsprecher sehr eindrucksvoll als Praseln wiedergeben. Da die Magnetisierung im Hysteresebereich von der Vorgeschichte abhängt, läßt sich für den Ferromagneten eine Suszeptibilität allenfalls oberhalb einer kritischen Feldstärke eindeutig messen; dann ist sie positiv.

¹⁰Die Bahndrehimpulse nicht zu stark gebundener Elektronen können häufig vernachlässigt werden, da der Bahndrehimpuls im Gitter keine „gute“ Quantenzahl ist. Sie sind wichtig im Zusammenhang mit der Spin-Bahn-Kopplung (vgl. das Ende dieses Abschnitts).

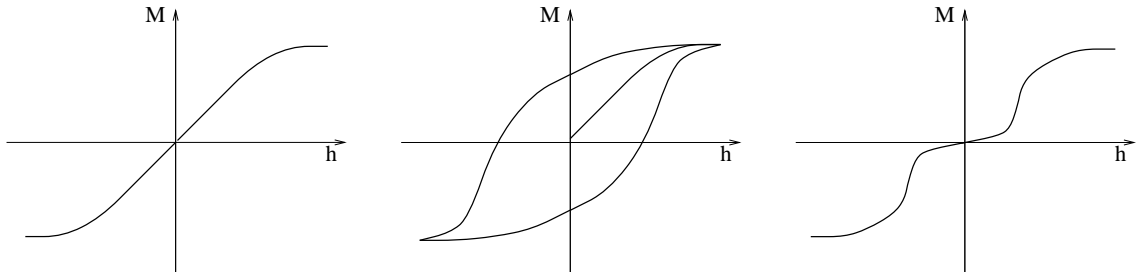


Abbildung 1.2: Skizzen des qualitativen Verhaltens der Magnetisierung m von Paramagneten (links), Ferromagneten (Mitte) und Metamagneten (rechts) im äußeren Feld h .

Antiferromagnete zeigen in Modellen wie dem Hubbard-Modell, welche bezüglich des Spins isotrop sind, paramagnetisches Verhalten. Dies liegt daran, daß sich die Spins senkrecht zu einem äußeren Magnetfeld ausrichten können, ohne die antiferromagnetische Ordnung aufzubrechen. Bei stärker werdendem Feld richten sie sich dann immer mehr in Richtung des Feldes aus. Bei sehr starken Feldern verschwindet die ursprüngliche Ordnung ganz, so daß ein voll polarisierter Para- bzw. Ferromagnet (in starken Magnetfeldern ist die Unterscheidung offensichtlich wenig sinnvoll) vorliegt.

Anders ist die Situation bei *Antiferromagneten mit Vorzugsrichtung*. Hier ist eine Richtung ausgezeichnet, in der die Elektronen bevorzugt ordnen. In diese Klasse von Materialien fällt eine Reihe von Antiferromagneten. Experimentelle Daten liegen beispielsweise für Dysprosium-Aluminium-Granat (DAG, $\text{DyAl}_5\text{O}_{12}$) [Lan71] und das in Tabelle 1.3 aufgeführte Eisenchlorid (FeCl_2) [Jac67] vor.¹¹ Bevor wir zu möglichen Ursachen für eine solche Asymmetrie im Spinraum kommen, wollen wir das Verhalten dieser *Metamagnete* in einem zu der Vorzugsrichtung parallelen Feld betrachten:

- In kleinen Magnetfeldern ist die Magnetisierung gering, gegebenenfalls leicht mit dem Feld ansteigend. Sie ist, verglichen mit dem Paramagneten, unterdrückt.
- Bei einem kritischen Feld h_c kommt es zum metamagnetischen Phasenübergang. Die Magnetisierung steigt stark an. Der Übergang kann erster, zweiter und prinzipiell auch höherer Ordnung¹² sein. Je nach Ordnung beobachtet man also einen Sprung in der Magnetisierung, der Suszeptibilität oder höheren Ableitungen der Magnetisierung nach dem Feld.
- Im weiter zunehmenden Feld erreicht die Magnetisierung (wie bei Para- und Ferromagneten) die Sättigung.

In Abbildung 1.2 (rechts) erkennt man die hieraus folgende Besonderheit des Metamagneten: Die Suszeptibilität (die Steigung der Kurve) hat ein Maximum am metamagnetischen Phasenübergang.

¹¹Für einen Review siehe [Str77].

¹²Klassifizierung nach Ehrenfest

Nun zu den Ursachen für die Vorzugsrichtung. Im Ortsraum ist eine Anisotropie durch das Gitter gegeben: Mindestens eine Achse ist stets ausgezeichnet. Die in einfachen Modellen wie dem Hubbard-Modell vorliegende Symmetrie im Spinraum wird in realen Systemen durch die oben schon angesprochene Spin-Bahn-Kopplung gebrochen. Verglichen mit der Coulomb-Wechselwirkung ist diese zwar stets klein (bei seltenen Erden bis etwa 0.1 eV), kann aber dennoch die Anisotropie des Ortsraums auf den Spinraum übertragen. Eine vollständige Behandlung sollte also eigentlich diesen relativistischen Effekt einschließen. In dieser Arbeit wird für die Untersuchung des Metamagnetismus eine Vorzugsrichtung jedoch künstlich eingeführt, indem die lokale Magnetisierungsrichtung auf die z -Achse beschränkt wird.

1.5 Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 wird neben dem Hubbard-Modell ein erweitertes Modell vorgestellt, welches auch Nächst-Nachbar-Anteile der Coulomb-Wechselwirkung berücksichtigt. Nach einem Blick auf die Beschreibung symmetriegebrochener Phasen mit Hilfe zugehöriger Felder wird der Limes unendlicher Dimensionen eingeführt. Die Betrachtung dieses Grenzfalles bringt für die genannten Modelle erhebliche Vereinfachungen mit sich und erlaubt deren exakte Beschreibung durch einen Satz von Selbstkonsistenzgleichungen. Anschließend wird die Verwendung der semielliptischen Zustandsdichte des Bethe-Gitters motiviert.

Kapitel 3 befaßt sich mit den numerischen Methoden, die in dieser Arbeit verwendet werden, um die Selbstkonsistenzgleichungen zu lösen. Außerdem wird gezeigt, wie aus diesen Lösungen Ordnungsparameter sowie Suszeptibilitäten berechnet werden können. Das Kapitel schließt mit einer Erörterung der durchgeführten Extrapolationen und einer Abschätzung der Größen der auftretenden Fehler.

In Kapitel 4 werden zunächst bekannte Resultate zum Ferromagnetismus im (erweiterten) Hubbard-Modell referiert und die Vorgehensweise bei der Bestimmung von Phasengrenzen erläutert. Dann werden, ausgehend von der homogenen Phase, nacheinander die Phasengrenzen zur ferromagnetischen, antiferromagnetischen und zu nichtmagnetischen symmetriegebrochenen Phasen untersucht, bevor das vollständige Phasendiagramm diskutiert werden kann.

Das Kapitel 5 ist der Untersuchung des Metamagnetismus gewidmet. Nach einer Darstellung der eigenen Ergebnisse werden diese im Zusammenhang mit schon vorliegenden Erkenntnissen interpretiert.

Kapitel 6 faßt die wesentlichen Resultate dieser Arbeit zusammen und gibt einen Ausblick auf noch offene Fragen.

Kapitel 2

Modelle

2.1 Hubbard-Modell

Das generische Modell für itinerante, wechselwirkende Gitterelektronen ist das 1963 unabhängig voneinander von J. Hubbard [Hub63], M.C. Gutzwiller [Gut63] und J. Kanamori [Kan63] eingeführte Ein-Band, Spin- $\frac{1}{2}$ Hubbard-Modell:

$$\mathcal{H}_{Hub} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_U = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} \quad (2.1)$$

Der hier benutzte Besetzungszahlformalismus und die verwendete Konvention für die Summe über nächste Nachbarn sind in Abschnitt 1.2 der Einleitung eingeführt worden.

Wie dort ebenfalls dargestellt, beschreibt der als \mathcal{H}_t bezeichnete Term eine durch die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Gitter renormierte kinetische Energie. Die Wechselwirkung der Elektronen untereinander ist im reinen Hubbard-Modell auf den *on site*-Term \mathcal{H}_U reduziert: Wenn zwei Elektronen sich auf demselben Gitterplatz befinden, erhöht sich die Energie um U . Wegen des Pauli-Prinzips können dies nur Elektronen verschiedenen Spins sein. Hier wirkt sich die Beschränkung auf ein Band entscheidend aus.

Das Hubbard-Modell wird insbesondere zur Beschreibung von Übergangsmetallen mit teilweise gefüllter d -Schale wie Eisen, Chrom und Nickel verwendet. Trotz der enthaltenen Vereinfachungen ist es nicht exakt lösbar. Die Schwierigkeit und gleichzeitige Stärke des Modells liegt darin, daß die (mit dem Parameter t verknüpfte) kinetische Energie und die Wechselwirkung U voll quantenmechanisch behandelt werden. Der Term der kinetischen Energie ist im Impulsraum, der der potentiellen Energie im Ortsraum diagonal. Da der Kommutator der beiden Terme nicht verschwindet,

$$[\mathcal{H}_t, \mathcal{H}_U] \neq 0, \quad (2.2)$$

existiert kein gemeinsames System von Eigenfunktionen. Die Eigenzustände des vollen Hamilton-Operators sind also im allgemeinen Linearkombinationen von unendlich vielen Eigenzuständen eines der beiden Eigensysteme. Das bedeutet nicht, daß nicht

einzelne Zustände beiden Eigensystemen angehören. Insbesondere der voll polarisierte Ferromagnet ist ein solcher Zustand.

Als paar bzw. bipartit bezeichnet man Gitter, die sich in zwei äquivalente Untergitter (hier mit A bzw. B bezeichnet) zerlegen lassen. Auf diesen Gittern wird die Tatsache, daß Elektronen im Hubbard-Modell nur zwischen nächsten Nachbarn hüpfen, also bei jedem Hüpfvorgang ihr Untergitter wechseln, wichtig. Dadurch wird antiferromagnetische Ordnung (die ja gerade eine A-B-Struktur hat) bei halber Bandfüllung bevorzugt (siehe Anfang von Kapitel 4). Auf nicht paaren Gittern bzw. bei Einschalten von Übernächst-Nachbar-Hüpfen wird Antiferromagnetismus dagegen unterdrückt.

In einer Dimension ist das Hubbard-Modell durch den Bethe-Ansatz exakt lösbar [Lie68]. Grund dafür ist, anschaulich gesprochen, daß die Elektronen wegen des Nächst-Nachbar-Hüpfens nicht aneinander vorbeikommen. Auf den entgegengesetzten Limes unendlicher Dimensionen gehen wir im Abschnitt 2.4 ein.

2.2 Erweitertes Hubbard-Modell

Das Hubbard-Modell hat eine Reihe interessanter Eigenschaften und ist das generische Modell für Antiferromagnetismus (vgl. Kapitel 5). Den in dieser Arbeit besonders thematisierten Ferromagnetismus hat man in diesem Modell (bisher) jedoch nur in sehr speziellen Fällen (siehe Kapitel 4) gefunden.

Der Verdacht liegt nahe, daß dies mit der drastischen Reduktion der Coulomb-Wechselwirkung auf ihren *on site*-Anteil zusammenhängt. In dieser Arbeit soll daher ein erweitertes Hubbard-Modell untersucht werden, das auch Nächst-Nachbar-Anteile der Coulomb-Wechselwirkung einschließt. Das Modell mit vollständiger Berücksichtigung der Nächst-Nachbar-Terme lautet [Kol96]:¹

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_{Hub} + \mathcal{H}_V + \mathcal{H}_X + \mathcal{H}_F + \mathcal{H}_{F'} \\
&= \mathcal{H}_{Hub} + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + X \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma})(n_{i-\sigma} + n_{j-\sigma}) \\
&\quad + F \sum_{\langle ij \rangle, \sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{j\sigma} + F' \sum_{\langle ij \rangle} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + h.c.) \tag{2.3}
\end{aligned}$$

Alle diese Terme ergeben sich aus der Entwicklung der Coulomb-Wechselwirkung nach Wannier-Zuständen. Man kann argumentieren, daß sämtliche Wechselwirkungs-Parameter positiv sein sollten. Nun ist ein Ein-Band-Modell immer ein effektives Modell. Die Coulomb-Wechselwirkung wird auch durch Elektronen anderer, nicht direkt betrachteter Bänder abgeschirmt. Deshalb wird eine direkte experimentelle Bestimmung der Parameter nie möglich sein. Die Hoffnung bei der Betrachtung dieser Zusatzterme zum Hubbard-Modell ist, daß sie (auch wenn sie im Vergleich zur *on site*-Wechselwirkung U klein sind) eine qualitativ neue Physik erschließen.

¹Wie schon erwähnt, erstrecken sich die Summen über Nächst-Nachbar-Bindungen. Jedes Paar von nächsten Nachbarn wird also nur einmal gezählt.

Wir nehmen nur zwei Terme dazu: den V -Term, welcher eine reine Dichte–Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn beschreibt, und den F -Term, den wir wie folgt umschreiben:²

$$\mathcal{H}_F = 2F \sum_{\langle ij \rangle} (-\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j) \quad (2.4)$$

Hier ist der Spinoperator am Gitterplatz i

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \tau_{\sigma\sigma'} c_{j\sigma'} \quad (2.5)$$

der Spinoperator am Gitterplatz i mit Pauli-Matrizen $\tau_{\sigma\sigma'}$. Man erkennt die Wirkung von \mathcal{H}_F als ferromagnetischer ($F > 0$) Heisenberg-Term.

Das Modell, welches wir auf das Auftreten von Ferromagnetismus hin untersuchen werden, hat also folgende Gestalt:

$$\mathcal{H}_{ext} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} + (V - \frac{1}{2}F) \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j - 2F \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.6)$$

2.3 Symmetriebrechung

Das Hubbard-Modell wurde bisher für den feldfreien Fall aufgeschrieben. Die Wechselwirkung mit einem magnetischen Feld ist offensichtlich: Das Magnetfeld koppelt an die Magnetisierung.

$$\mathcal{H}_{FM} = - \sum_i \mathbf{h} \cdot \mathbf{m}_i \quad (2.7)$$

In geeigneten Einheiten ist die lokale Magnetisierung gleich dem Erwartungswert des lokalen Spins (mit der Konvention $s = 1/2$, also $\hbar = e/(m_e c) = 1$). Wenn man außerdem als Quantisierungsachse die Feldrichtung wählt, ist nur die z -Komponente von Null verschieden, $m_i = \langle s_z \rangle$, also:

$$\mathcal{H}_{FM} = - \sum_i h (n_i^\uparrow - n_i^\downarrow) \quad (2.8)$$

In Berechnungen, die diese Wechselwirkung einschließen, kann die Antwort des Systems auf ein äußeres, homogenes Magnetfeld h bestimmt werden.

Die Magnetisierung pro Gitterplatz m läßt sich durch die Ableitung des Großkanonischen Potentials Ω nach dem kanonisch konjugierten Feld, dem äußeren Magnetfeld h , ausdrücken (N ist die Anzahl der Gitterplätze):

$$m = - \frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial h} \quad (2.9)$$

²Die vernachlässigten Terme beschreiben ein Paarhüpfen (\mathcal{H}_X) bzw. ein dichteabhängiges Hüpfen ($\mathcal{H}_{F'}$).

Die zugehörigen Suszeptibilität ist (vgl. Gleichung (1.4)):

$$\chi_{fm} = -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial h^2} \quad (2.10)$$

Allgemein hat jedes Modell, dessen Hamilton-Operator isotrop im Spinraum ist, Eigenzustände mit der gleichen Symmetrie. Eine homogene, unmagnetische Phase ist also immer möglich. Falls der Zustand niedrigster Energie symmetriebrochen, z.B. ferromagnetisch ist, zeigt sich die Instabilität in einer Divergenz der zugehörigen Suszeptibilität.

Dieses vom Ferromagnetismus wohlbekanntes Konzept soll nun auf andere symmetriebrochene Phasen erweitert werden. Dabei betrachten wir zunächst antiferromagnetische Ordnung auf A-B-Gittern. Diese läßt sich durch ihren Ordnungsparameter, die sogenannte *staggered* Magnetisierung

$$m_{st} = \frac{1}{2} \left(\sum_{i \in A} m_i - \sum_{i \in B} m_i \right) \quad (2.11)$$

beschreiben. Ein zugehöriges Feld muß die A-B-Symmetrie spinabhängig brechen und wie ein Magnetfeld wirken, das auf A- und B-Gitterplätzen jeweils entgegengesetztes Vorzeichen hat. Wir definieren es über seinen Wechselwirkungsterm:

$$\mathcal{H}_{AF} = -h_{st} m_{st} = -\frac{1}{2} h_{st} \left(\sum_{i \in A} m_i - \sum_{i \in B} m_i \right) \quad (2.12)$$

Zur Vereinfachung der Notation führen wir einen Untergitterindex $\alpha \in \{A, B\}$ ein, lassen den Ortsindex i nur noch über ein Gitter laufen und assoziieren α gleichzeitig mit den Werten ± 1 . Auf dem A-Gitter hat α also den Wert 1, auf dem B-Gitter den Wert -1 . Analog soll der Spinindex σ für Spin \uparrow bzw. Spin \downarrow die Werte ± 1 annehmen. Im folgenden werden wir auch die Konvention $\bar{\alpha} = -\alpha$, $\bar{\sigma} = -\sigma$ verwenden. Man erhält:

$$\mathcal{H}_{AF} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=\pm 1} \sum_{i \in \alpha} \sum_{\sigma=\pm 1} h_{st} \alpha \sigma n_{i\alpha}^{\sigma} \quad (2.13)$$

Analog dem *staggered* Magnetfeld $h_{st}\alpha\sigma$ läßt sich ein untergitterabhängiges chemisches Potential $\mu_{st}\alpha$ als Feld einführen, welches die Ausbildung von kommensurablen Ladungsdichtewellen (*charge density wave*, CDW) unterstützt. Wenn man das chemische Potential einbezieht, kann man den vollen Großkanonischen Hamilton-Operator für das Hubbard-Modell wie folgt schreiben:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_U - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=\pm 1} \sum_{i \in \alpha} \sum_{\sigma=\pm 1} (\mu + \mu_{st}\alpha + h\sigma + h_{st}\alpha\sigma) n_{i\alpha}^{\sigma} \quad (2.14)$$

Bei Abwesenheit von äußeren Feldern ist die Festlegung der Magnetisierungsachse von ferro- bzw. antiferromagnetischer Ordnung, wie wir sie vorgenommen haben, keine

Einschränkung. Auch bei ferromagnetischer Ordnung im äußeren Magnetfeld bleibt die Physik des ursprünglichen, rotationsinvarianten Modells erhalten.

Das ändert sich, wenn wir antiferromagnetische Ordnung im Magnetfeld betrachten. Durch die gleichzeitige Festlegung der Achsen von antiferromagnetischer Ordnung und Magnetfeld in z -Richtung sind wir auf ein Modell mit Vorzugsrichtung (vgl. Kapitel 1.4) übergegangen. Für diejenigen Systeme, die tatsächlich eine solche Symmetriebrechung aufweisen, sollte dieses Modell daher relevant sein.

Der vorgestellte Formalismus läßt sich auch auf inkommensurable Phasen, das heißt Phasen, die eine geringere räumliche Symmetrie als die AB-Struktur haben, verallgemeinern. Eine Betrachtung solcher Phasen, deren wichtigste Klasse die der Spindichtewellen ist, ist jedoch nicht Gegenstand dieser Arbeit.

2.4 Limes unendlicher Dimensionen

Wie schon erwähnt, ist das Hubbard-Modell in Dimensionen $d > 1$ nicht exakt lösbar. Man ist auf Näherungen angewiesen. Wirklich kontrolliert ist eine Näherung dann, wenn sich ein (kleiner) Parameter angeben läßt, bei dessen Verschwinden die Näherung exakt ist. Beim Hubbard-Modell liegt beispielsweise eine Entwicklung um den Fall unabhängiger Elektronen, dem Fermi-Gas, nahe. Der Parameter für eine Störungsentwicklung ist dann U/t . Der Geltungsbereich einer solchen Entwicklung ist allerdings fraglich [Met89a]. Eine Entwicklung um den atomaren Limes hat mit der Schwierigkeit zu kämpfen, daß dessen Grundzustand maximal entartet ist. Im Fall halber Bandfüllung kann man in diesem Grenzfall Doppelbesetzungen (die für $U = \infty$ verboten sind) herausprojizieren und eine Entwicklung in der Hüpfamplitude t vornehmen [Bul68].

Da der interessanteste Bereich des Hubbard-Modells aber gerade der ist, in dem kinetische und potentielle Energie etwa gleich stark sind, ist es wünschenswert, Näherungsmethoden verwenden zu können, die beide Terme gleichberechtigt behandeln. Im Bereich mittlerer Kopplung tritt beispielsweise bei halber Bandfüllung der Metall-Isolator-Übergang auf (für eine Übersicht siehe [Geb96]) und ist die antiferromagnetische Tendenz am größten. Der Limes hoher Spinquantenzahl, in dem sich z. B. das ($U = \infty$)-Anderson-Impurity-Modell [And63] mit der *non crossing approximation*, NCA, exakt lösen läßt [Gre83, Kur83], ist auf das Hubbard-Modell nicht anwendbar, ohne es trivial werden zu lassen [Czy92a, Czy92b, vD92]. Für ein Spin-1/2-Teilchen kann diese Näherung auch recht drastisch erscheinen. Sehr viel natürlicher ist es, für ein dreidimensionales Gitter den Limes unendlicher Koordinationszahl bzw. Dimension zu betrachten, was wir im folgenden tun wollen.

In einem Bravais-Gitter hat jeder Gitterplatz die gleiche Anzahl nächster Nachbarn Z (auch Koordinationszahl genannt). In drei Dimensionen ($d = 3$) ist $Z = 6$ für ein einfach kubisches (s.c.) Gitter ($Z = 2d$ für hyperkubische Gitter), $Z = 8$ für ein kubisch raumzentriertes (b.c.c.) Gitter und $Z = 12$ für ein kubisch flächenzentriertes (f.c.c.) Gitter. Mit $O(10)$ ist Z in den praktisch relevanten Fällen also recht groß, so daß $1/Z$ klein ist und daher die Betrachtung des Grenzfalles $Z \rightarrow \infty$ nahe liegt.

Für Spinmodelle wie das Heisenberg-Modell

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.15)$$

ist dieser Limes wohlbekannt. Er führt zur Weiss-Molekularfeld-Theorie. Damit die Energiedichte endlich bleibt, muß J hier für $Z \rightarrow \infty$ wie

$$J = \frac{J^*}{Z}, \quad J^* \text{ konstant,} \quad (2.16)$$

skaliert werden.

2.4.1 Skalierung und Vereinfachungen im Hubbard-Modell

1989 konnten W. Metzner und D. Vollhardt [Met89b] zeigen, daß der Grenzfall $Z \rightarrow \infty$ auch für Modelle itineranter Elektronen wie das Hubbard-Modell nützlich ist. Sie wiesen darauf hin, daß eine Skalierung existiert, in der dieses Modell für $Z = \infty$ nicht trivial ist, das heißt, in dem sowohl der kinetische als auch der potentielle Energieterm endlich bleiben.

Die Hubbard-Wechselwirkung U ist lokal, also von der Koordinationszahl unabhängig, und muß folglich nicht skaliert werden. Die kinetische Energie ist bei gegebenem Parameter t stark gitterabhängig. Das hyperkubische Gitter (Gitterkonstante = 1) hat in d Dimensionen die Dispersion

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{n=1}^d \cos(k_n) \sim \mathcal{O}(t\sqrt{d}). \quad (2.17)$$

Die Proportionalität zu \sqrt{d} ergibt sich für ein generisches, d.h. zufällig gewähltes \mathbf{k} nach dem Gesetz der großen Zahl aus der Summation über d zufällig aus dem Intervall $[-1, 1]$ genommene Zahlen. Eine mögliche Skalierung ist also hier $t = t^*/\sqrt{2d}$, t^* dimensionsunabhängig. Allgemein (die Zahl nächster Nachbarn Z ist nicht für alle Gittertypen proportional zur Dimension d) muß folgende Skalierung gewählt werden:

$$t = \frac{t^*}{\sqrt{Z}} \quad (2.18)$$

Die bezüglich der Dimension konstante Größe t^* legt in Verbindung mit dem Gitter die Bandbreite fest.

Die Skalierung des Nächst-Nachbar-Hüpfens impliziert, daß die korrespondierende Ein-Teilchen-Green-Funktion (auch als Propagator bezeichnet) des nichtwechselwirkenden Systems die gleiche Z -Abhängigkeit hat. Für benachbarte Gitterplätze i und j gilt also:³

$$G_{ij,\sigma}^0 \sim \frac{1}{\sqrt{Z}}. \quad (2.19)$$

³Hinweise zum verwendeten Formalismus werden im Anhang A gegeben.

Diese Eigenschaft ist ursächlich für alle Vereinfachungen im Limes $Z \rightarrow \infty$. Sie impliziert den Kollaps aller verbundenen, irreduziblen störungstheoretischen Diagramme im Ortsraum. Insbesondere wird die volle, irreduzible Selbstenergie lokal und damit impulsunabhängig. Komplizierte Integrationen im Impulsraum fallen weg. Die Theorie hat damit den Charakter einer *mean field*-Theorie, wobei aber nur über den Ortsraum gemittelt wird. Die Frequenzabhängigkeit bleibt erhalten, weswegen der Limes $d \rightarrow \infty$ häufig auch als *dynamische mean field-Theorie* bezeichnet wird.⁴

2.4.2 Anwendung auf das erweiterte Hubbard-Modell

Für $Z \rightarrow \infty$ müssen im erweiterten Hubbard-Modell neben der Hüpfamplitude t auch die Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen skaliert werden, und zwar genau wie in den im Abschnitt 2.4 aufgeführten Spinmodellen mit $1/Z$ (siehe z. B. [Itz89]):

$$t = \frac{t^*}{\sqrt{Z}}, \quad F = \frac{F^*}{Z}, \quad V = \frac{V^*}{Z} \quad (2.20)$$

Im Grenzfall $Z = \infty$ wird ganz analog dem Fall der Spinmodelle für die Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen die Weiss-Molekularfeld-Theorie, die hier der Hartree-Theorie entspricht, exakt [MH89]. Produkte von Zähloperatoren, die sich auf nächste Nachbarn beziehen, lassen sich also entkoppeln:

$$n_i^\sigma n_j^\sigma \longrightarrow n_i^\sigma \langle n_j^\sigma \rangle + \langle n_i^\sigma \rangle n_j^\sigma - \langle n_i^\sigma \rangle \langle n_j^\sigma \rangle \quad (2.21)$$

Wenn wir auch hier die Magnetisierungsachse in die z -Richtung legen, lassen sich die Spinoperatoren einfach durch die spinabhängigen Anzahloperatoren n_i^σ ausdrücken:

$$\mathbf{S}_i \longrightarrow s_i^z = \frac{1}{2}(n_i^\uparrow - n_i^\downarrow) = \frac{1}{2} \sum_\sigma \sigma n_i^\sigma \quad (2.22)$$

Wir setzen nun Homogenität auf den A-Gitterplätzen untereinander, sowie auf den B-Gitterplätzen untereinander voraus:

$$\langle n_i^\sigma \rangle = \begin{cases} n_A^\sigma & : i \in A \\ n_B^\sigma & : i \in B \end{cases} \quad (2.23)$$

Die Größen ohne Ortsindizes i oder j bezeichnen in diesem Abschnitt Erwartungswerte, keine Observablen.

Die Summen über die nächsten Nachbarn lassen sich offensichtlich so ausführen, daß i immer dem A-Gitter und j immer dem B-Gitter zugeordnet ist. Der Deutlichkeit halber fügen wir einen Gitterindex dazu und betrachten zunächst den Spin-Spin-Term:

$$-2F \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -\frac{1}{2}F \sum_{\langle ij \rangle, i \in A, j \in B, \sigma \sigma'} n_{iA}^\sigma \sigma \sigma' n_{jB}^{\sigma'}$$

⁴Für Reviews siehe [Vol93, Vol94, Geo93].

$$\begin{aligned}
(2.21) \quad & \xrightarrow{\quad} -\frac{1}{2}F \left(\sum_{i \in A, \sigma \sigma'} n_{iA}^\sigma Z \sigma \sigma' n_B^{\sigma'} + \sum_{j \in B, \sigma \sigma'} Z n_A^\sigma \sigma \sigma' n_{jB}^{\sigma'} - \frac{N}{2} Z n_A^\sigma \sigma \sigma' n_B^{\sigma'} \right) \\
& = -\frac{F^*}{2} \sum_{\alpha, i \in \alpha, \sigma} \sigma n_{i\alpha}^\sigma m_{\bar{\alpha}} + \frac{NF^*}{4} m_A m_B \quad (2.24)
\end{aligned}$$

N bezeichnet die Anzahl der Gitterplätze, m_α (n_α) sind die homogene Magnetisierung (Besetzung) des Untergitters α .

Eine analoge Umformung für den Dichte-Dichte-Term führt auf das folgende effektive Modell:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{ext} &= -\frac{t^*}{\sqrt{Z}} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} + \frac{NF^*}{4} m_A m_B - \frac{N}{2} (V^* - \frac{1}{2} F^*) n_A n_B \\
&+ \sum_{\alpha, i \in \alpha, \sigma} n_{i\alpha}^\sigma \left(-\frac{F^*}{2} \sigma m_{\bar{\alpha}} + (V^* - \frac{1}{2} F^*) n_{\bar{\alpha}} \right) \quad (2.25)
\end{aligned}$$

Man erkennt, daß die Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen wie ein spin- und untergitterabhängiges chemisches Potential wirken. In der homogenen Phase verschwindet der Spin-Spin-Term ($m_\alpha = 0$), der Dichte-Dichte-Term führt nur zu einer Renormierung des chemischen Potentials, trägt folglich bei vorgegebener Dichte ebenfalls nicht bei.

Der Hamilton-Operator wird also im Limes $Z = \infty$ durch die Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen erst in symmetriebrochenen Phasen beeinflußt! Diese Eigenschaft erlaubt es uns (wie in Abschnitt 3.2 dargestellt wird), Suszeptibilitäten des erweiterten Hubbard-Modells aus Observablen des reinen Hubbard-Modells zu berechnen.

2.4.3 Abbildung des Hubbard-Modells auf ein Single-Impurity-Modell mit selbstkonsistent zu bestimmendem Medium

Für ungeordnete, nichtwechselwirkende Systeme wie das Anderson-Modell mit diagonaler Unordnung wird seit langem erfolgreich die *coherent potential approximation* (CPA) eingesetzt [Tay67, Sov67] (für Reviews siehe [Yon73, Kru74]). Diese beruht auf dem Ansatz einer impulsunabhängigen Selbstenergie und wird im Limes $Z = \infty$ exakt. Die CPA wurde von V. Janiš auf wechselwirkende Systeme verallgemeinert (*generalized coherent potential approximation*, GCPA)[Jan91]. Die mit dieser Näherung verbundene Methode läßt sich insbesondere auf das in dieser Arbeit untersuchte Hubbard-Modell im Limes hoher Dimensionen anwenden. Sie liefert Gleichungen, die in diesem Grenzfall exakt sind. Sie sind jedoch (wie das ungenäherte Hubbard-Modell), nicht ohne weitere Näherungen analytisch lösbar. Ihre iterative, numerische Lösung wird im nächsten Kapitel besprochen.

Wir beschränken uns für den Rest des Kapitels auf das reine Hubbard-Modell. Die der Abbildung zugrundeliegende Idee ist, aus dem Gitter einen Gitterplatz herauszugreifen. Die umgebenden Gitterplätze bilden für diesen ein effektives Medium,

welches durch seine Selbstenergie beschrieben wird.⁵ Diese ist (Limes $Z = \infty$) impulsunabhängig, aber orts-, spin- und frequenzabhängig. Wir lassen als räumliche Symmetriebrechung nur eine A-B-Struktur zu, die Ortsabhängigkeit reduziert sich dann auf den Untergitterindex α . Die Wirkung dieses Mediums auf den ausgezeichneten Gitterplatz, das heißt die Ein-Teilchen-Green-Funktion dieses Gitterplatzes läßt sich bei gegebener Selbstenergie angeben (siehe unten). Gitterplatz plus Medium entsprechen einem Single-Impurity-Anderson-Modell. Um das Impurity-Modell mit dem ursprünglichen Problem zu verknüpfen, muß die das Medium beschreibende Selbstenergie mit der Selbstenergie des herausgegriffenen Gitterplatzes in Beziehung gesetzt werden.

Zur formalen Herleitung der Gleichungen wird Bayms Konzept der erhaltenen Näherungen verwendet [Bay62]. In der Sprache der Störungstheorie entspricht einer Näherung eine bestimmte Auswahl an Skelettdiagrammen der irreduziblen Selbstenergie. Baym zeigte Kriterien auf, wie man aus einer Auswahl solcher Diagramme thermodynamisch konsistente Gleichungen ableiten kann. Ein Weg dazu ist der feldtheoretische Zugang über die Darstellung des Großkanonischen Potentials durch ein, hier für den homogenen Fall geschriebenes, Funktional:⁶

$$\Omega(\Sigma, G) = \frac{1}{\beta} \left(\Phi(G) - \text{Tr}(\Sigma G) - \text{Tr} \ln ((G^0)^{-1} - \Sigma) \right) \quad (2.26)$$

Dieses liefert das physikalische Großkanonische Potential, wenn die „wahren“ Selbstenergien und Green-Funktionen eingesetzt werden. Entscheidend ist aber, daß das Funktional-Integral durch diese physikalischen Selbstenergien und Green-Funktionen minimiert wird und somit zwei Gleichungen zur Bestimmung von G und Σ liefert :

$$\frac{\delta \Omega}{\delta \Sigma} = 0, \quad \frac{\delta \Omega}{\delta G} = 0 \quad (2.27)$$

Bei der funktionalen Ableitung nach Σ spielt das unbekannte $\Phi(G)$ keine Rolle, man erhält als erste Bestimmungsgleichung die Dyson-Gleichung

$$G^{-1} = (G^0)^{-1} - \Sigma. \quad (2.28)$$

Die andere Gleichung soll das Impurity-Problem beschreiben. Dazu muß das Potential Φ angegeben werden. Im Limes $Z = \infty$ ist dies exakt möglich. Wir wollen im Hinblick auf die weitere Anwendung an dieser Stelle auf die Betrachtung der A-B-Phase übergehen. Insgesamt nimmt das Funktional dort folgende Form an [Jan91]:

$$\frac{2}{N} \Omega(\Sigma, G) = \tilde{\Omega} - \sum_{\alpha=A,B} \Omega_{\alpha}^0 + \sum_{\alpha=A,B} \Omega_{\alpha}^{WW} \quad (2.29)$$

Die auftretenden Terme können analog dem homogenen Fall im Impurity-Bild interpretiert werden:

⁵Zum Formalismus vgl. Anhang A.

⁶ $\Phi(G)$ ist ein im allgemeinen unbekanntes Funktional.

$\tilde{\Omega}$ stellt das Großkanonische Potential unabhängiger, nicht wechselwirkender Fermionen in einem frequenzabhängigen Medium $\Sigma_{\alpha n}^{\sigma}$ mit Hüpfen zwischen A- und B-Gitterplätzen dar:⁷

$$\begin{aligned}\tilde{\Omega}_{med} &= -T \sum_{n k \sigma} \ln G_{k n}^{\sigma} \\ &= -T \sum_{\sigma n} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) \ln \{ (i\omega_n + \mu - \Sigma_{A n}^{\sigma})(i\omega_n + \mu - \Sigma_{B n}^{\sigma}) - \epsilon^2 \} \quad (2.30)\end{aligned}$$

Ω_{α}^0 liefert das Potential eines Gitterplatzes α im Medium $\Sigma_{\alpha n}^{\sigma}$ und wird von $\tilde{\Omega}$ abgezogen, um im nächsten Schritt durch das wechselwirkende Potential Ω_{α}^{WW} ersetzt zu werden:

$$\Omega_{\alpha}^0 = -T \sum_{\sigma n} \ln \{ G_{\alpha n}^{\sigma}{}^{-1} \} \quad (2.31)$$

Ω_{α}^{WW} stellt das wechselwirkende Potential dar:

$$\Omega_{\alpha}^{WW} = -T \ln \mathcal{Z}_{\alpha} \equiv -T \ln \int \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\Psi^* e^{\mathcal{A}_{\alpha}(\Psi, \Psi^*, \Sigma, G)} \quad (2.32)$$

Die Zustandssumme \mathcal{Z}_{α} wurde hier durch ein Funktional-Integral über mit Ψ bezeichnete Graßmann-Variablen ausgedrückt. Diese antikommutierenden Zahlen übernehmen die Rolle der Erzeuger und Vernichter der Besetzungszahl-Schreibweise [Neg88]. In einer Darstellung, in der die Schreibweise in imaginärer Zeit mit der Fourier-transformierten Form, der Schreibweise in Matsubara-Frequenzen gemischt ist, sieht die Wirkung \mathcal{A} wie folgt aus:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{\alpha}(\Psi, \Psi^*, \Sigma, G) &= \sum_{\sigma n} \Psi_n^{\sigma*} \{ G_{\alpha n}^{\sigma}{}^{-1} + \Sigma_{\alpha n}^{\sigma} \} \Psi_n^{\sigma} \\ &\quad - U \int_0^{\beta} d\tau \Psi_{\uparrow}^*(\tau) \Psi_{\uparrow}(\tau) \Psi_{\downarrow}^*(\tau) \Psi_{\downarrow}(\tau)\end{aligned} \quad (2.33)$$

Man erkennt, daß die Wirkung \mathcal{A} in ihrer funktionalen Form von Σ und G nur über einen effektiven lokalen Propagator $\mathcal{G}^{-1} = G^{-1} + \Sigma$ abhängt. Dieser beinhaltet die Wechselwirkung mit dem Medium, nicht jedoch die Wechselwirkung auf dem Gitterplatz selbst.

Jetzt sind wir durch funktionale Ableitung ($\frac{\delta \Omega}{\delta G} = 0$) in der Lage, auch die Gleichung für das Impurity-Problem anzugeben:

$$G_{\alpha n}^{\sigma} = G_{\alpha n}^{\sigma}[\mathcal{G}] = \frac{1}{\mathcal{Z}_{\alpha}} \int \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\Psi^* \Psi_n^{\sigma*} \Psi_n^{\sigma} e^{\mathcal{A}_{\alpha}(\Psi, \Psi^*, \Sigma, G)} \quad (2.34)$$

Die Dyson-Gleichung (2.28) wird durch das Zulassen einer A-B-Symmetriebrechung leicht modifiziert:

$$G_{\alpha n}^{\sigma} = G_{\alpha n}^{\sigma}[\Sigma] = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) \frac{z_{\alpha n}^{\sigma}}{z_{A n}^{\sigma} z_{B n}^{\sigma} - \epsilon^2} \quad (2.35)$$

$$\text{mit } z_{\alpha n}^{\sigma} = i\omega_n + \mu - \Sigma_{\alpha n}^{\sigma}$$

⁷Der Index n bezieht sich hier und im folgenden immer auf die Matsubara-Frequenzen [Neg88].

Diese beiden Gleichungen beschreiben exakt und vollständig das Hubbard-Modell im Limes $Z = \infty$, wenn man ein paares Gitter betrachtet und sich auf kommensurable Phasen beschränkt.

2.5 Gitter und Zustandsdichte

Wie man an den Gleichungen (2.34) und (2.35) sieht, sind für das Hubbard-Modell im Limes $Z = \infty$ nur zwei Eigenschaften des Gitters wichtig: Paarheit (sonst wären Verallgemeinerungen notwendig) und die (nichtwechselwirkende) Zustandsdichte.

Das zur Herleitung der Skalierung benutzte hyperkubische Gitter scheint auf den ersten Blick ein typisches Gitter auch im Limes $Z = \infty$ zu sein. Im Gegensatz zu dem endlichdimensionalen Fall, in dem das Nächst-Nachbar-Hüpfen bei beliebigen Gittern stets zu freien Zustandsdichten mit algebraischen Bandkanten führt, ist die Zustandsdichte des hyperkubischen Gitters in $Z = \infty$ Gaußsch:

$$D(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t^*}} \exp \left\{ -\frac{\epsilon^2}{2t^{*2}} \right\} \quad (2.36)$$

Zustände existieren also für beliebig hohe und niedrige Energien.⁸ Diese unphysikalische Eigenschaft paßt schlecht zu der Vorstellung eines schmalen Bandes, welches energetisch von den übrigen Bändern getrennt ist.

Eine der Realität näherkommende und dem Hubbard-Modell angemessenere Zustandsdichte hat das Bethe-Gitter, auch Cayley-Baum genannt. Dabei handelt es sich nicht um ein konventionelles, auf einem Vektorraum definiertes Gitter, sondern um ein Fraktal. Einer Gitterzelle (siehe Abbildung 2.1, links) entspricht ein Knoten, in dem sich ein Stamm in eine Anzahl K von Ästen verzweigt. K wird Konnektivität genannt. Diese Äste verzweigen sich an höheren Knoten weiter, der Stamm des „Einheitsbaums“ ist selbst auch Ast. Die wesentliche Eigenschaft des Bethe-Gitters ist, daß es keine Loops hat, das heißt, es existieren keine ringförmigen Trajektorien. Dadurch und durch die Angabe der Konnektivität ist es vollständig bestimmt. Die Koordinationszahl ist offensichtlich $Z = K + 1$.

Im Limes $Z = \infty$ ist die Zustandsdichte (Energien sind hier und im folgenden auf die halbe Bandbreite normiert; d.h. es wird $2t^* = 1$ gesetzt) gegeben durch [Eco79]

$$D(\epsilon) = \frac{2}{\pi} \sqrt{1 - \epsilon^2}. \quad (2.37)$$

In Abbildung 2.1 (rechts) ist diese Zustandsdichte den Zustandsdichten von realen Gittern in endlichen Dimensionen gegenübergestellt. Man erkennt schon bei drei Dimensionen eine qualitative Annäherung. Diese Übereinstimmung rechtfertigt letztendlich die Verwendung des Bethe-Gitter. Ebenfalls naheliegend ist es, in das Modell einfach Zustandsdichten von dreidimensionalen Gittern einzusetzen.

⁸Die Symmetrie der Zustandsdichte um $\epsilon = 0$ resultiert aus der A-B-Symmetrie des Gitters und läßt sich für alle paaren Gitter durch eine Teilchen-Loch-Transformation zeigen [Lie68].

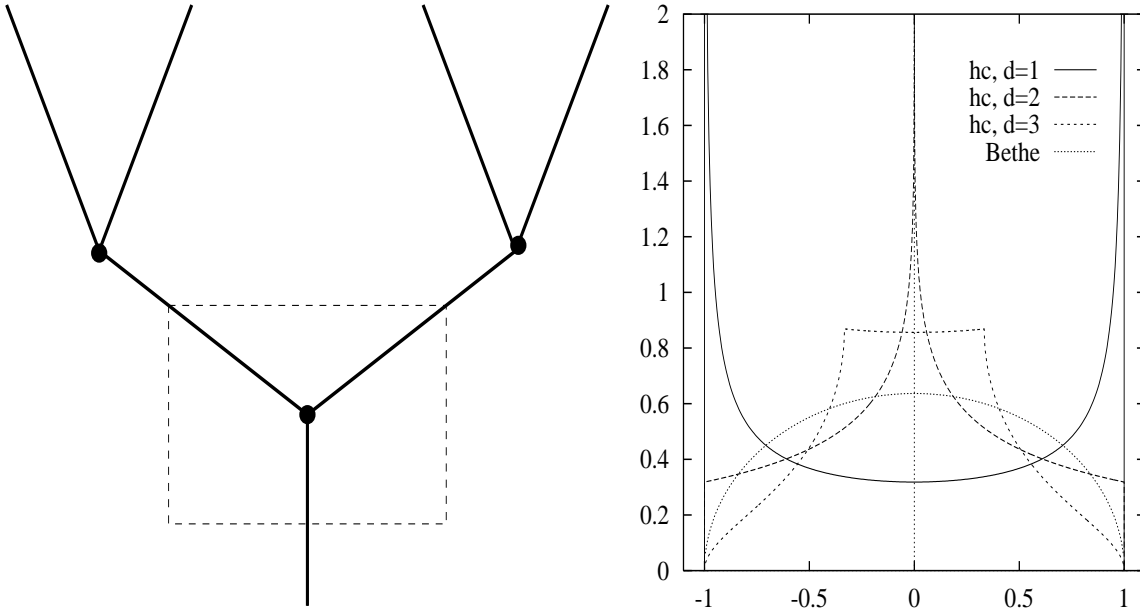


Abbildung 2.1: Schema der Topologie eines Bethe-Gitters mit Konnektivität $K = 2$ (links). Gestrichelt ist eine „Gitterzelle“ eingezeichnet. Rechts: Vergleich der Zustandsdichten von 1-, 2- und 3-dimensionalen hyperkubischen (hc) Gittern mit der des ∞ -dimensionalen Bethe-Gitters.

Ein praktischer Vorteil des Bethe-Gitters ist, daß sich mit Gleichung (2.37) das Integral der Dyson-Gleichung (2.35) leicht analytisch ausführen läßt:

$$G_{\alpha n}^{\sigma} = 2z_{\alpha n}^{\sigma} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{1}{z_{A n}^{\sigma} z_{B n}^{\sigma}}} \right) \quad (2.38)$$

Sogar das Auflösen nach der Selbstenergie ist hier möglich. Betrachtet man nämlich das Produkt der Green-Funktionen von A- und B-Gitter (Spin- und Frequenzindizes werden vorübergehend unterdrückt)

$$G_A G_B = 4z_A z_B \left(1 - \sqrt{1 - \frac{1}{z_A z_B}} \right)^2, \quad (2.39)$$

so läßt sich zunächst das Produkt $z_A z_B$ durch die Green-Funktionen ausdrücken:

$$z_A z_B = \frac{(4 + G_A G_B)^2}{16 G_A G_B} \quad (2.40)$$

Einsetzen dieses Zwischenresultates in Gleichung (2.38) liefert das beeindruckend einfache Ergebnis

$$i\omega_n + \mu - \Sigma_{\alpha n}^{\sigma} = z_{\alpha n}^{\sigma} = G_{\alpha n}^{\sigma} - 1 + \frac{1}{4} G_{\alpha n}^{\sigma}. \quad (2.41)$$

Der inverse effektive lokale Propagator eines Elektrons auf dem Untergitter α hängt folglich nur von der Green-Funktion des Gitters $\bar{\alpha}$ ab:

$$\mathcal{G}_{\alpha n}^{\sigma} - 1 = G_{\alpha n}^{\sigma} - 1 + \Sigma_{\alpha n}^{\sigma} = i\omega_n + \mu - \frac{1}{4}G_{\bar{\alpha}n}^{\sigma} \quad (2.42)$$

Damit ist es möglich, die Selbstenergie aus Gleichung (2.34) zu eliminieren:

$$G_{\alpha n}^{\sigma} = G_{\alpha n}^{\sigma}[\mathcal{G}] = \frac{1}{Z_{\alpha}} \int \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\Psi^* \Psi_n^{\sigma*} \Psi_n^{\sigma} e^{\mathcal{A}_{\alpha}(\Psi, \Psi^*, G)} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\alpha}(\Psi, \Psi^*, G) &= \sum_{\sigma n} \Psi_n^{\sigma*} \left\{ i\omega_n + \mu - \frac{1}{4}G_{\bar{\alpha}n}^{\sigma} \right\} \Psi_n^{\sigma} \\ &\quad - U \int_0^{\beta} d\tau \Psi_{\uparrow}^*(\tau) \Psi_{\uparrow}(\tau) \Psi_{\downarrow}^*(\tau) \Psi_{\downarrow}(\tau) \end{aligned} \quad (2.44)$$

Diese Gleichung kann direkt iterativ gelöst werden. Die Selbstenergie erhält man anschließend über Gleichung (2.41) oder über die modifizierte Dyson-Gleichung (2.35).⁹

⁹Der im nächsten Kapitel vorgestellte Algorithmus nutzt diese Vereinfachung nicht aus.

Kapitel 3

Methoden

Neben den im folgenden beschriebenen numerischen Methoden wurden in dieser Arbeit auch Rechnungen in der in Kapitel 2 schon erwähnten Hartree-Fock-Näherung durchgeführt. Diese Standard-Methode wird in einschlägigen Lehrbüchern beschrieben. Es werden auch Vergleiche mit Aussagen des tJ -Modells angestellt. In diesem Modell, welches den Grenzfall $U \rightarrow \infty$ des Hubbard-Modells nahe halber Füllung beschreibt, sind Doppelbesetzungen aus dem Zustandsraum herausprojiziert. Bei halber Bandfüllung erhält man als effektives Modell das Heisenberg-Modell. Die Kopplungskonstante wird in (4.27) angegeben. Eine schöne Einführung findet sich in [Vol94].

3.1 Quanten-Monte-Carlo Algorithmus

Im Limes unendlicher Dimensionen konnte in Kapitel 2 eine exakte Abbildung des Hubbard-Modells auf ein System von zwei Gleichungen (2.34) und (2.35), deren letztere ein kompliziertes Funktionalintegral enthält, angegeben werden. Diese Gleichungen erlauben im Prinzip die Bestimmung von Selbstenergie Σ und Ein-Teilchen-Green-Funktion G .¹ Wären diese Gleichungen allgemein, insbesondere also unter Berücksichtigung aller Matsubara-Frequenzen ω_n lösbar, so ließen sich zumindest alle Ein-Teilchen-Größen sofort angeben.

Wie im folgenden dargestellt wird, kann eine Lösung tatsächlich numerisch bestimmt werden, dabei muß allerdings eine Diskretisierung der imaginären Zeit in Intervalle $\Delta\tau$ eingeführt werden. In der diskreten Form der Fourier-Transformation kann daher nur eine endliche Zahl von Matsubara-Frequenzen berücksichtigt werden. Für $\Delta\tau \rightarrow 0$ passiert zweierlei: erstens konvergieren für festes ω_n die berechneten Größen $\Sigma_n \equiv \Sigma_{\omega_n}$ und G_n gegen ihre wahren Werte, zweitens geht die Anzahl der Frequenzen, für die Σ_n und G_n überhaupt berechnet werden, gegen unendlich. In Abbildung 3.1 ist diese doppelte Konvergenz illustriert.

Für statische Größen darf man wegen der Summation über die Matsubara-Frequenzen erwarten, daß der Übergang $\Delta\tau \rightarrow 0$ besonders schnell zu einer Konvergenz führt.

¹Einige Informationen zum verwendeten Formalismus sind in Anhang A zusammengestellt.

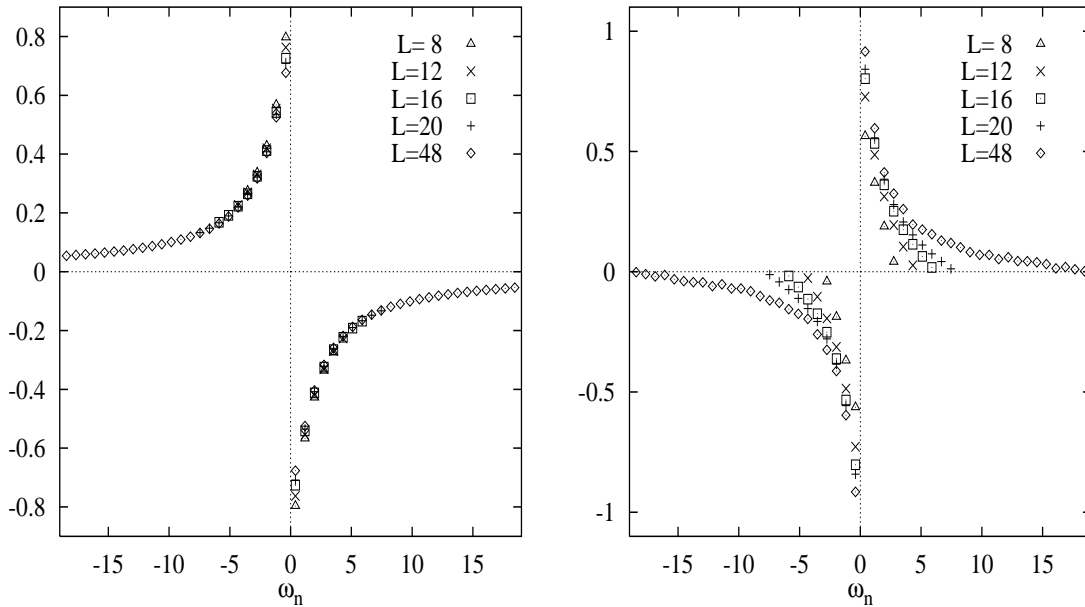


Abbildung 3.1: Imaginärteil von Ein-Teilchen-Green-Funktion und Selbstenergie bei $U = 2$, $n = 1$, $T = 1/8$, berechnet für verschiedene Anzahl L von Diskretisierungsschritten.

Insbesondere sind hier die Fehler kleiner als bei den frequenzabhängigen Größen. Daher wird die im letzten Abschnitt dieses Kapitels näher erläuterte Extrapolation immer an den untersuchten Observablen und nicht an den frequenzabhängigen Größen selbst vorgenommen.

Das für die Quanten-Monte-Carlo-Simulationen verwendete Programm stammt von M. Ulmke [Ulm95]. Es basiert auf dem Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus von Hirsch und Fye [Hir86]. Die von K. Held auf AB-Phasen verallgemeinerte Fassung [Hel95] wurde in der vorliegenden Arbeit um die Berechnung von Suszeptibilitäten bei Berücksichtigung von Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen erweitert.

3.1.1 Iterationsweg

Wie in Abschnitt 2.5 erwähnt, lassen sich die selbstkonsistent zu lösenden Gleichungen im untersuchten Fall des Bethe-Gitters zusammenfassen, so daß eine direkte Iteration möglich wäre.

Damit würden wir jedoch die Allgemeinheit bezüglich des (paaren) Gitters verlieren. Bei Rechnungen in Störungstheorie, in denen verwandte Gleichungen iteriert werden, hat sich herausgestellt, daß die direkte Iteration schlechtere Konvergenzeigenschaften hat. Ob dies hier auch gilt, müßte ein Vergleich klären. Wir gehen in diesem Kapitel davon aus, daß die Gleichungen (2.34) und (2.35) selbstkonsistent zu lösen sind. Sie

seien hier noch einmal aufgeführt:

$$G_{\alpha n}^{\sigma} \stackrel{(2.34)}{=} \frac{1}{Z_{\alpha}} \int \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\Psi^* \Psi_n^{\sigma*} \Psi_n^{\sigma} e^{\mathcal{A}_{\alpha}(\Psi, \Psi^*, \Sigma, G)} \stackrel{(2.35)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) \frac{z_{\alpha n}^{\sigma}}{z_{A_n}^{\sigma} z_{B_n}^{\sigma} - \epsilon^2}$$

mit

$$\begin{aligned} z_{\alpha n}^{\sigma} &= i\omega_n + \mu - \Sigma_{\alpha n}^{\sigma} \\ \mathcal{A}_{\alpha}(\Psi, \Psi^*, \Sigma, G) &= \sum_{\sigma n} \Psi_n^{\sigma*} \{G_{\alpha n}^{\sigma}{}^{-1} + \Sigma_{\alpha n}^{\sigma}\} \Psi_n^{\sigma} - U \int_0^{\beta} d\tau \Psi_{\uparrow}^*(\tau) \Psi_{\uparrow}(\tau) \Psi_{\downarrow}^*(\tau) \Psi_{\downarrow}(\tau) \end{aligned}$$

Gleichungen (2.34) und (2.35) sind nach den Ein-Teilchen-Green-Funktion aufgelöst, weshalb eine direkte Iteration nicht möglich ist. Da die Wirkung \mathcal{A} aber nur von dem inversen effektiven Propagator \mathcal{G}^{-1} abhängt, läßt sich folgendermaßen eine geschlossene Iteration ausführen:

1. Zunächst wählt man eine Selbstenergie. Dies kann die Selbstenergie des nicht wechselwirkenden Systems, eine symmetriebrochene Selbstenergie oder, um Iterationen zu sparen, die Selbstenergie für einen ähnlichen Parametersatz sein.
2. Mit Hilfe der Selbstkonsistenzgleichung (2.35) berechnet man die Green-Funktion.
3. Aus Selbstenergie und Green-Funktion erhält man die inverse effektive Green-Funktion mittels der Hilfsgleichung

$$\mathcal{G}^{-1} = G^{-1} + \Sigma. \quad (3.1)$$

4. Das so definierte lokale Problem wird mit dem im folgenden beschriebenen Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus gelöst, das heißt, die Ein-Teilchen-Green-Funktion wird berechnet, man erhält ein neues G .
5. Dieselbe Hilfsgleichung (3.1) liefert aus diesem neuen G und dem alten \mathcal{G}^{-1} wieder eine Selbstenergie Σ .

Nach einem ersten Durchlauf kann das Verfahren mit dem zweiten Punkt fortgesetzt werden. Es wird (bei gegebenem $\Delta\tau$) bis zur numerischen Konvergenz wiederholt. Diese wird an der Änderung der Selbstenergie von einem Durchlauf zum nächsten gemessen.

3.1.2 Lösung des lokalen Problems

Zeitdiskretisierung und Hubbard-Stratonovich-Transformation

Wie man physikalisch leicht einsieht, hängt die Schwierigkeit bei der Lösung des lokalen Problems mit dem Wechselwirkungsterm U zusammen. In Abwesenheit dieses Terms

wäre die Zustandssumme durch eine Gauß-Integration zu erhalten, welche auch bei Graßmann-Variablen leicht durchzuführen ist.

Der Plan ist nun, diesen störenden Zwei-Fermionen-Term, der also quartisch in den Graßmann-Variablen ist, durch eine Gauß-Transformation, hier der diskreten Hubbard-Stratonovich-Transformation [Hir83], loszuwerden. Dazu muß der Term jedoch allein im Exponenten stehen. Dies wird durch die Trotter-Suzuki-Zerlegung [Tro59, Suz76] bewirkt, die wir zunächst besprechen wollen.

Allgemein bekannt ist die Campbell-Baker-Hausdorff-Formel (A, B seien Matrizen oder Operatoren):

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]+\dots} \quad (3.2)$$

Es treten also Kommutatoren auf. Die Trotter-Formel weist einen Weg der Entkoppelung:

$$e^{A+B} = \lim_{L \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{A}{L}} e^{\frac{B}{L}} \right)^L \quad (3.3)$$

Es bietet sich an, die Zerlegung des Hamilton-Operators mit einer Zeitdiskretisierung zu verbinden, die ohnehin notwendig ist, um das Integral über die imaginäre Zeit zu behandeln. Dazu führen wir eine Zeitdiskretisierung $\tau = l\Delta\tau$ (l ganzzahlig) ein mit

$$\Delta\tau = \frac{\beta}{L} \quad (3.4)$$

(L ist die Anzahl der Zeitschritte) und schreiben die Wirkung ganz in der imaginären Zeit:²

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\alpha(\Psi, \Psi^*, \mathcal{G}) &= \Delta\tau^2 \sum_{\sigma, l, l'=0}^{L-1} \Psi_{\alpha l}^\sigma * \mathcal{G}_\alpha^{\sigma-1}(l\Delta\tau - l'\Delta\tau) \Psi_{\alpha l'}^\sigma \\ &\quad - \Delta\tau U \sum_{l=0}^{L-1} \Psi_{\alpha l}^\uparrow * \Psi_{\alpha l}^\uparrow * \Psi_{\alpha l}^\downarrow * \Psi_{\alpha l}^\downarrow \end{aligned} \quad (3.5)$$

Wir führen die Abkürzung

$$\mathcal{G}_{\alpha ll'}^\sigma := \mathcal{G}_\alpha^\sigma(l\Delta\tau - l'\Delta\tau) \quad (3.6)$$

ein und nehmen eine Trotter-Suzuki-Zerlegung [Tro59, Suz76] vor:

$$\exp(\mathcal{A}_\alpha(\Psi, \Psi^*, \mathcal{G})) \approx \prod_{l=0}^{L-1} \left(\exp \left(\Delta\tau^2 \sum_{\sigma} \Psi_{\alpha l}^\sigma * \mathcal{G}_{\alpha ll'}^\sigma \Psi_{\alpha l'}^\sigma \right) \exp \left(-\Delta\tau U \Psi_{\alpha l}^\uparrow * \Psi_{\alpha l}^\uparrow * \Psi_{\alpha l}^\downarrow * \Psi_{\alpha l}^\downarrow \right) \right) \quad (3.7)$$

²Die diskrete Form der Fourier-Transformation ist im Anhang A angegeben. Tatsächlich wird im Programm bei der Fourier-Transformation eine Glättung vorgenommen. Dieses von M. Ulmke entwickelte Verfahren [Ulm95] verhindert, daß die zeitdiskretisierten Green-Funktionen um den Grenzwert für $\Delta\tau \rightarrow 0$ oszillieren. Dabei wird ausgenutzt, daß die im folgenden abgeleiteten Gleichungen ohnehin nur in führender Ordnung in $\Delta\tau$ korrekt sind: Im Limes $\Delta\tau \rightarrow 0$ verschwindet auch der mit der Glättung verbundene Fehler. Zusätzlich ist das Verfahren für jedes $\Delta\tau$ im atomaren Grenzfall $t^* \rightarrow 0$ korrekt.

An dieser Stelle ist es sinnvoll, das chemische Potential zu renormieren, d.h. um $U/2$ zu verschieben:³

$$\begin{aligned} U n_i^\uparrow n_i^\downarrow - \mu(n_i^\uparrow + n_i^\downarrow) &\longrightarrow U(n_i^\uparrow n_i^\downarrow - \frac{1}{2}(n_i^\uparrow + n_i^\downarrow)) - \tilde{\mu}(n_i^\uparrow + n_i^\downarrow) \\ &= -\frac{U}{2}(n_i^\uparrow - n_i^\downarrow)^2 - \tilde{\mu}(n_i^\uparrow + n_i^\downarrow) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Die Gleichheit zur 2. Zeile folgt aus der Idempotenz $(n_i^\sigma)^2 = n_i^\sigma$ der Zähloperatoren.

Jetzt sind wir in der Lage, die Hubbard-Stratonovich-Transformation durchzuführen. Die kontinuierliche Form entspricht einer Gauß-Transformation:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \frac{\Delta\tau U}{2} (\Psi_{\alpha l}^\uparrow * \Psi_{\alpha l}^\uparrow - \Psi_{\alpha l}^\downarrow * \Psi_{\alpha l}^\downarrow)^2 \right\} &= \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta\tau U}} \int ds_l \exp \left\{ -\frac{s_l^2}{2\Delta\tau U} - (\Psi_{\alpha l}^\uparrow * \Psi_{\alpha l}^\uparrow - \Psi_{\alpha l}^\downarrow * \Psi_{\alpha l}^\downarrow) s_l \right\} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Da die Graßmann-Variablen $\Psi_{\alpha l}^\sigma$ jeweils nur in einem Produkt auftreten, welches dem Zähloperator n_α^σ entspricht, ist eine Transformation genau dann korrekt, wenn sie für jeden Eigenwert der Zähloperatoren (0 und 1) korrekt ist. Durch Einsetzen verifiziert man, daß diese Bedingung für folgende diskrete Form der Hubbard-Stratonovich-Transformation erfüllt ist:

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \frac{\Delta\tau U}{2} (\Psi_{\alpha l}^\uparrow * \Psi_{\alpha l}^\uparrow - \Psi_{\alpha l}^\downarrow * \Psi_{\alpha l}^\downarrow)^2 \right\} &= \frac{1}{2} \sum_{s_l = \pm 1} \exp \left\{ \Delta\tau \lambda (\Psi_{\alpha l}^\uparrow * \Psi_{\alpha l}^\uparrow - \Psi_{\alpha l}^\downarrow * \Psi_{\alpha l}^\downarrow) s_l \right\} \\ &\text{mit } \cosh(\Delta\tau \lambda) = \exp(\Delta\tau U/2) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Die Hilfsvariable s_l , deren Benutzung erlaubt, einen hyperbolischen Kosinus als Summe von Exponentialfunktionen zu schreiben, nimmt nur die Werte ± 1 an. Einerseits wirken die Hilfsvariablen auf die Fermionenoperatoren wie ein Magnetfeld, andererseits lassen sie sich bei gegebenen Fermionenoperatoren als klassische Ising-Spins im Magnetfeld interpretieren.

Indem wir jetzt die Trotter-Suzuki-Zerlegung (3.7) nochmals anwenden, erhalten wir das folgende Funktionalintegral für die Ein-Teilchen-Green-Funktion

$$G_{\alpha ll'}^\sigma = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \int \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\Psi^* \Psi_{\alpha l_1}^\sigma * \Psi_{\alpha l_2}^\sigma \exp \left\{ \sum_{\alpha\sigma ll'} \Psi_{\alpha l}^\sigma * M_{\alpha ll'}^\sigma \{s_i\} \Psi_{\alpha l'}^\sigma \right\}, \quad (3.11)$$

mit

$$M_{\alpha ll'}^\sigma \{s_i\} = \Delta\tau^2 \mathcal{G}_{\alpha ll'}^\sigma{}^{-1} - \Delta\tau \delta_{ll'} \lambda \sigma s_l. \quad (3.12)$$

Die Anwendung des Wickschen Theorems (siehe z.B. [Neg88]) auf jeden Summanden liefert das Resultat

$$\mathbf{G}_\alpha^\sigma = \frac{1}{Z_\alpha} \sum_{\{s_i = \pm 1\}} (\mathbf{M}_\alpha^\sigma \{s_i\})_{ll'}^{-1} \det \mathbf{M}_\alpha^\uparrow \{s_i\} \det \mathbf{M}_\alpha^\downarrow \{s_i\}. \quad (3.13)$$

³Diese Verschiebung hat auch den Vorteil, daß $\tilde{\mu} = 0$ für alle U der halben Füllung entspricht.

Die fettgedruckten Größen bezeichnen Matrizen, die durch ihre Komponenten definiert sind, wie z.B.

$$(\mathbf{G}_\alpha^\sigma)_{ll'} = G_{\alpha ll'}^\sigma = G_\alpha^\sigma(l\Delta\tau - l'\Delta\tau). \quad (3.14)$$

Das komplizierte Funktionalintegral ist durch Einführung der Zeitdiskretisierung also auf eine einfache Summe von Matrizen zurückgeführt worden. Da über jede Konfiguration der L Ising-Spins summiert wird, sind dabei allerdings 2^L Terme zu addieren. Bei naiver Implementation müßten für jeden Term eine $L \times L$ -Matrix invertiert und zwei Determinanten berechnet werden. Der Aufwand für jeden Summanden wäre damit proportional zu L^3 . Im nächsten Abschnitt wird ein Verfahren zur Reduktion der Ordnung auf L^2 beschrieben.

Schon an dieser Stelle sei auch die im folgenden noch benötigte Zustandssumme angegeben:

$$\mathcal{Z}_\alpha = \sum_{\{s_l = \pm 1\}} \det \mathbf{M}_\alpha^{\uparrow\{s_l\}} \det \mathbf{M}_\alpha^{\downarrow\{s_l\}} \quad (3.15)$$

Die Zwei-Teilchen-Green-Funktion läßt sich analog ausdrücken. Sie wird erst in Abschnitt 3.2 definiert und mit Hilfe der Matrizen $\mathbf{M}_\alpha^{\sigma\{s_l\}}$ dargestellt.

Aufdatierung der Matrizen

Zumindest bei vollständiger Summation (das heißt, alle Summanden werden tatsächlich berechnet) steht es frei, die Summe über die Hilfsspins in Gleichung (3.13) so anzuordnen, daß von einem Summanden zum nächsten nur ein Hilfsspin s_m umgeklappt wird. Für die Matrizen $\mathbf{M}_\alpha^{\sigma\{s_l\}}$ (mit Komponenten l_1, l_2), deren Untergitter- und Spinkonfigurationsabhängigkeit wir im Augenblick unterdrücken wollen, bedeutet das ([Bla81]):

$$\mathbf{M}^\sigma \quad s_m \rightleftharpoons s_m \quad \mathbf{M}^{\sigma'} = \mathbf{M}^\sigma + \mathbf{\Delta}^{\sigma m} \quad (3.16)$$

$$= \left(1 + \mathbf{\Delta}^{\sigma m} (\mathbf{M}^\sigma)^{-1}\right) \mathbf{M}^\sigma \quad (3.17)$$

$$\text{mit} \quad \Delta_{ll'}^{\sigma m} = \delta_{ll'} \delta_{lm} 2\Delta\tau \lambda \sigma s_l \quad (3.18)$$

Das Verhältnis der Determinanten von neuer und alter Matrix läßt sich aus der Kenntnis der Inversen der alten Matrix leicht bestimmen:⁴

$$\begin{aligned} R^{\sigma m} &:= \frac{\det(\mathbf{M}^{\sigma'})}{\det(\mathbf{M}^\sigma)} = \det \left(1 + \mathbf{\Delta}^{\sigma m} (\mathbf{M}^\sigma)^{-1}\right) \\ &= 1 + 2\Delta\tau \lambda \sigma s_m (\mathbf{M}^\sigma)^{-1}_{mm} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die Inversion von \mathbf{M} ist ebenfalls elementar, man erhält:

$$(\mathbf{M}^{\sigma'})^{-1} = (\mathbf{M}^\sigma)^{-1} + \frac{1}{R^{\sigma m}} (\mathbf{M}^\sigma)^{-1} \mathbf{\Delta}^{\sigma m} (\mathbf{M}^\sigma)^{-1} \quad (3.20)$$

⁴Da $\mathbf{\Delta}^{\sigma m}$ nur ein nichtverschwindendes Element hat, ist $\mathbf{\Delta}^{\sigma m} (\mathbf{M}^\sigma)^{-1}$ nur in Zeile m von Null verschieden. Die Determinante von $1 + \mathbf{\Delta}^{\sigma m} (\mathbf{M}^\sigma)^{-1}$ ist folglich gleich dem Produkt ihrer Diagonalelemente.

Der Aufwand für die Neuberechnung eines Summanden von (3.13) nach einem Spinflip ist damit auf $\mathcal{O}(L^2)$ reduziert worden.

Die vollständige Summation ist also ein Verfahren mit in L exponentiell steigendem Aufwand der Ordnung $\mathcal{O}(2^L L^2)$ und nur für kleine Werte von L anwendbar. In dieser Arbeit wurde die vollständige Summation bis zu $L = 20$ angewendet. Wie man leicht nachrechnet, wird es auch in näherer Zukunft praktisch unmöglich sein, die Summation z.B. bei $L = 30$ auszuführen und damit dem Ziel $\Delta\tau \rightarrow 0$ ein wenig näher zu kommen.

Importance sampling mit dem Metropolis-Algorithmus

Die Analogie zum klassischen Ising-Modell im Magnetfeld legt nahe, die Summe (3.13) mit numerischen Verfahren abzuschätzen, welche sich in Spinmodellen bewährt haben. Eine stochastische Form der Auswertung, welche dem Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus seinen Namen gibt, reduziert die Ordnung des Verfahrens auf $\mathcal{O}(L^3)$ und soll nun dargestellt werden.

Allgemein wird Monte-Carlo-Summation verwendet, um Summen des Typs

$$S = \sum_{i=1}^I x_i \quad (3.21)$$

aufzusummieren. In unserem Problem wäre $I = 2^L$. Der wesentliche Gedanke besteht darin, die Summanden x_i in einen Observablenanteil o_i und einen Gewichtungsfaktor p_i aufzuteilen. Dann werden statistisch unabhängig N Indizes i_n so ausgewählt, daß ihre Wahrscheinlichkeitsverteilung diesen Gewichtungsfaktoren entspricht:

$$P(i_n) = p_i, \quad p_i \geq 0 \quad \text{und} \quad \sum_i p_i = 1 \quad (3.22)$$

Für diese Indizes wird der Mittelwert aus den zugehörigen Observablen o_i gebildet. Es gilt:

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N o_{i_n} \quad (3.23)$$

Wählt man eine Gleichverteilung, setzt also $p_i = 1/M$ (konstant), $o_i = Mx_i$, so ist die Realisierung der Wahrscheinlichkeitsverteilung einfach. Falls die Summe aber sehr unterschiedlich große Werte enthält, werden die aus Teilsummen gebildeten Mittelwerte i.a. stark fluktuieren, die Konvergenz ist schlecht.

Das andere Extrem, die Wahl $o_i = \text{konst.}$, wird i.a. nicht möglich sein, da man zur Normierung die gesuchte Summe schon kennen müßte. Jede Teilsumme wäre hier konstant, also gleich S .

Bei unserem Problem, der Berechnung von (3.13),

$$\mathbf{G}_\alpha^\sigma = \frac{1}{Z_\alpha} \sum_{\{s_i = \pm 1\}} (\mathbf{M}_\alpha^{\sigma\{s_i\}})^{-1} \det \mathbf{M}_\alpha^{\uparrow\{s_i\}} \det \mathbf{M}_\alpha^{\downarrow\{s_i\}} \quad (3.24)$$

wird die Wahl von Observablen- und Wahrscheinlichkeitsanteil durch die Beobachtung erleichtert, daß die Zustandssumme (wie schon erwähnt) folgende Form hat:

$$\mathcal{Z}_\alpha = \sum_{\{s_l = \pm 1\}} \det \mathbf{M}_\alpha^{\uparrow\{s_l\}} \det \mathbf{M}_\alpha^{\downarrow\{s_l\}} \quad (3.25)$$

Folglich ist die Wahl

$$P_\alpha^{\{s_l\}} = \frac{1}{\mathcal{Z}_\alpha} \det \mathbf{M}_\alpha^{\uparrow\{s_l\}} \det \mathbf{M}_\alpha^{\downarrow\{s_l\}}, \quad \mathbf{O}_\alpha^{\{s_l\}} = (\mathbf{M}_\alpha^{\sigma\{s_l\}})^{-1} \quad (3.26)$$

naheliegender. Die Normierungsbedingung für die Wahrscheinlichkeiten ist offensichtlich erfüllt. Die Positivität der $P_\alpha^{\{s_l\}}$ wird zwar beobachtet, konnte aber bisher noch nicht analytisch gezeigt werden.⁵

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung wird durch einen Markov-Prozeß realisiert. Ein solcher Prozeß liefert im Grenzwert unendlicher Dauer immer dann die richtige Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x)$, wenn er ergodisch⁶ ist und für die Folge der erzeugten Konfigurationen das *detaillierte Gleichgewicht*

$$P(x)P(x \rightarrow y) = P(y)P(y \rightarrow x) \quad (3.27)$$

erfüllt. Bei dem Metropolis-Algorithmus [Met53] wird die Abfolge der Konfigurationen dadurch gebildet, daß jeweils nur ein Spin umgeklappt wird. Dazu werden in einem Durchgang (*sweep*) der Reihe nach alle Spins „getestet“, das heißt, es wird die Energiedifferenz zwischen den beiden möglichen Spineinstellungen berechnet. Das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten der beiden Zustände ist gleich dem Boltzmann-Faktor. Der Spin wird mit einer Wahrscheinlichkeit

$$P(x \rightarrow y) = \min \left\{ 1, \frac{P(y)}{P(x)} \right\} \quad (3.28)$$

umgeklappt.

Der Metropolis-Algorithmus ist in dieser Form für unser Problem besonders geeignet, da sich das in Gleichung (3.28) auftretende Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten bei nur einem umgeklappten Spin gemäß den Gleichungen (3.19) und (3.20) leicht berechnen läßt. Ein Nachteil ist, daß es insbesondere in der Nähe von Phasenübergängen zweiter Ordnung zu einem sogenannten *critical slowing down* kommen kann. Darunter versteht man den Umstand, daß die Anzahl der *sweeps*, die notwendig sind, um den relevanten Bereich des Phasenraums abzutasten, gegen unendlich geht. Die in klassischen Modellen angewendeten Cluster-Algorithmen, bei denen jeweils sehr viele Spins gleichzeitig geklappt werden, können dieses Problem im Prinzip umgehen, werden aber (bisher) im Programm wegen des hohen Aufwands für die völlige Neuberechnung der Determinanten nicht verwendet.

⁵Zur Implementierung im Programm vgl. Abschnitt 3.1.3.

⁶Als ergodisch bezeichnet man einen Prozeß, wenn er jedem Punkt im Phasenraum beliebig nahe kommt.

Bei der Simulation endlichdimensionaler fermionischer Systeme erhält man häufig große relative Fehler durch Auslöschung positiver und negativer Terme [Whi89]. Diese als Vorzeichenproblem bekannte Schwierigkeit tritt im Limes hoher Dimensionen nicht auf [Ulm95].

3.1.3 Details zur Implementation

An dieser Stelle sollen einige technische Details der praktischen Implementation des oben vorgestellten Algorithmus angesprochen werden.

Die Berechnung der Green-Funktion und Selbstenergie sowie von Ein-Teilchen-Observablen (Magnetisierung, Dichte, ggf. *staggered* Magnetisierung etc.) erfolgt in zeitdiskretisierter Form mit dem von M. Ulmke [Ulm95] geschriebenen und von K. Held [Hel95] sowie in dieser Arbeit erweiterten FORTRAN-Programm. Für die Untersuchungen im erweiterten Hubbard-Modell wurden innerhalb des Programms außerdem Suszeptibilitäten bestimmt und jeweils ein kritischer Wert F_c für den Übergang zur ferro- bzw. zur antiferromagnetischen Phase ermittelt (vergleiche Abschnitt 3.2 und Kapitel 4). Dieser sehr rechenintensive Teil der Untersuchungen wurde auf der CRAY Y-MP 8 der KFA Jülich bzw. auf DEC ALPHA Workstations durchgeführt.

Die weitere Auswertung, also die Auswahl und ggf. statistische Mittelung der Rohdaten, und die Extrapolation $\Delta\tau \rightarrow 0$ erfolgte mit in dieser Arbeit erstellten C-Programmen interaktiv und benötigte nur vernachlässigbar wenig Rechenzeit. Sie wird im Abschnitt 3.3 angesprochen.

In Abschnitt 3.1.2 wurde die Monte-Carlo-Auswertung von Gleichung (3.13) für den Fall dargestellt, daß die Summanden in der Zustandssumme (3.25) positiv sind und daher direkt als Wahrscheinlichkeiten interpretiert werden können. Dies wird im Programm nicht vorausgesetzt. Statt dessen wird ein eventuell vorhandenes Vorzeichen der Observablen zugeschlagen und der Term durch seinen Betrag

$$P_\alpha^{\{s_l\}} = \frac{1}{\mathcal{Z}_\alpha} \left| \det \mathbf{M}_\alpha^{\uparrow\{s_l\}} \det \mathbf{M}_\alpha^{\downarrow\{s_l\}} \right| \quad (3.29)$$

ersetzt. Dann stimmt aber im allgemeinen die Normierung nicht mehr. Deswegen wird auch der Faktor $1/\mathcal{Z}_\alpha$ nicht explizit berechnet, sondern der Normierungsfaktor c nachträglich über die Beziehung

$$\langle 1 \rangle = c \left| \det \mathbf{M}_\alpha^{\uparrow\{s_l\}} \det \mathbf{M}_\alpha^{\downarrow\{s_l\}} \right| \stackrel{!}{=} 1 \quad (3.30)$$

berechnet.

Die für jeden Monte-Carlo-Schritt benötigten (im Intervall $[0, 1]$ gleichverteilten) Pseudo-Zufallszahlen⁷ werden mit einem einfachen, 1969 von Lewis, Goodman und Miller vorgeschlagenen Algorithmus (siehe [Fla94], S. 278) bestimmt:

$$I_{j+1} = aI_j \pmod{m} \quad (3.31)$$

$$a = 7^5 = 16807, \quad m = 2^{31} - 1 = 2147483647 \quad (3.32)$$

⁷Die Glieder einer Folge mit fester Iterationsvorschrift lassen sich natürlich nicht als zufällig bezeichnen. Sie können allenfalls Eigenschaften von Zufallszahlen nachbilden, also zufällig erscheinen.

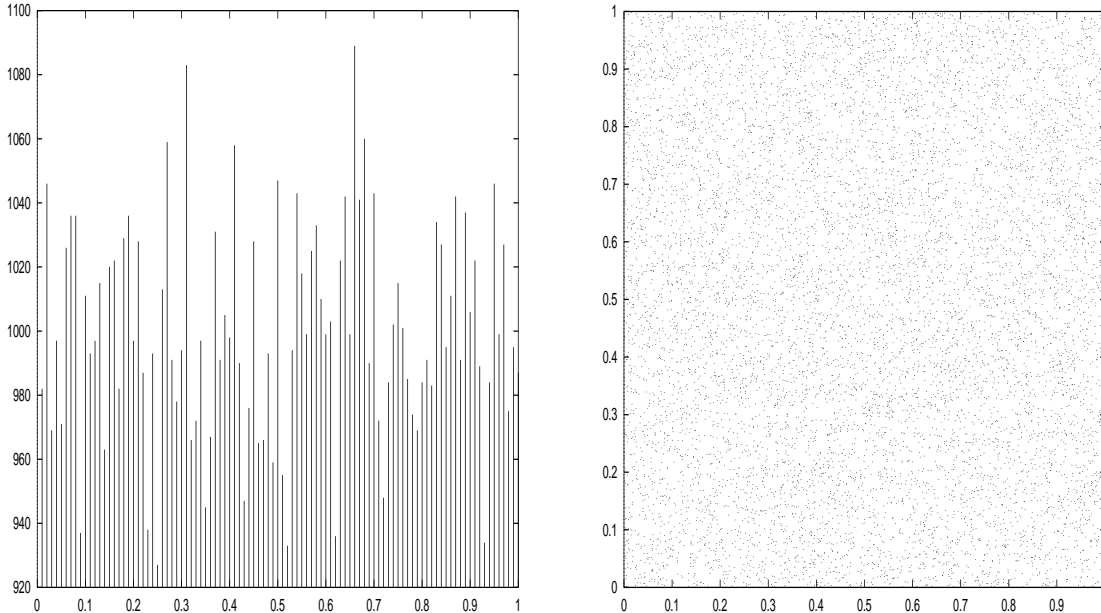


Abbildung 3.2: Tests für die verwendeten Zufallszahlen. Links: Histogramm bei 10000 erzeugten Zahlen, rechts Paarverteilung bei 100000 Zahlen.

Der Startwert I_0 wird im Programm immer gleich gewählt (und nicht etwa quasizufällig z.B. durch die Systemzeit bestimmt), um wiederholbare Resultate zu erzielen. Die Ergebnisse von zwei einfachen Tests der Zufallszahlen sind in Abbildung 3.2 dargestellt: Links ist die Verteilung der Zahlen in einem Histogramm aufgetragen. Man beachte, daß längs der Ordinate nur ein kleiner Ausschnitt dargestellt ist. In der rechts gezeigten Paarverteilung entspricht jeder Punkt einem Paar (I_j, I_{j+1}) aufeinander folgender Zufallszahlen. Beide Verteilungen entsprechen denen unkorrelierter Zufallszahlen.

Das Programm bietet in der jetzigen Fassung folgende Möglichkeiten:

- Simulation in der *AB*-Phase (beide Untergitter sind „frei“), Simulation in der homogenen/ferromagnetischen (die Magnetisierung beider Untergitter ist gleich) oder in der homogenen/antiferromagnetischen Phase (Magnetisierung der Untergitter entgegengesetzt).
- Bei Simulation in *AB*-Phase: Start mit räumlich homogener oder symmetriegebrochener Selbstenergie.
- Vollständige Berechnung von (3.13) oder Monte-Carlo-Summation.
- Nutzung der für einen Parametersatz bestimmten Selbstenergie als Startwert für den nächsten Parametersatz oder Neuberechnung der Selbstenergie.
- Vorgabe des chemischen Potentials μ oder der Füllung n .

- Programmlauf mit oder ohne (aufwendiger) Berechnung von Suszeptibilitäten.

Die Anzahl der bei einem Parametersatz durchgeführten Iterationen richtet sich nach dem empirisch bestimmten Fehler der Selbstenergie. Eine Minimal- bzw. Maximalanzahl kann vorgegeben werden. Bei Rechnung mit festem n kann ein Schätzwert für μ angegeben werden. μ wird erst nach einigen Iterationen angeglichen, um ein „Überschießen“ aufgrund des anfänglich großen Fehlers der Selbstenergie zu vermeiden. Dieses neu implementierte Verfahren beschleunigt die Konvergenz bei Rechnung abseits halber Bandfüllung erheblich.

Bei Rechnung in der AB -Phase wird die in einem Halbschritt (das heißt für ein Untergitter) berechnete neue Selbstenergie und Green-Funktion schon im zweiten Halbschritt verwendet. Dadurch wird gegenüber einer Aufdatierung erst nach jeder vollständigen Iteration die Konvergenz beschleunigt.

Es ist möglich, nach jedem vollen Iterationsschritt die Neuberechnete Selbstenergie mit der alten Selbstenergie zu mischen,

$$\Sigma_{\text{neu}} \leftarrow \lambda \Sigma_{\text{alt}} + (1 - \lambda) \Sigma_{\text{neu}}, \quad \lambda > 0, \quad (3.33)$$

und die Konvergenz durch Überrelaxation ($\lambda > 1$) zu beschleunigen, bzw. durch Unterrelaxation ($\lambda < 1$) die Fehler zu verkleinern. Da Überrelaxation in Verbindung mit dem im letzten Absatz beschriebenen konvergenzbeschleunigenden Verfahren problematisch ist, wurde in dieser Arbeit nur Unterrelaxation eingesetzt.

Eine wünschenswerte Erweiterung des Programms wäre die Möglichkeit, das Rechnen in homogener Phase zu erzwingen, das heißt, Green-Funktionen und Selbstenergien von up - und $down$ -Spin jeweils miteinander zu identifizieren. Das System hätte dann nur noch Freiheitsgrade im Frequenzraum und keine Möglichkeit mehr zur statischen Symmetriebrechung. Damit könnten Suszeptibilitäten des erweiterten Hubbard-Modells bei tieferen Temperaturen berechnet werden (vergleiche Kapitel 4).

Die benötigte Rechenleistung für eine Iteration wächst, wie oben erwähnt, mit der Anzahl der Diskretisierungsschritte L proportional zu L^3 . Bei $\beta = 64$ und $L = 128$ beträgt der Aufwand etwa 80 GFLOP. Insgesamt benötigten die in dieser Arbeit ausgeführten Rechnungen etwa 700 Stunden auf einem Prozessor der CRAY Y-MP sowie 2000 Stunden Rechenzeit auf ALPHA Workstations.

3.2 Berechnung von Suszeptibilitäten

Im folgenden wird die Berechnung von kommensurablen Suszeptibilitäten für das (reine) Hubbard-Modell dargestellt. Die Darstellung lehnt sich an [Hel95] an. Die in dieser Arbeit abgeleiteten Gleichungen für das erweiterte Hubbard-Modell finden sich im Anhang B.

Suszeptibilitäten wurden im Kapitel 2.3 durch die Kopplung der korrespondierenden Felder an die Ein-Teilchen-Größen definiert. Wir wollen weiterhin nur kommensurable Suszeptibilitäten betrachten, die hier noch einmal genannt seien: Kompressibilität

χ_{comp} , Ladungsdichtewellen-Suszeptibilität χ_{cdw} , ferromagnetische Suszeptibilität χ_{fm} und antiferromagnetische Suszeptibilität χ_{af} :

$$\begin{aligned}\chi_{comp} &= -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2} \\ \chi_{cdw} &= -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu_{st}^2} \\ \chi_{fm} &= -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial h^2} \\ \chi_{af} &= -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial h_{st}^2}\end{aligned}$$

Die Kopplung der Felder wurde im um äußere Kopplungen erweiterten Hamiltonian in Gleichung (2.14) definiert:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_U - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=\pm 1} \sum_{i \in \alpha} \sum_{\sigma=\pm 1} (\mu + \mu_{st}\alpha + h\sigma + h_{st}\alpha\sigma) n_{i\alpha}^\sigma \quad (3.34)$$

Die spin- und untergitterabhängigen Dichten sind direkt mit der gleichzeitigen Green-Funktion verknüpft:

$$n_{\alpha\sigma} = 1 + G_\alpha^\sigma(\tau=0) = 1 + T \sum_n G_{\alpha n}^\sigma \quad (3.35)$$

Daher gilt:

$$m_x = -\frac{1}{N} \frac{\partial \Omega}{\partial x} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\sigma} f_\alpha^{\sigma x} G_\alpha^\sigma(\tau=0) \quad (3.36)$$

$$\text{mit } f_{\alpha x}^\sigma = \begin{Bmatrix} \sigma \\ \alpha\sigma \\ 1 \\ \alpha \end{Bmatrix} \text{ für } x = \begin{Bmatrix} h \\ h_{st} \\ \mu \\ \mu_{CDW} \end{Bmatrix}. \quad (3.37)$$

Der Index x wurde eingeführt, um die in diesem Abschnitt und in Anhang B gezeigten Ableitungen gleichzeitig für die vier betrachteten Suszeptibilitäten aufschreiben zu können. Als Index geschrieben, weist x nur auf die notwendige Fallunterscheidung hin, bezeichnet aber keine Abhängigkeit von dem zugehörigen Feld!

Die Suszeptibilität läßt sich durch die Ableitung des Ordnungsparameters nach dem Feld oder die zweifache Ableitung des Großkanonischen Potentials gewinnen:

$$\chi_x = \frac{\partial m_x}{\partial x} = -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\sigma} f_\alpha^{\sigma x} \frac{\partial G_\alpha^\sigma(\tau=0)}{\partial x} = \frac{T}{2} \sum_{\alpha\sigma n} f_\alpha^{\sigma x} \frac{\partial G_{\alpha n}^\sigma}{\partial x} \quad (3.38)$$

Betrachtet man die Selbstkonsistenz-Gleichungen

$$G_{\alpha n}^\sigma \stackrel{(2.34)}{=} -\langle \Psi_{\alpha n}^\sigma \Psi_{\alpha n}^{\sigma *} \rangle \stackrel{(2.35)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) \frac{z_{\bar{\alpha}n}^\sigma}{z_{An}^\sigma z_{Bn}^\sigma - \epsilon^2}, \quad (3.39)$$

so erhält man zwei Gleichungen für die Ableitung der Green-Funktion.

Aus (2.34) folgt

$$\frac{\partial G_{\alpha n}^{\sigma}}{\partial x} = \frac{\partial G_{\alpha n}^{\sigma}}{\partial x} = T \sum_{\sigma' n'} \Gamma_{nn'}^{\alpha \sigma \sigma'} \gamma_{\alpha n'}^{\sigma' x}, \quad (3.40)$$

wobei die Zwei-Teilchen-Korrelationsfunktion durch

$$\Gamma_{nn'}^{\alpha \sigma \sigma'} = \langle \Psi_{\alpha n}^{\sigma} \Psi_{\alpha n}^{\sigma *} \Psi_{\alpha n'}^{\sigma'} \Psi_{\alpha n'}^{\sigma' *} \rangle - \delta_{\sigma \sigma'} \langle \Psi_{\alpha n}^{\sigma} \Psi_{\alpha n}^{\sigma *} \rangle \langle \Psi_{\alpha n'}^{\sigma} \Psi_{\alpha n'}^{\sigma *} \rangle \quad (3.41)$$

und die frequenzabhängige *dynamische Antwortfunktion* durch

$$\gamma_{\alpha n}^{\sigma x} = \frac{\partial}{\partial x} \{ (G_{\alpha n}^{\sigma})^{-1} + \Sigma_{\alpha n}^{\sigma} \} \quad (3.42)$$

definiert ist.

Die Zwei-Teilchen-Korrelationsfunktion berechnen wir mit dem Wickschen Theorem (die Auswertung erfolgt durch Monte-Carlo-Summation völlig analog zu den Ein-Teilchen-Größen):

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\alpha l_1}^{\sigma} \Psi_{\alpha l_2}^{\sigma *} \Psi_{\alpha l_3}^{\sigma'} \Psi_{\alpha l_4}^{\sigma' *} \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}_{\alpha}} \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \det \mathbf{M}_{\alpha}^{\uparrow \{s_i\}} \det \mathbf{M}_{\alpha}^{\downarrow \{s_i\}} \times \\ &\quad \left\{ (\mathbf{M}_{\alpha}^{\sigma \{s_i\}})^{-1}_{l_1 l_2} (\mathbf{M}_{\alpha}^{\sigma' \{s_i\}})^{-1}_{l_3 l_4} - \delta_{\sigma \sigma'} (\mathbf{M}_{\alpha}^{\sigma \{s_i\}})^{-1}_{l_1 l_4} (\mathbf{M}_{\alpha}^{\sigma \{s_i\}})^{-1}_{l_3 l_2} \right\} \end{aligned} \quad (3.43)$$

Für die dynamische Antwortfunktion leiten wir nun ein Gleichungssystem ab.

Aus der zweiten Selbstkonsistenz-Gleichung (2.35) folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_{\alpha n}^{\sigma}}{\partial x} &= \left\{ \gamma_{\alpha n}^{\sigma x} + \frac{\partial G_{\alpha n}^{\sigma}}{\partial x} - f_{\alpha x}^{\sigma} \right\} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) \{z_{\alpha n}^{\sigma} - \epsilon^2 / z_{\alpha n}^{\sigma}\}^{-2}}_{\zeta_{\alpha n}^{\sigma}} + \\ &\quad \left\{ \gamma_{\alpha n}^{\sigma x} + \frac{\partial G_{\alpha n}^{\sigma}}{\partial x} - f_{\alpha x}^{\sigma} \right\} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) \{z_{\alpha n}^{\sigma} - \epsilon^2 / z_{\alpha n}^{\sigma}\}^{-2} \epsilon^2 / (z_{\alpha n}^{\sigma})^2}_{\eta_{\alpha n}^{\sigma}} \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$\text{mit } z_{\alpha n}^{\sigma} = i\omega_n + \mu - \Sigma_{\alpha n}^{\sigma}.$$

Während (3.44) die verschiedenen Gitterplätze koppelt, mischt (3.40) die verschiedenen Spins und Matsubara-Frequenzen.

Da (3.44) in den Matsubara-Frequenzen und im Spinindex separiert, kann diese Gleichung einfach nach $\frac{\partial G}{\partial x}$ aufgelöst werden. Hierfür schreiben wir (3.44) als Matrixgleichung in den Gitterindizes:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 - \frac{\zeta_{An}^{\sigma}}{(G_{An}^{\sigma})^2} & -\frac{\eta_{An}^{\sigma}}{(G_{Bn}^{\sigma})^2} \\ -\frac{\eta_{Bn}^{\sigma}}{(G_{An}^{\sigma})^2} & 1 - \frac{\zeta_{Bn}^{\sigma}}{(G_{Bn}^{\sigma})^2} \end{pmatrix}}_{\mathbf{S}_n^{\sigma}} \begin{pmatrix} \frac{\partial G_{An}^{\sigma}}{\partial x} \\ \frac{\partial G_{Bn}^{\sigma}}{\partial x} \end{pmatrix} = - \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_{An}^{\sigma} & \eta_{An}^{\sigma} \\ \eta_{Bn}^{\sigma} & \zeta_{Bn}^{\sigma} \end{pmatrix}}_{\mathbf{T}_n^{\sigma}} \begin{pmatrix} f_A^{\sigma x} - \gamma_{An}^{\sigma x} \\ f_B^{\sigma x} - \gamma_{Bn}^{\sigma x} \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

Einsetzen von (3.40) liefert:

$$\sum_{\sigma'\alpha'n'} \left\{ \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'} T_n^{\sigma\alpha\alpha'} + T S_n^{\sigma\alpha\alpha'} \Gamma_{nn'}^{\alpha'\sigma\sigma'} \right\} \gamma_{\alpha'n'}^{\sigma'x} = \sum_{\alpha'} T_n^{\sigma\alpha\alpha'} f_{\alpha'x}^{\sigma} \quad (3.46)$$

Durch numerische Inversion einer $(4L) \times (4L)$ -Matrix kann nun γ bestimmt werden. Ist γ bekannt, so lassen sich die Suszeptibilitäten nach Gleichung (3.38) berechnen.

3.3 Extrapolation und Fehler

Bei den Untersuchungen zum Metamagnetismus (Kapitel 5) wurden Simulationen des reinen Hubbard-Modells auf dem AB -Gitter in der symmetriebrochenen Phase durchgeführt. Der metamagnetische Phasenübergang wurde direkt über das Verschwinden des Ordnungsparameters der antiferromagnetischen Phase, der *staggered* Magnetisierung m_{st} , bestimmt. Die Berechnung von Suszeptibilitäten war in diesem Fall nicht notwendig.

In der Quanten-Monte-Carlo-Simulation wurden nach Erreichen der numerischen Konvergenz noch etwa fünf Iterationen durchgeführt, um die Fehler der nach jeder Iteration ausgegebenen Werte für Magnetisierung und *staggered* Magnetisierung empirisch bestimmen zu können.

Bei hohen Temperaturen und relativ großen Werten von $\Delta\tau$ konnte die Summe (3.13) vollständig ausgeführt werden. Wegen der Abwesenheit von statistischen Fehlern war hier die Konvergenz langsamer, aber die erzielbare Genauigkeit größer. Letztere wurde durch Konvergenz von beiden Seiten des Phasenübergangs ermittelt.

Der in $\Delta\tau$ lineare Anteil des Fehlers der Green-Funktionen verschwindet bei den statistischen Ein-Teilchen-Größen aufgrund der Summation über die Matsubara-Frequenzen. Deswegen konnten die Observablen, mit ihren empirisch bekannten Fehlern gewichtet, rein quadratisch zu $\Delta\tau \rightarrow 0$ extrapoliert werden. Die Qualität des angewandten *least square fits* wurde durch einen χ^2 -Test überprüft. Praktisch war der Fehler der extrapolierten Größen $m(U, T)$ und $m_{st}(U, T)$ überwiegend von dem statistischen Fehler bzw. Konvergenzfehler der Simulationen bestimmt. Die Extrapolationen waren unproblematisch. In Abbildung 3.3 ist eine für die Untersuchungen zum Metamagnetismus typische Extrapolation dargestellt.

Die Untersuchungen zum Ferromagnetismus im erweiterten Hubbard-Modell (Kapitel 4) waren dagegen aufgrund der Methode auf relativ hohe Temperaturen beschränkt. Daher konnte ein wesentlicher Teil der Ergebnisse mit vollständiger Summation gewonnen werden. Die Konvergenz war bei diesen Simulationen in der homogenen Phase stets unproblematisch. Die aufwendigeren Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen dienten insbesondere bei halber Bandfüllung (bei der die Néel-Temperatur am höchsten ist) hauptsächlich der Bestätigung der im folgenden zu besprechenden $\Delta\tau \rightarrow 0$ -Extrapolation. Nur abseits halber Füllung, wo Temperaturen bis $T \approx 0.04$ erreichbar waren, wurden Datenpunkte allein auf der Basis von Quanten-Monte-Carlo-Simulationen bestimmt.

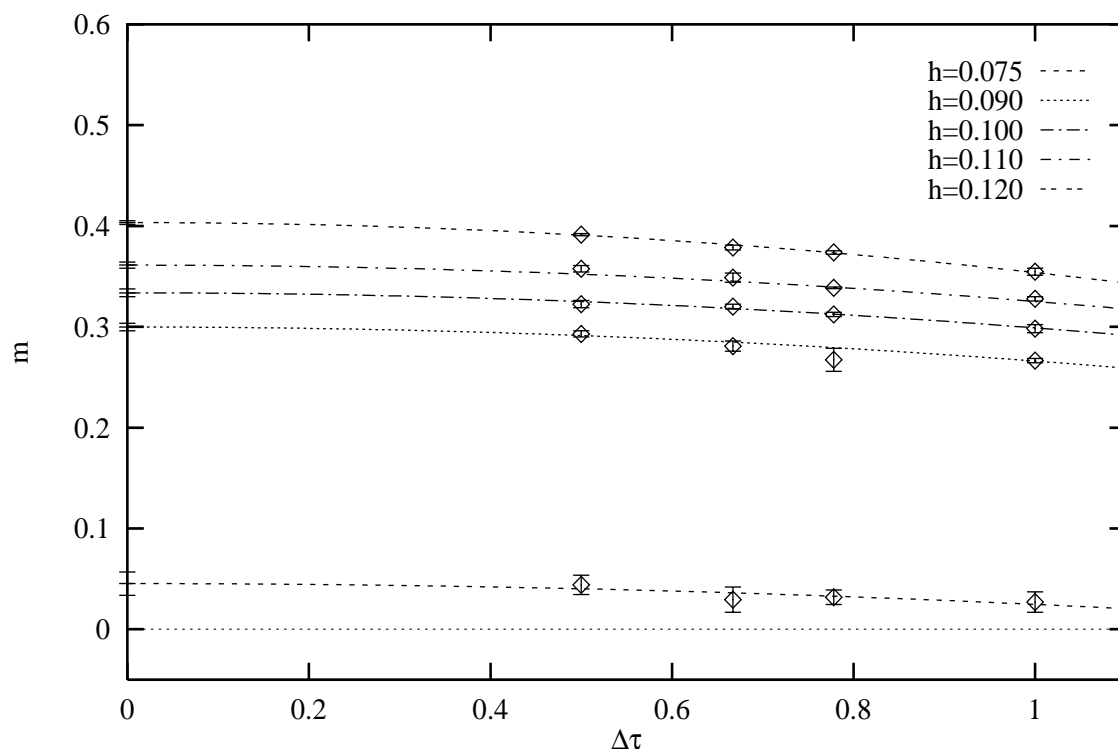


Abbildung 3.3: Extrapolation $\Delta\tau \rightarrow 0$ für die Magnetisierung im Hubbard-Modell mit Vorzugsrichtung bei $U = 1.5$, $T = 1/28$, $n = 1$.

Die Berechnung der Suszeptibilitäten wurde wegen des hohen Aufwands für jeden Parametersatz (U, n, T) des reinen Hubbard-Modells nur ein Mal durchgeführt. Entsprechend wurden die kritischen Werte von F^* bzw. V^* nur je ein Mal ermittelt. Deswegen stand ein empirischer Fehler für diese Werte nicht zur Verfügung. Ersatzweise wurde als erster Anhaltspunkt der Fehler der Selbstenergie verwendet. Eine Korrektur erfolgte iterativ während der Extrapolation $\Delta\tau \rightarrow 0$. Die Fehler wurden einheitlich so weit erhöht, bis, bildlich gesprochen, die Fehlerbalken annähernd die Fitkurven berührten. In der praktischen Ausführung des Verfahrens wurde aus der Summe der gewichteten quadratischen Abweichungen χ^2 der jeweils der Vertrauenswert (*confidence level*) ausgerechnet [Fla94]. Die Fehler wurden vergrößert, bis der Vertrauenswert von der Größenordnung 1 war.

Bei der Extrapolation der Suszeptibilitäten bzw. der kritischen Werte der Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen mußte auch der in $\Delta\tau$ lineare Term berücksichtigt werden. Gleichzeitig stellte sich wegen der starken $\Delta\tau$ -Abhängigkeit der Daten die Notwendigkeit heraus, die Extrapolation bis zur 3. Ordnung in $\Delta\tau$ zu erstrecken. Um bei der resultierenden Anzahl von vier freien Parametern zuverlässige Resultate zu erzielen, war daher für jeden extrapolierten Wert eine Simulation bei mindestens fünf Werten von $\Delta\tau$ notwendig. In Abbildung 3.4 erkennt man, daß häufig noch wesentlich mehr

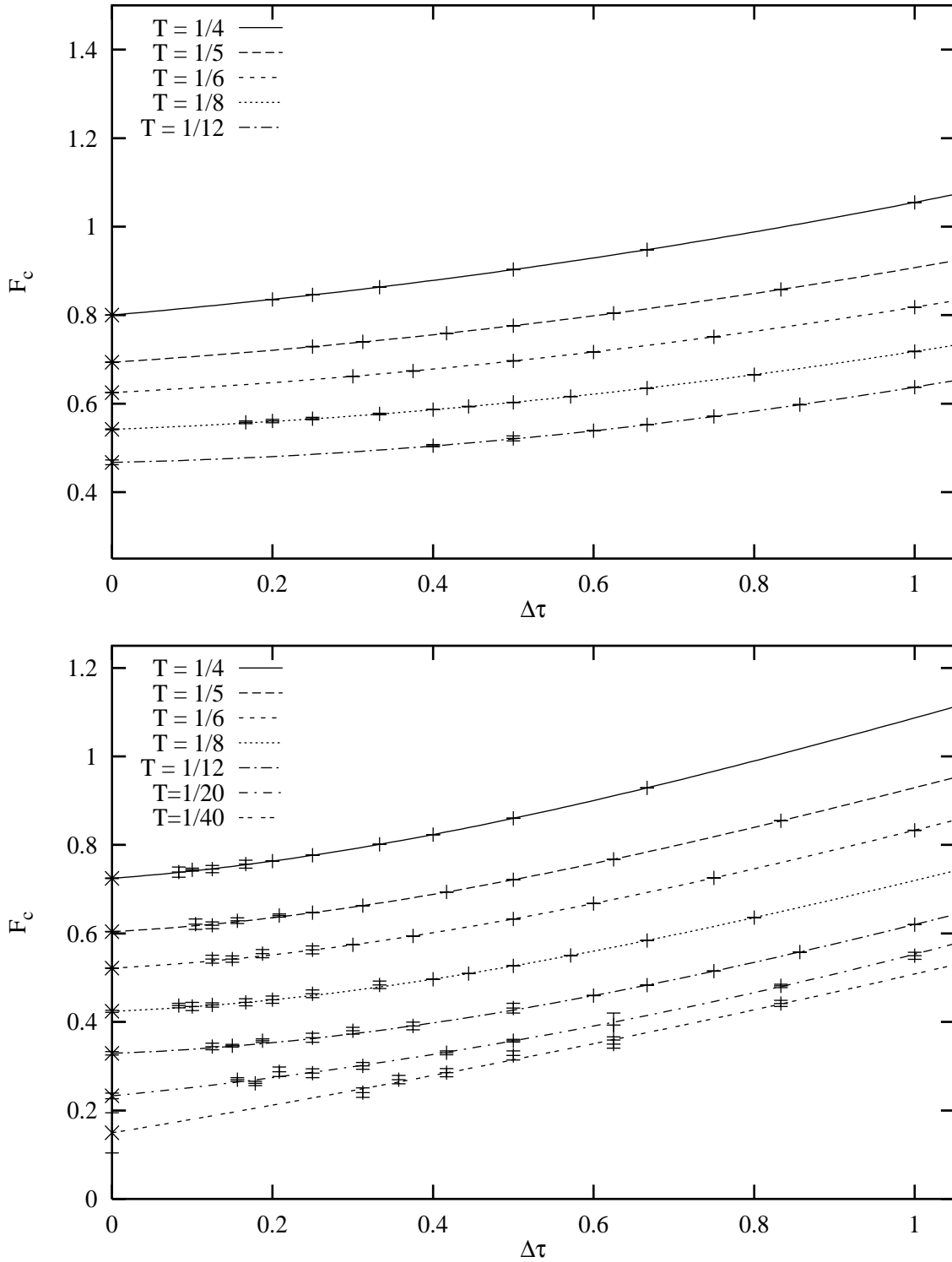


Abbildung 3.4: Extrapolation $\Delta\tau \rightarrow 0$ für die Phasengrenze zum Ferromagnetismus. Oben: $U = 2, n = 1.0$, unten: $U = 6, n = 1.2$.

Datenpunkte verwendet wurden.

Noch größer waren die Probleme bei der Extrapolation $T \rightarrow 0$. Wie in Abschnitt 4.2 dargestellt, war eine zuverlässige Extrapolation der Phasengrenze zum Antiferromagnetismus bei kleinen Werten von U nicht möglich. Bei großem U bzw. bei der Phasengrenze zum Ferromagnetismus war die Situation günstiger. Trotzdem kann man allgemein sagen, daß im Vergleich zu den Untersuchungen zum Metamagnetismus wegen des Rechnens in der homogenen Phase (weniger Freiheitsgrade) und bei relativ hohen Temperaturen (geringere Tendenz zur Symmetriebrechung) die diskretisierten Daten mit hoher Genauigkeit berechnet werden konnten. Erst die Anpassung an „falsche“ Fit-Funktionen, nämlich Polynome niedriger Ordnung, führte zu einem nennenswerten Fehler. Im Gegensatz zu dem statistischen Fehler der Quanten-Monte-Carlo-Simulation ist dieser Fehler systematisch.

Bei großen Werten von U , halber Bandfüllung und Temperaturen unterhalb $T \approx 1/8$ ist eine Quanten-Monte-Carlo-Simulation in der homogenen Phase wegen der Annäherung an den Phasenübergang zum Antiferromagnetismus im reinen Hubbard-Modell nicht mehr möglich. Da die vollständige Summation auf eine Anzahl von Diskretisierungsschritten $L \leq 20$ beschränkt ist, steigt die minimale Diskretisierung $\Delta\tau$, bis zu der simuliert werden kann, mit sinkender Temperatur an. Folglich wird die Extrapolation $\Delta\tau \rightarrow 0$ ungenauer. Bei der Extrapolation $T \rightarrow 0$ verstärkt sich dieser Fehler und führt insbesondere nahe halber Füllung zu einem verhältnismässig großen systematischen Fehler in den Größen bei $T = 0$.

In dieser Arbeit wurde viel Mühe darauf verwendet, die systematischen Fehler weitestmöglich zu reduzieren und die Größe der Fehler in den verschiedenen Stadien der Extrapolationen zuverlässig zu ermitteln.

Kapitel 4

Phasen des erweiterten Hubbard-Modells

Nach bisherigen Erkenntnissen tritt Ferromagnetismus im reinen Hubbard-Modell nur unter sehr speziellen Voraussetzungen auf. So konnte Nagaoka [Nag66] zeigen, daß der Grundzustand des Hubbard-Modells bei unendlich starker Wechselwirkung U und einem bis auf ein Loch halbgefüllten Band der voll polarisierte Ferromagnet ist. Phasen mit extensiver Magnetisierung kommen auch bei halb gefüllten bipartiten Gitter mit einer Asymmetrie in der Anzahl der Gitterplätze [Lie89] und Modellen mit flachen Bändern [Mie91, Tas92] vor. Kürzlich wurde auch Ferromagnetismus bei niedriger Elektronenkonzentration in eindimensionalen Modellen mit Hüpfen zu übernächsten Nachbarn gefunden [MH95].

Das oben erwähnte Nagaoka-Theorem konnte bisher nicht auf eine endliche Konzentration von Löchern erweitert werden. Umgekehrt wurde bei verschiedenen Gittertypen jeweils für große Bereiche des durch U und n aufgespannten Phasenraums gezeigt, daß der Nagaoka-Zustand instabil ist [Rot67, Wur95]. Eine Relevanz des Nagaoka-Mechanismus im thermodynamischen Limes ist daher fraglich. Nur für nichtpaare Gitter existieren numerische Hinweise auf eine Stabilität des voll polarisierten Zustands bei endlicher Löcherkonzentration [Sha90].

In einem um alle Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen erweiterten Hubbard-Modell (2.3) ist durch exakte Rechnungen eine Verallgemeinerung des Nagaoka-Theorems auf endliche *on site*-Wechselwirkung U möglich [Kol96]. Die dabei verwendeten Methoden sind jedoch für endliche Konzentrationen von Löchern ebenfalls nicht anwendbar. In jüngster Zeit konnte im Limes unendlicher Dimensionen bei Verwendung der singulären Zustandsdichte des *f.c.c.*-Gitters auch für das reine Hubbard-Modell Ferromagnetismus gefunden werden [Ulm96].

In diesem Kapitel untersuchen wir mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Simulationen die Bedingungen für Ferromagnetismus bei und abseits halber Füllung im erweiterten Hubbard-Modell (2.6) im Limes unendlicher Dimensionen. A priori ist schon klar, daß wir ausgehend von der homogenen Phase bei einem genügend großen Wert von F immer eine Instabilität bezüglich ferromagnetischer Symmetriebrechung finden

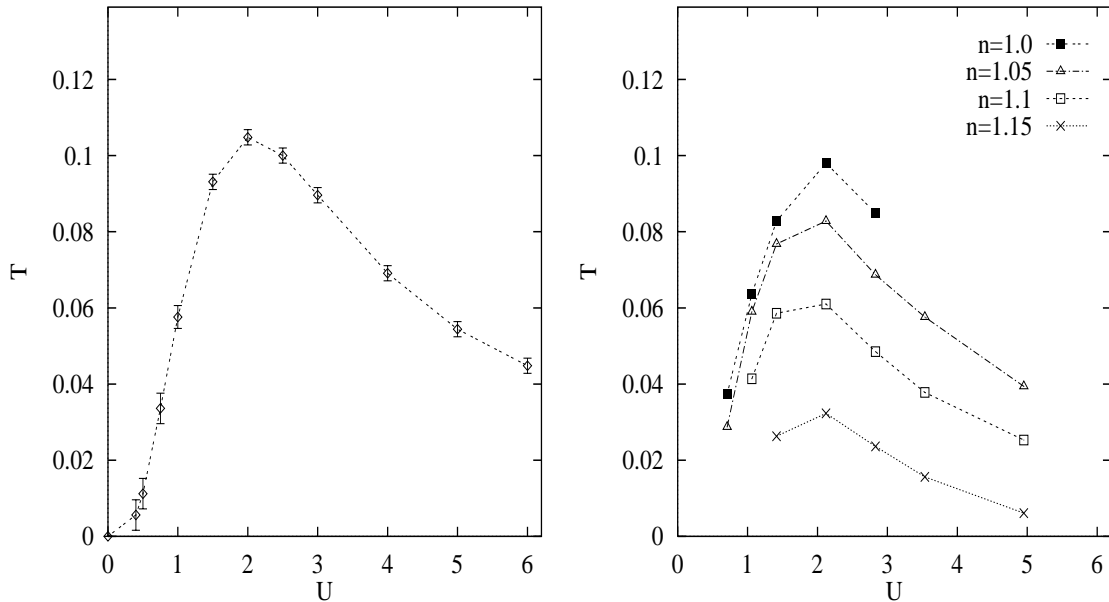


Abbildung 4.1: Phasendiagramme des reinen Hubbard-Modells. Links für ein halbgefülltes Band bei semielliptischer [Ulm95], rechts für verschiedene Füllungen bei Gaußscher Zustandsdichte (reskaliert) [Fre95].

werden. Interessant wird sein, ob die kritischen Werte von F , die wir finden, realistisch genannt werden können. Dabei sind neue Erkenntnisse bei mittleren Werten von U und insbesondere abseits halber Bandfüllung zu erwarten. Bei schwacher Hubbard-Wechselwirkung U sowie bei halber Bandfüllung und starkem U wird ein Vergleich mit analytischen Näherungen möglich sein.

Um zu entscheiden, in welchem Parameterbereich tatsächlich Ferromagnetismus auftritt, muß der Einfluß der Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen auf andere symmetriegebrochene Phasen untersucht werden. Von besonderer Wichtigkeit ist dabei, wie sich die zusätzlichen Terme auf die für das Hubbard-Modell bei halber Füllung charakteristische antiferromagnetische Phase auswirken.

In Abbildung 4.1 sind das Phasendiagramm des reinen, halbgefüllten Hubbard-Modells (links) sowie der Einfluß von Dotierung (rechts) angegeben. Die Datenpunkte sind im Limes unendlicher Dimensionen mit Quanten-Monte-Carlo-Simulationen von Ulmke [Jan93] bzw. Freericks und Jarrell [Fre95] berechnet worden. Um die Ergebnisse der zweiten Gruppe vergleichbar zu machen, wurde die Energieskala entsprechend der in dieser Arbeit verwendeten Konvention mit $1/\sqrt{2}$ multipliziert, so daß U und T_N in der Darstellung in Einheiten der halben Bandbreite ausgedrückt sind.

Man erkennt, daß Antiferromagnetismus durch Dotierung stark unterdrückt, das heißt die Néel-Temperatur abgesenkt wird. Interessant ist, daß die beiden für den Fall halber Füllung berechneten Kurven (nach der Reskalierung) auch quantitativ gut übereinstimmen, obwohl die linke für die semielliptische Zustandsdichte des Bethe-Gitters,

die rechte für die Gaußsche Zustandsdichte des hyperkubischen Gitters gerechnet wurde. Offenbar sind Details der Zustandsdichten zumindest bei halber Füllung relativ unwichtig. Eine wichtige Frage, die wir im folgenden behandeln werden, ist, ob die Unterdrückung des Antiferromagnetismus durch Dotierung das Auftreten von Ferromagnetismus begünstigt.

Die prinzipielle Vorgehensweise bei der Bestimmung von Phasengrenzen mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Simulationen ist in diesem Kapitel die folgende:

1. Simulation des reinen Hubbard-Modells in der homogenen Phase (wie in Abschnitt 3.1 beschrieben). Neben den physikalischen Parametern, der Hubbard-Wechselwirkung U , der Temperatur T und der Bandfüllung n , tritt die Zeitdiskretisierung $\Delta\tau$ auf.
2. Berechnung von Suszeptibilitäten für beliebige Werte der Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen F^* und V^* durch Lösen von in dieser Arbeit hergeleiteten linearen Gleichungssystemen aus den in 1. bestimmten Größen (siehe Abschnitt 3.2 und Anhang B).
3. Extrapolation $\Delta\tau \rightarrow 0$ der inversen Suszeptibilitäten auf physikalische Werte. Falls eine inverse Suszeptibilität negativ ist, zeigt das an, daß die homogene Phase gegenüber der zugehörigen Symmetriebrechung instabil ist. Bei Phasenübergängen zweiter Ordnung findet der Übergang zwischen den Phasen gerade an den Nullstellen der inversen Suszeptibilität statt. In dieser Arbeit identifizieren wir diese Nullstellen mit den Phasengrenzen, gehen also (bei endlichen Temperaturen) von Übergängen zweiter Ordnung aus. Wir beschreiben die Phasengrenzen durch die kritischen Werte von F^* und V^* in Abhängigkeit von U , T und n .
4. Gegebenenfalls werden die berechneten Größen nach $T \rightarrow 0$ extrapoliert.

Wegen der Simulation in der homogenen Phase des Hubbard-Modells können mit der hier verwendeten Methode für jedes Parameterpaar (U, n) nur Temperaturen oberhalb der zugehörigen Néel-Temperatur direkt simuliert werden. Wie man in Abbildung 4.1 erkennt, ist dies besonders bei halber Füllung und mittleren Werten von U eine starke Einschränkung.¹

Im Abschnitt 2.4.2 hatten wir gesehen, daß die Nächst-Nachbar-Terme erst in einer Phase mit der entsprechenden Symmetriebrechung von Null verschieden sind (deswegen funktioniert ja auch die oben dargelegte Methode). Es wird aber außerdem beobachtet, daß der Term $V^* - F^*/2$ nur die nichtmagnetischen Suszeptibilitäten χ_{cdw} und χ_{comp} beeinflusst, der Term F^* dagegen nur die magnetischen Suszeptibilitäten χ_{fm}

¹Interessant ist, daß in der Simulation trotz der Vorgabe der räumlichen Homogenität keine Temperaturen unterhalb der Néel-Temperatur erreichbar sind. Bei tieferen Temperaturen konvergieren die Beobachtungsgrößen nicht. Stattdessen oszilliert die Magnetisierung von einer Iteration zur nächsten. Eine Erklärung für dieses Verhalten ist sehr einfach: Wie am Ende von Abschnitt 2.5 dargestellt, läßt sich die Green-Funktion eines Untergitters direkt aus der Green-Funktion des zweiten Untergitters berechnen. Folglich springt die Iteration gewissermaßen zwischen den Untergittern hin und her.

und χ_{af} . Da, wie im Abschnitt 4.3 gezeigt wird, nichtmagnetische Symmetriebrechung im Bereich

$$0 < V^* - \frac{F^*}{2} < U \quad (4.1)$$

nicht auftritt, verschwindet dort der entsprechende Energieterm (vgl. Abschnitt 2.4.2):

$$\left(V^* - \frac{F^*}{2}\right) \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j = 0 \quad (4.2)$$

Wir unsere weiteren Untersuchungen auf diesen Bereich beschränken, können den entsprechenden Parameter also weglassen

$$V^* - \frac{F^*}{2} \longrightarrow 0, \quad (4.3)$$

ohne einen Fehler zu machen.

Die Phasengrenzen zwischen paramagnetischer und ferro- bzw. antiferromagnetischer Phase, welche in den folgenden Abschnitten berechnet werden, sind folglich (wenn man die Abhängigkeit von $\Delta\tau$ einschließt) Hyperflächen im fünfdimensionalen Raum. Wir werden sie in der Form

$$\tilde{F}_c = \tilde{F}_c(U, n, T, \Delta\tau) \quad (4.4)$$

berechnen und nach Extrapolation $\Delta\tau \rightarrow 0$ als

$$F_c = F_c(U, n, T) \quad (4.5)$$

ausdrücken.

Der Übersichtlichkeit halber beschäftigen wir uns nacheinander detailliert mit den Phasengrenzen zur ferromagnetischen und zur antiferromagnetischen Phase, bevor wir in Abschnitt 4.4 das vollständige Phasendiagramm diskutieren. Inkommensurable Phasen werden dafür allerdings nicht berücksichtigt. Das ist konsistent mit der Verwendung des Bethe-Gitters, auf welchem keine Wellenvektoren und folglich auch keine inkommensurablen Phasen existieren.

4.1 Grenze Paramagnetismus – Ferromagnetismus

4.1.1 Hartree-Fock-Näherung

Während die Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen stets exakt im Hartree-Fock-Bild beschrieben werden, ist die entsprechende Näherung für die *on site*-Wechselwirkung U nur exakt im Limes $U \rightarrow 0$.² Die in diesem Abschnitt hergeleiteten Ergebnisse werden später mit den Resultaten aus Quanten-Monte-Carlo-Simulationen verglichen.

²Quantitativ richtig beschreibt die Hartree-Fock-Näherung auch bei $U \rightarrow 0$ nur die Grenze zum Ferromagnetismus. Bei der im Abschnitt 4.2 zu besprechenden Grenze homogene – antiferromagnetische Phase findet man in Störungsrechnung zweiter Ordnung für das reine Hubbard-Modell, daß die in Hartree-Fock-Näherung bestimmte Néel-Temperatur bei jedem endlichen Wert von U um einen Faktor von etwa 3 falsch ist [vD91].

Den Hamilton-Operator (2.25) schreiben wir leicht um:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ext} &= -\frac{t^*}{\sqrt{Z}} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_{\alpha, i \in \alpha, \sigma} n_{i\alpha}^\sigma n_{i\alpha}^{\bar{\sigma}} \\ &\quad - \sum_{\alpha, i \in \alpha, \sigma} n_{i\alpha}^\sigma \frac{F^*}{2} \sigma (m - \alpha m_{st}) + N \frac{F^*}{4} (m^2 - m_{st}^2) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Hier wurde (4.3) verwendet und folgende Homogenitätsbedingung angenommen:

$$\langle n_{i\alpha}^\sigma \rangle = \frac{1}{2} (n + \sigma m + \alpha \sigma m_{st}) \quad (4.7)$$

Der U -Term wird durch seine Hartree-Näherung (der Fock-Anteil fällt weg, da dieser Term keine Wechselwirkung zwischen Elektronen gleichen Spins beschreibt) ersetzt:

$$\frac{U}{2} \sum_{\alpha, i \in \alpha, \sigma} n_{i\alpha}^\sigma n_{i\alpha}^{\bar{\sigma}} \longrightarrow \frac{U}{2} \sum_{\alpha, i \in \alpha, \sigma} (n_{i\alpha}^\sigma \langle n_{i\alpha}^{\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{i\alpha}^\sigma \rangle n_{i\alpha}^{\bar{\sigma}} - \langle n_{i\alpha}^\sigma \rangle \langle n_{i\alpha}^{\bar{\sigma}} \rangle) \quad (4.8)$$

$$= \frac{U}{2} \sum_{\alpha, i \in \alpha, \sigma} n_{i\alpha}^\sigma (n - \sigma m - \alpha \sigma m_{st}) - N \frac{U}{4} (n^2 - m^2 - m_{st}^2) \quad (4.9)$$

Nach einer Verschiebung des chemischen Potentials um $U/2$ lautet der Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ext} &= -\frac{t^*}{\sqrt{Z}} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + \sum_{\alpha, i \in \alpha, \sigma} n_{i\alpha}^\sigma \left[-\frac{F^* + U}{2} \sigma m + \frac{F^* - U}{2} \alpha \sigma m_{st} \right] \\ &\quad + \frac{N}{4} [(F^* + U)m^2 - (F^* - U)m_{st}^2]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

In diesem Kapitel untersuchen wir den Übergang Paramagnetismus – Ferromagnetismus und setzen daher $m_{st} = 0$. Dann sind, abgesehen vom Term der kinetischen Energie, alle Erwartungswerte ortsunabhängig und wir können leicht eine Fourier-Transformation ausführen:³

$$\mathcal{H}_{HF} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} - \left(\frac{U + F^*}{2} \right) \sigma m \right) n_{\mathbf{k}}^\sigma + N \frac{F^* + U}{4} m^2 \quad (4.11)$$

Das Großkanonische Potential pro Gitterplatz errechnet sich zu

$$\frac{\Omega}{N} = \frac{F^* + U}{4} m^2 - \frac{1}{N\beta} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{F^* + U}{2} m \sigma - \mu)} \right). \quad (4.12)$$

³Streng genommen ist auf dem Bethe-Gitter eine Fourier-Transformation nicht definiert. Man müßte eigentlich die hier für das hyperkubische Gitter angegebene Formulierung im Impulsraum umgehen, käme aber auch auf Gleichung (4.13).

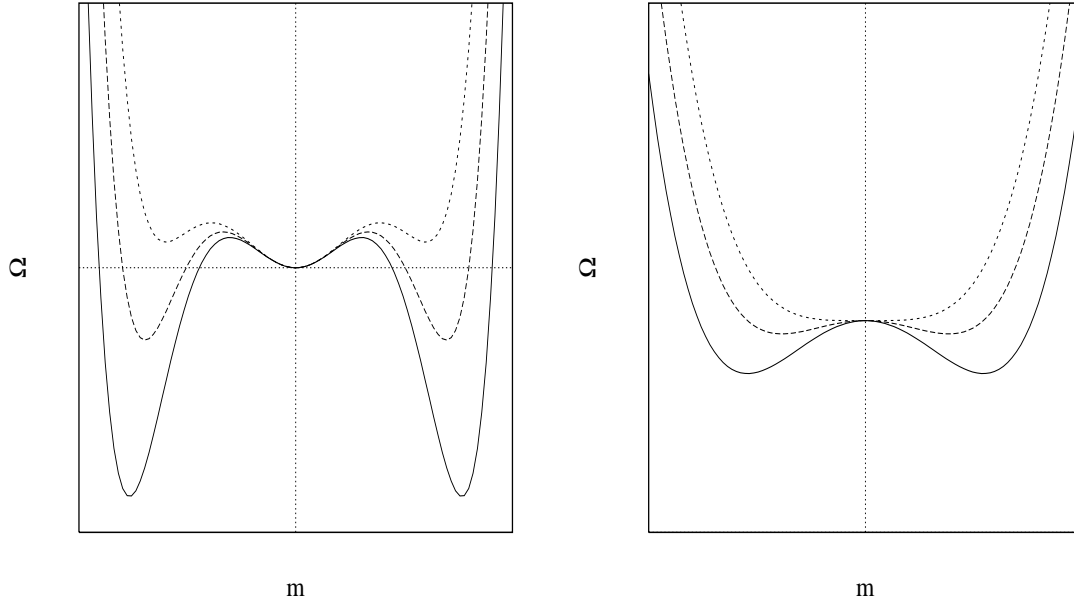


Abbildung 4.2: Qualitativer Verlauf der Freien Energie bei verschiedenen Temperaturen in Abhängigkeit von der Magnetisierung. Phasenübergang 1. Ordnung (links) bzw. 2. Ordnung (rechts).

Das Großkanonische Potential ist für die Gleichgewichtswerte der Magnetisierung extremal:

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial \Omega/N}{\partial m} = \frac{F^* + U}{2} \left(m - \sum_{\sigma} \int d\epsilon_{\sigma} \frac{\sigma D(\epsilon_{\sigma})}{1 + e^{\beta(\epsilon_{\sigma} - \frac{F^* + U}{2} m \sigma - \mu)}} \right) \quad (4.13)$$

Wir berechnen auch die zweite Ableitung:

$$\frac{2}{F^* + U} \frac{\partial^2 \Omega/N}{\partial m^2} = 1 - \beta \frac{F^* + U}{8} \sum_{\sigma} \int d\epsilon_{\sigma} \frac{D(\epsilon_{\sigma})}{\cosh^2[\frac{\beta}{2}(\epsilon_{\sigma} - \frac{F^* + U}{2} m \sigma - \mu)]} \quad (4.14)$$

Das System ist ferromagnetisch, falls

$$\left. \frac{\partial^2 \Omega/N}{\partial m^2} \right|_{m=0} < 0 \quad \Leftrightarrow \quad F^* > \frac{4}{\beta} \left[\int d\epsilon D(\epsilon) \cosh^{-2}(\beta \frac{\epsilon - \mu}{2}) \right]^{-1} - U \quad (4.15)$$

und keine Instabilität gegenüber anderen Symmetriebrechungen, insbesondere Antiferromagnetismus, vorliegt.

Bedingung (4.15) ist immer hinreichend, aber nur dann auch notwendig, falls der Übergang von zweiter Ordnung ist. Für jedes Gitter mit konvexer Zustandsdichte⁴ läßt sich wie folgt zeigen, daß der Übergang nicht von erster Ordnung sein kann: Wie in

⁴Die Zustandsdichte des Bethe-Gitter ist zwar im Bereich $-1 \leq e \leq 1$ konvex, nicht jedoch an der Bandkante. Die Argumentation gilt streng nur bei nicht zu starker Dotierung und nicht zu hohen Temperaturen.

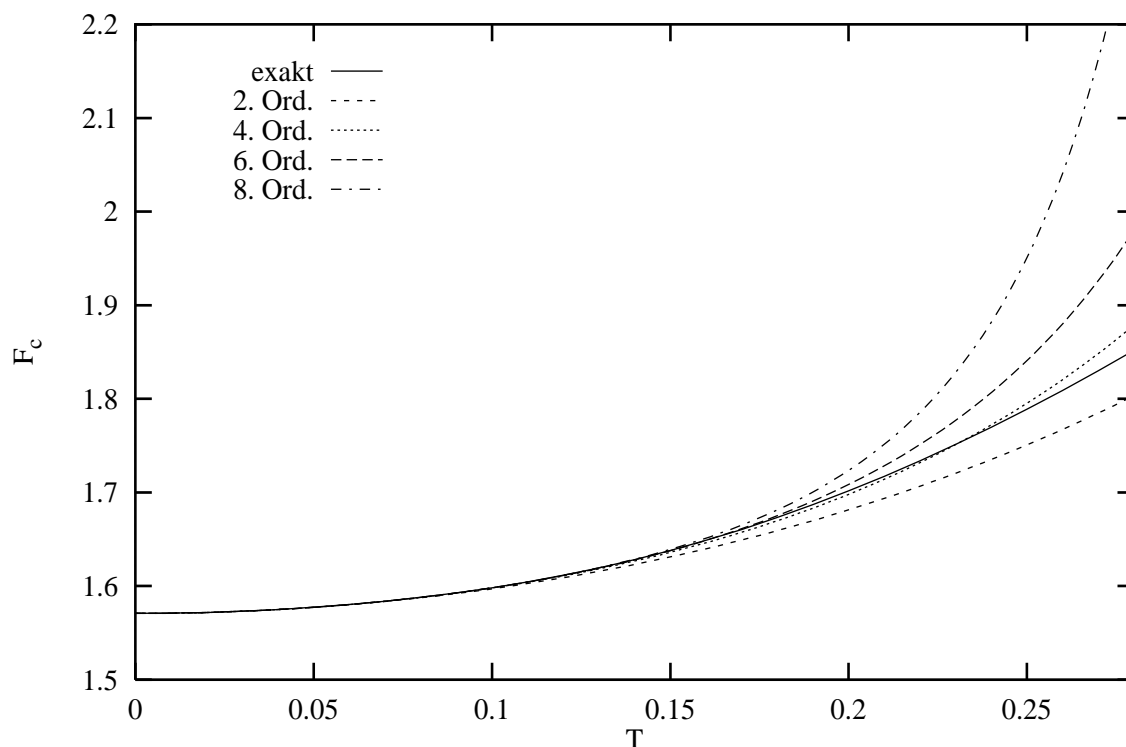


Abbildung 4.3: Vergleich der Phasengrenze Paramagnetismus – Ferromagnetismus in Sommerfeld-Entwicklung bzw. exakt bei $U = 0$.

Abbildung 4.2 schematisch gezeigt, hat die Freie Energie bei einem Phasenübergang 1. Ordnung Minima sowohl für $m = 0$ als auch für $m \neq 0$. Das impliziert, daß im Zwischenbereich ein Maximum vorliegt, die zweite Ableitung dort also negativ ist. Da diese in den Minima positiv ist, hat die zweite Ableitung bei Übergängen erster Ordnung also ein Minimum bei $m \neq 0$.

Bei jedem konvexen Gitter liegt das einzige Minimum der zweiten Ableitung der Freien Energie aber bei $m = 0$. Dies erkennt man aus der Tatsache, daß jeder Term der Summe über σ in Gleichung (4.14) eine Faltung der Zustandsdichte mit einer positiven, bei $\mu \pm cm$ ($c = (U + F^*)/2$, konstant) gepeakten Funktion darstellt.

Wenn man μ vorläufig konstant setzt, ist somit klar, daß die Summe am größten für $m = 0$ ist. Wenn man die Füllung n konstant setzt, verschiebt sich oberhalb halber Füllung μ mit wachsendem m nach oben, also in einen Bereich mit kleinerer Zustandsdichte. Auch in diesem Fall ist die Summe maximal für $m = 0$. Analoges gilt unterhalb halber Füllung. Da die Summe in (4.14) immer am größten bei $m = 0$ ist, ist dort die zweite Ableitung der Freien Energie stets minimal. Folglich ist der Phasenübergang (mindestens) von zweiter Ordnung.

Mit Bethe-Zustandsdichte erhält man also in Hartree-Fock-Näherung als kritischen

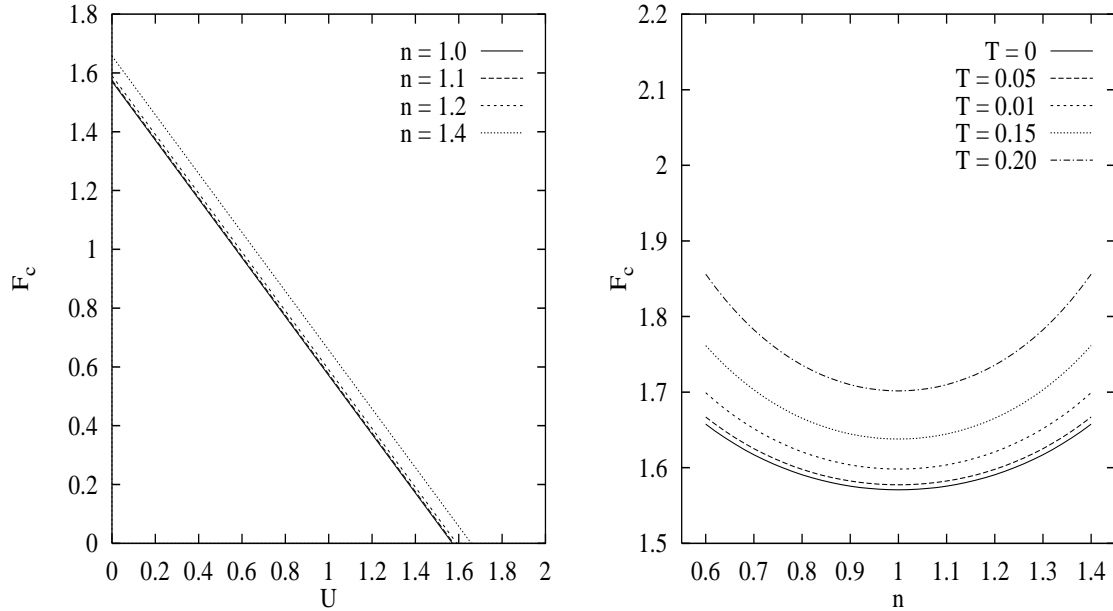


Abbildung 4.4: Phasengrenze zum Ferromagnetismus in Hartree-Fock-Näherung bei $T = 0$ (links) und $U = 0$ (rechts). Die rechte Kurve ist gleichzeitig exakt, da die Hartree-Fock-Entkopplung für die Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen keine Näherung ist.

Wert von F^* für den Übergang in die ferromagnetische Phase:

$$F_c = \frac{2\pi}{\beta} \left[\int_{-1}^1 d\epsilon \frac{\sqrt{1-\epsilon^2}}{\cosh^2(\beta \frac{\epsilon-\mu}{2})} \right]^{-1} - U \quad (4.16)$$

Die Auswertung muß numerisch erfolgen. Eine Sommerfeld-Entwicklung versagt selbst bei halber Bandfüllung ($\mu = 0$) und sogar bei $U = 0$, wo die Hartree-Fock-Näherung ja exakt ist, schon bei vergleichsweise niedrigen Temperaturen (Abbildung 4.3). Der Fehler ist dort auch bei Mitnahme hoher Ordnungen von T erheblich größer als z.B. der Fehler der Extrapolation in den Quanten-Monte-Carlo-Untersuchungen bei $U = 0$. Die Gründe für diese Divergenz werden in einem allgemeineren Rahmen in Anhang C beleuchtet.

Der Vollständigkeit halber sei noch der Ausdruck für $T = 0$ angegeben:

$$\begin{aligned} F_c(T = 0) &= D(\mu)^{-1} - U \\ &= \frac{\pi}{2\sqrt{1-\mu^2}} - U, \quad \mu = \epsilon_F \end{aligned} \quad (4.17)$$

Bei $F^* = 0$ entspricht dieser Ausdruck dem bekannten Stoner-Kriterium für Ferromagnetismus.

Da in unseren Untersuchungen stets die Bandfüllung vorgegeben wird, muß obiges μ als Funktion von Bandfüllung n und Temperatur T berechnet werden. Wegen der

Glattheit der Zustandsdichte ist eine Genauigkeit von etwa 10^{-3} ausreichend. Man kann daher auf eine zweite numerische Integration verzichten und mit der im Anhang D hergeleiteten Approximation für μ rechnen.

Zu den Abbildungen: Wie man den Gleichungen (4.16) und (4.17) sowie der Abbildung 4.4 (links) unmittelbar ansieht, ist die U -Abhängigkeit von F_c linear. Die Abhängigkeit von der Füllung n ist daher in Abbildung 4.4 (rechts) für den Spezialfall $U = 0$ dargestellt. Die Symmetrie von F_c um $n = 1$ ist eine Folge der Teilchen-Loch-Symmetrie. Wegen der Differenzierbarkeit ist das Verhalten nahe halber Füllung quadratisch. Die Temperaturabhängigkeit ist bei $U = 0$ zusammen mit Ergebnissen aus Quanten-Monte-Carlo-Simulationen in Abbildung 4.5 wiedergegeben. Die Hartree-Fock-Kurven für $U \neq 0$ erhält man durch Verschieben der gezeigten Kurven längs der Ordinate.

Die Ergebnisse der Hartree-Fock-Näherung werden in den nächsten Abschnitten als Vergleich dienen. Wichtig ist dabei die Tatsache, daß diese Approximation die Tendenz zur Ordnung, insbesondere zum Ferromagnetismus, stets überschätzt. Die „wirklichen“ Werte von F_c für den Übergang zum Ferromagnetismus werden also immer über den in Hartree-Fock-Näherung berechneten liegen.

4.1.2 Ergebnisse der Quanten-Monte-Carlo-Simulationen

Im Limes $U \rightarrow 0$, in dem die Hartree-Fock-Näherung für die untersuchte Phasengrenze exakt wird, ist auch die Quanten-Monte-Carlo-Simulation (QMC) besonders einfach. Wegen des Verschwindens des Wechselwirkungsterms fällt in der Summe (3.13) die Spinabhängigkeit weg: Alle Summanden sind gleich. Da die Selbstenergie exakt verschwindet und folglich sofort richtig vorgegeben wird, werden die diskretisierten Größen exakt berechnet. Statistischer Fehler und Konvergenzfehler sind also gleich Null. Damit kann dieser Fall als Test für die Extrapolation $\Delta\tau \rightarrow 0$ dienen. In Abbildung 4.5 läßt sich die hervorragende Übereinstimmung mit den (numerisch integrierten) exakten Kurven erkennen. Insbesondere liefert auch die Extrapolation zu niedrigen Temperaturen, $T \rightarrow 0$, mit hoher Genauigkeit die exakten Werte.

Das ändert sich, wenn man zu stärkerer Hubbard-Wechselwirkung U übergeht, wo die Hartree-Fock-Näherung keine gute Näherung mehr ist. Hier wird die Temperaturabhängigkeit immer stärker linear. Gleichzeitig nimmt die Tendenz zum Ferromagnetismus stark zu. In Abbildung 4.6 sind die Quanten-Monte-Carlo-Ergebnisse mit Fitkurven für halbe Bandfüllung sowie in Abbildung 4.7 bei $n = 1.1$ (oben) und $n = 1.2$ (unten) dargestellt. Zusätzlich sind bei $T = 0$ jeweils die für $T \rightarrow 0$ extrapolierten Werte mit Fehler angegeben. Man erkennt, daß schon bei $U = 6$ der kritische Wert von F für den Übergang zum Ferromagneten gegenüber dem Fall $U = 0$ um mehr als eine Größenordnung reduziert ist.

Durch Dotierung wird der Ferromagnetismus auch bei starker *on site*-Wechselwirkung nicht etwa verstärkt, sondern unterdrückt. Die Phasengrenze wandert zu größeren Werten von F . Wie man besonders gut in Abbildung 4.8 (unten) erkennt, ändert sich mit steigendem U auch die Form der Dotierungsabhängigkeit: Bei kleinen Werten von

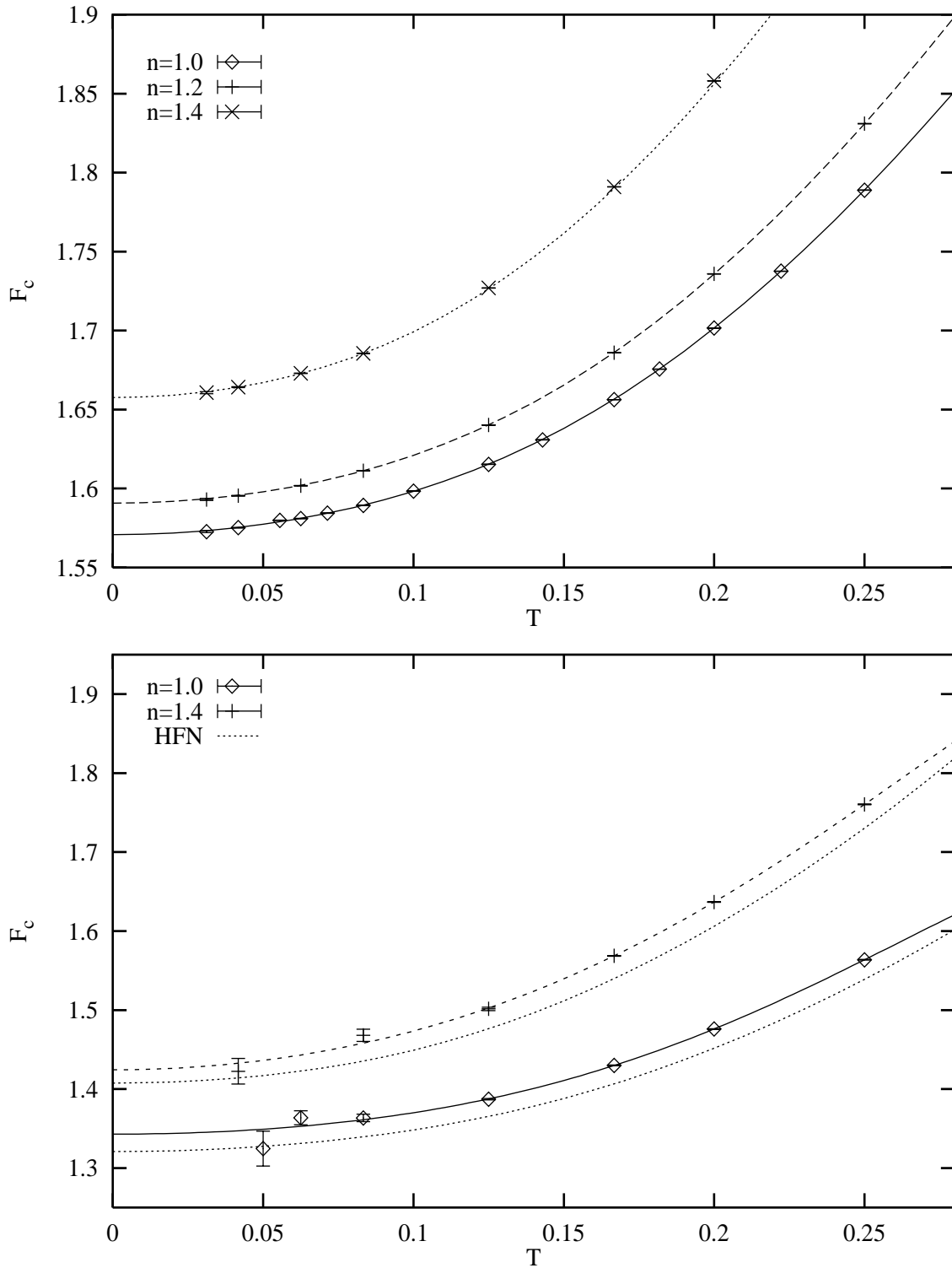


Abbildung 4.5: Oben: Phasengrenze zum Ferromagnetismus bei $U = 0$. Plotpunkte aus QMC-Simulationen, durchgezogene Kurven aus exakter Rechnung. Unten: QMC-Daten mit Fitkurven für $U = 0.25$ sowie die Hartree-Fock-Näherung (HFN).

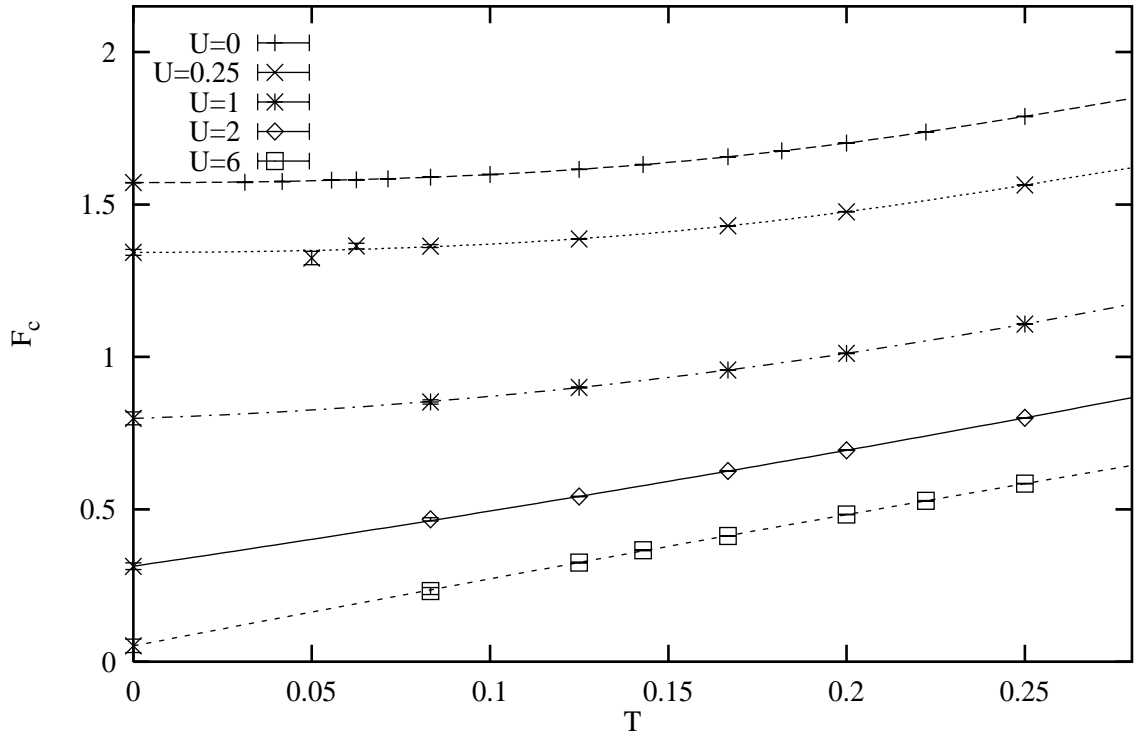


Abbildung 4.6: Phasengrenze zum Ferromagnetismus bei $n = 1.0$. Dargestellt sind die QMC-Daten mit Fitkurven sowie die für $T \rightarrow 0$ extrapolierten Werte.

U ist sie quadratisch, während sie bei $U \geq 2$ schon stark linearen Charakter angenommen hat.

Einige der in der Einleitung genannten Ferromagnete haben Curie-Temperaturen, welche von der Ordnung der Zimmertemperatur oder erheblich kleiner sind. Speziell bei starker Hubbard-Wechselwirkung und nahe halber Füllung sind unsere Simulationen aber auf Temperaturen beschränkt, die je nach Bandbreite mehr oder weniger oberhalb der Zimmertemperatur liegen. Daher ist eine Extrapolation zu niedrigeren Temperaturen sinnvoll.

In den Abbildungen 4.8 und 4.9 sind die Phasengrenzen bei der endlichen Temperatur $T = 0.125$ denen für $T = 0$ gegenübergestellt. Die Abhängigkeit von Hubbard-Wechselwirkung U und Dotierung n ist in beiden Fällen qualitativ ähnlich. Die kritische Stärke F_c der Nächst-Nachbar-Wechselwirkung ist jedoch bei $T = 0$ stark reduziert. Bei $U = 6$ reicht $F \approx 0.06$ aus, um Ferromagnetismus hervorzurufen. Das heißt, schon ein im Vergleich zur *on site*-Wechselwirkung winziges F kann diese Symmetriebrechung bewirken.

Mit dem Übergang $T \rightarrow 0$ können auch qualitative Änderungen verbunden sein. So könnte die Extrapolation der Phasengrenze, welche nach Voraussetzung bei $T > 0$ einen Übergang zweiter Ordnung beschreibt, bei $T = 0$ auf einen Übergang erster

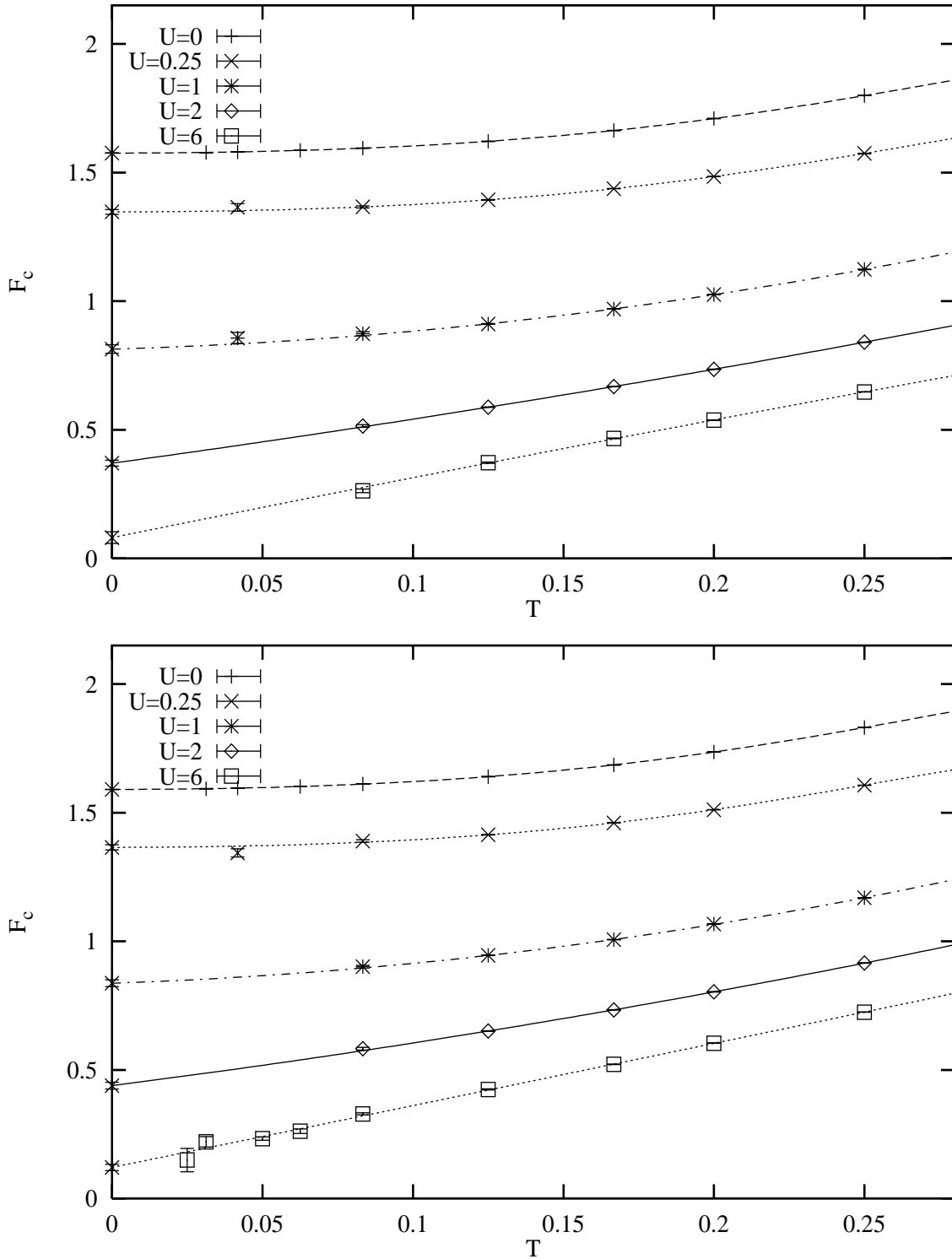


Abbildung 4.7: Phasengrenze zum Ferromagneten bei $n = 1.1$ (oben) und $n = 1.2$ (unten). Dargestellt sind die QMC-Daten mit Fitkurven sowie die für $T \rightarrow 0$ extrapolierten Werte.

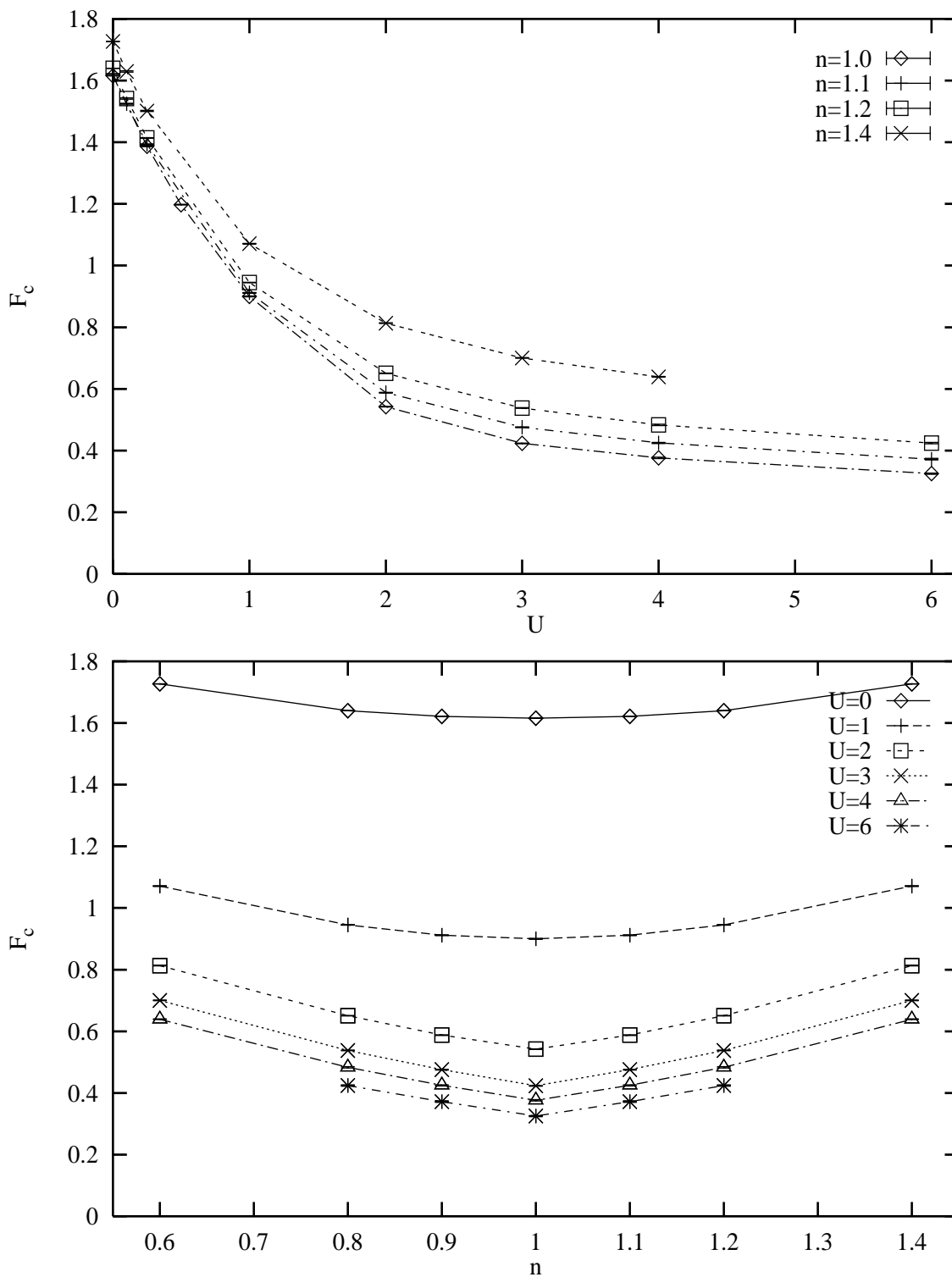


Abbildung 4.8: Phasengrenze zum Ferromagneten bei $T = 0.125$. Eingetragen sind die QMC-Resultate in Abhängigkeit von U (oben) bzw. n (unten). Die Linien sind „guide to the eye only“.

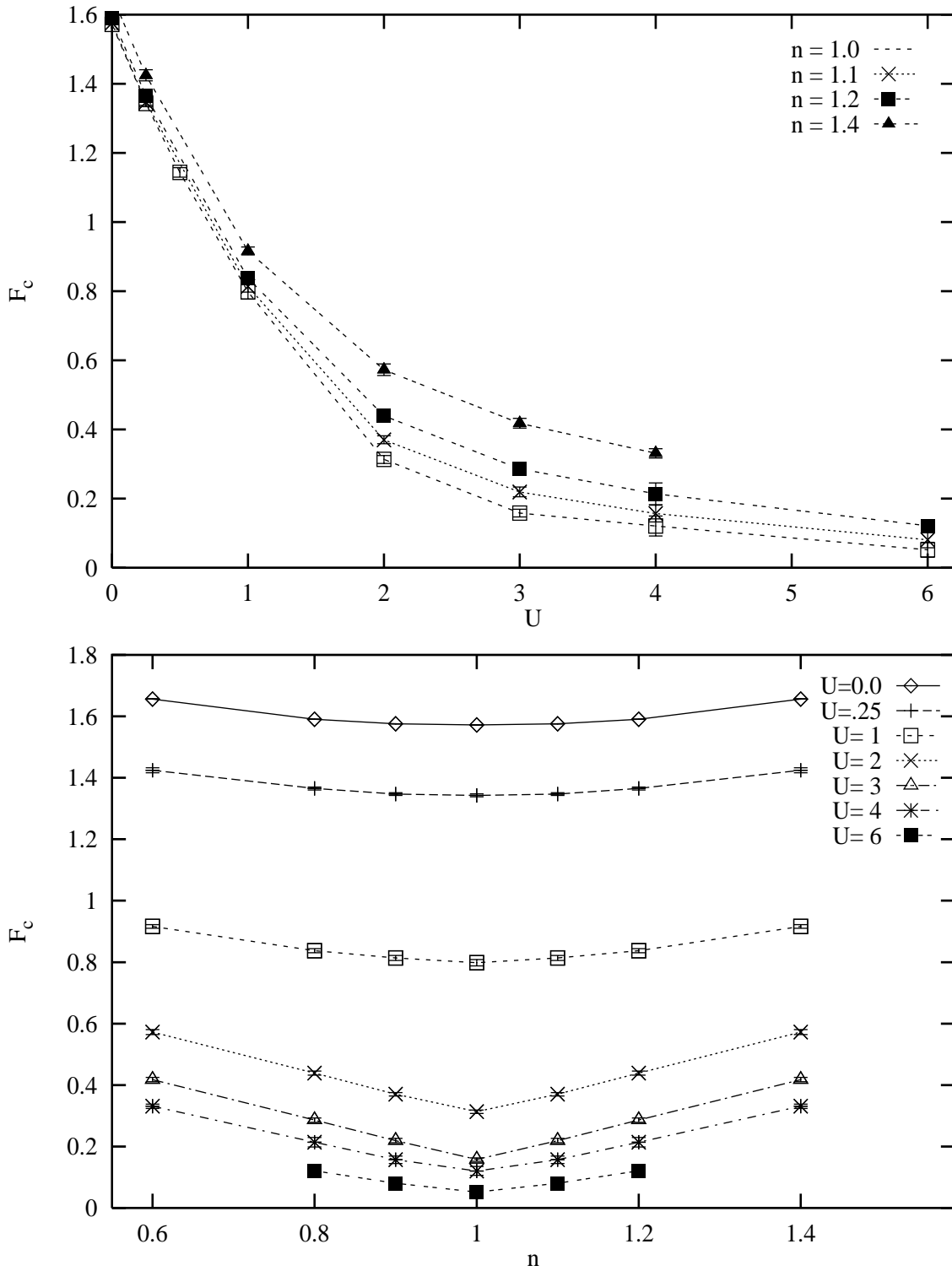


Abbildung 4.9: Phasengrenze zum Ferromagneten bei $T = 0$. Eingetragen sind die QMC-Resultate in Abhängigkeit von U (oben) bzw. n (unten). Die Linien sind „guide to the eye only“.

Ordnung führen. Außerdem ist fraglich, ob auch die extrapolierte Grenze noch ferromagnetischen von paramagnetischem Bereich trennt und nicht etwa andere Arten der Symmetriebrechung wichtig werden.

Doch auch bei endlichen Temperaturen ist die Untersuchung noch nicht vollständig. Bisher wurde ja nur auf Symmetriebrechung zur ferromagnetischen Phase hin untersucht. Im Prinzip könnte in dem Bereich, den wir als ferromagnetisch identifiziert haben, die Instabilität zur antiferromagnetischen Phase die zur ferromagnetischen übertreffen.

Bevor wir von dem vollständigen Phasendiagramm sprechen können, müssen wir daher die Möglichkeit anderer Symmetriebrechungen, insbesondere zum Antiferromagnetismus hin, untersuchen. Falls wir solche Tendenzen finden, müssen die Freien Energien verglichen werden, um zu entscheiden, welches die stabile Phase ist.

4.2 Grenze Paramagnetismus – Antiferromagnetismus

Die Phasengrenze zwischen paramagnetischer und antiferromagnetischer Phase wird völlig analog zu der im letzten Abschnitt behandelten Grenze Paramagnetismus – Ferromagnetismus bestimmt. Es werden also wieder kritische Werte $F_c(U, n, T)$ berechnet, an denen der Phasenübergang einsetzt. Im jetzt betrachteten Fall liegt die symmetriegebrochene Phase jeweils unterhalb von F_c . In einer künstlichen Verallgemeinerung unseres Modells lassen wir auch negative Werte von F zu. Ein negatives F_c zeigt an, daß schon im reinen Hubbard-Modell und erst recht im erweiterten Hubbard-Modell (mit positivem F) bei den entsprechenden Parametern U, n, T kein Antiferromagnetismus auftritt. Für das eigentlich untersuchte Modell interessant sind dann die Extrapolationen in den Bereich $F > 0$.

4.2.1 Hartree-Fock-Näherung

Wir gehen von dem Hubbard-Hamilton-Operator (4.10) aus und setzen $m = 0$. Über den Gitterindex α bleibt jetzt auch im Wechselwirkungsanteil eine Ortsabhängigkeit bestehen. Die Minimierung des Großkanonischen Potentials führt auf eine Selbstkonsistenzgleichung für m_{st} [Hel95]:

$$0 = -m_{st} - \frac{U - F^*}{2} \sum_{\sigma} \int d\epsilon D(\epsilon) \frac{m_{st}}{\epsilon \sqrt{1 + \left(\frac{(U - F^*)m_{st}}{2\epsilon}\right)^2}} \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{1}{T} \left(\epsilon \sqrt{1 + \left(\frac{(U - F^*)m_{st}}{2\epsilon}\right)^2} - \mu\right)\right]} \quad (4.18)$$

Der Phasenübergang zum Antiferromagneten findet statt, falls

$$\left. \frac{\partial^2 \Omega/N}{\partial m_{st}^2} \right|_{m_{st}=0} < 0 \quad \Leftrightarrow \quad F^* < U + \left[\int d\epsilon D(\epsilon) \frac{1}{\epsilon \left(1 + \exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{T}\right)\right)} \right]^{-1}. \quad (4.19)$$

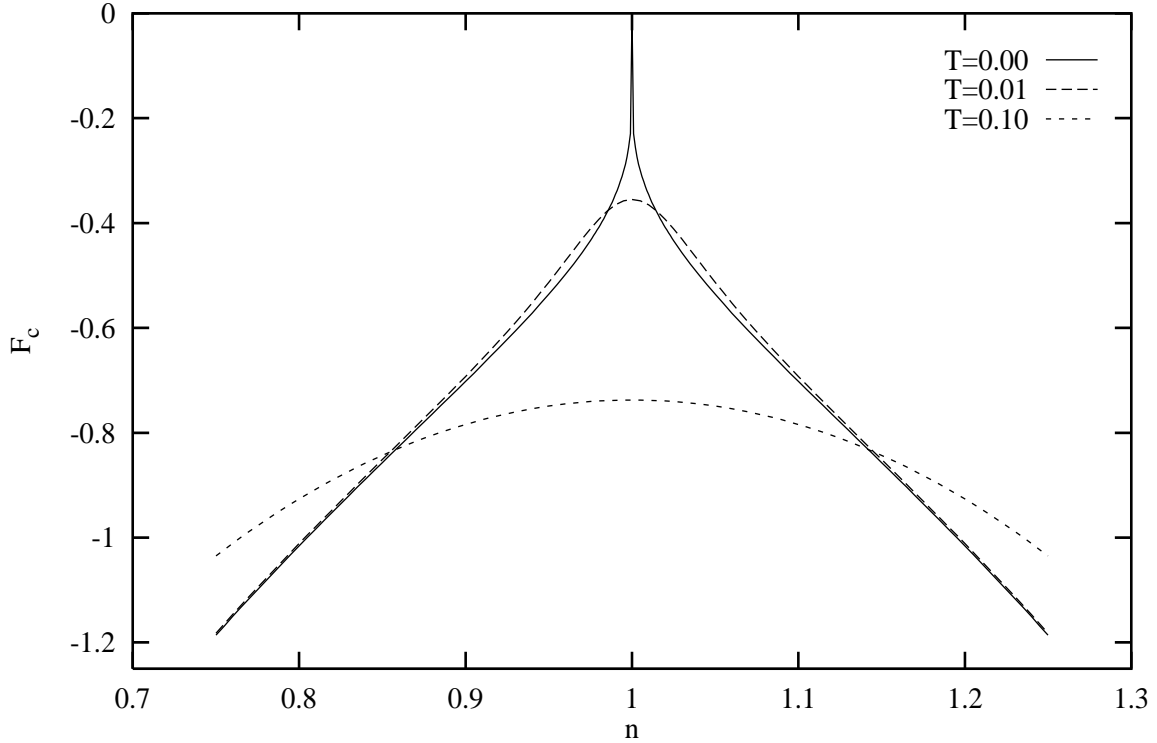


Abbildung 4.10: Exakte Phasengrenzen zum Antiferromagneten bei $U = 0$.

Für die halb elliptische Zustandsdichte des Bethe-Gitters ist die Bestimmungsgleichung für F_c folglich:

$$\frac{1}{F_c - U} = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 d\epsilon \frac{\sqrt{1 - \epsilon^2}}{\epsilon} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{T}\right)} \quad (4.20)$$

Der Integrand ist divergent wie $1/\epsilon$, das Integral existiert also nur als Hauptwert. Man kann das Problem durch Ausnutzen der Symmetrie der Zustandsdichte vereinfachen:

$$\frac{1}{F_c - U} = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 d\epsilon \underbrace{\frac{\sqrt{1 - \epsilon^2}}{\epsilon}}_{\text{antisymmetrisch}} \frac{1}{2} \left(1 - \tanh\left(\frac{\epsilon - \mu}{2T}\right) \right) \quad (4.21)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\epsilon \frac{\sqrt{1 - \epsilon^2}}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon - \mu}{2T}\right) \quad (4.22)$$

Für $\mu = 0$ (und $T \neq 0$) ist die Divergenz im Integranden schon beseitigt. Für $\mu \neq 0$ nutzen wir die Symmetrie noch einmal aus:

$$\frac{1}{F_c - U} = \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 d\epsilon \frac{\sqrt{1 - \epsilon^2}}{\epsilon} \left(\tanh\left(\frac{\epsilon - \mu}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{\epsilon + \mu}{2T}\right) \right) \quad (4.23)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-1}^1 d\epsilon \frac{\sqrt{1 - \epsilon^2}}{\epsilon} \frac{\sinh\left(\frac{\epsilon}{T}\right)}{\cosh\left(\frac{\epsilon - \mu}{2T}\right) \cosh\left(\frac{\epsilon + \mu}{2T}\right)} \quad (4.24)$$

Der Integrand in diesem Ausdruck ist für jedes μ (und $T \neq 0$) frei von Divergenzen.

Das Resultat für $T = 0$ läßt sich ebenfalls analytisch angeben:

$$F_c(T = 0) = U + \frac{\pi}{2(\sqrt{1 - \mu^2} - \operatorname{artanh}(\sqrt{1 - \mu^2}))}, \quad \mu = \epsilon_F \quad (4.25)$$

Für die Auswertung bei $n \neq 1$ wurde μ entsprechend der im Anhang D hergeleiteten Näherung berechnet.

Bei $U = 0$ sind alle Ergebnisse dieses Abschnitts exakt. Man kann sie daher mit denen der Quanten-Monte-Carlo-Simulationen vergleichen. Insbesondere läßt sich testen, ob die verwendeten Extrapolationen bei $U = 0$ das richtige Ergebnis liefern. Eine potentielle Schwierigkeit bei der Bestimmung der Phasengrenze zum Antiferromagnetismus sieht man schon in Abbildung 4.10. Bei $U = 0$ ist die Grenze als Funktion von T und n nicht analytisch.

4.2.2 Ergebnisse der Quanten-Monte-Carlo-Simulationen

In Abbildung 4.11 (oben) erkennt man, daß die Quanten-Monte-Carlo-Simulationen bei $U = 0$ für jede simulierte Temperatur T mit hoher Genauigkeit die exakten Werte von F_c liefern. Die kritischen Werte von F^* , unterhalb derer Antiferromagnetismus auftritt, sind negativ.

Wie in Abbildung 4.11 (unten) gezeigt ist, liefert eine polynomiale Extrapolation (hier von zweiter Ordnung) der Quanten-Monte-Carlo-Daten nach $T \rightarrow 0$ wegen des nichtanalytischen Verhaltens in T falsche Werte für F_c . Auch bei $U = 0.25$ muß man annehmen, daß das wahre Verhalten des auf negative F erweiterten Modells eher durch die Hartree-Fock-Näherung als durch die Fitkurven beschrieben wird.

Viel stärker als bei der Bestimmung der Grenze Paramagnetismus – Ferromagnetismus müssen wir also die Frage im Auge behalten, ob die Extrapolation $T \rightarrow 0$ der Quanten-Monte-Carlo-Resultate auch für die Phasengrenze zum Antiferromagnetismus zuverlässig ist, bzw. für welche Werte von U und n man dies erwarten kann. Deswegen werden wir immer wieder die Konsistenz der Ergebnisse prüfen.

Die Ergebnisse für den uns interessierenden Bereich von $U \geq 1$ sind in den Abbildungen 4.12 und 4.13 aufgetragen. Man erkennt, daß bei allen Temperaturen F_c von $U = 1$ nach $U = 2$ ansteigt und zu großen Werten von U hin wieder absinkt. Gleichzeitig geht die Abhängigkeit von der Dotierung $n - 1$ von einem exponentiellen bis quadratischen in ein klar lineares Verhalten über. Beides sind Indizien dafür, daß im Bereich $U > 2$ eine Nichtanalytizität, die bei $U = 0$ eine korrekte Extrapolation verhindert hat, nicht mehr vorliegt.

Man beachte, daß jedes der Diagramme den Verlauf der Néel-Temperatur des erweiterten Hubbard-Modells in Abhängigkeit von F (bei festem U) angibt. Um zur üblichen Darstellung zu kommen, müssen lediglich F - und T -Achse vertauscht werden. Speziell entspricht der Fall $F = 0$ dem reinen Hubbard-Modell. Ein Vergleich mit den Ergebnissen von Freericks und Jarrell (Abbildung 4.1) zeigt eine quantitative Übereinstimmung. Das ist erstens ein „Konsistenz-check“ für die Extrapolationen, zweitens zeigt es, daß viele Ergebnisse nicht von der genauen Form der Zustandsdichte abhängen.

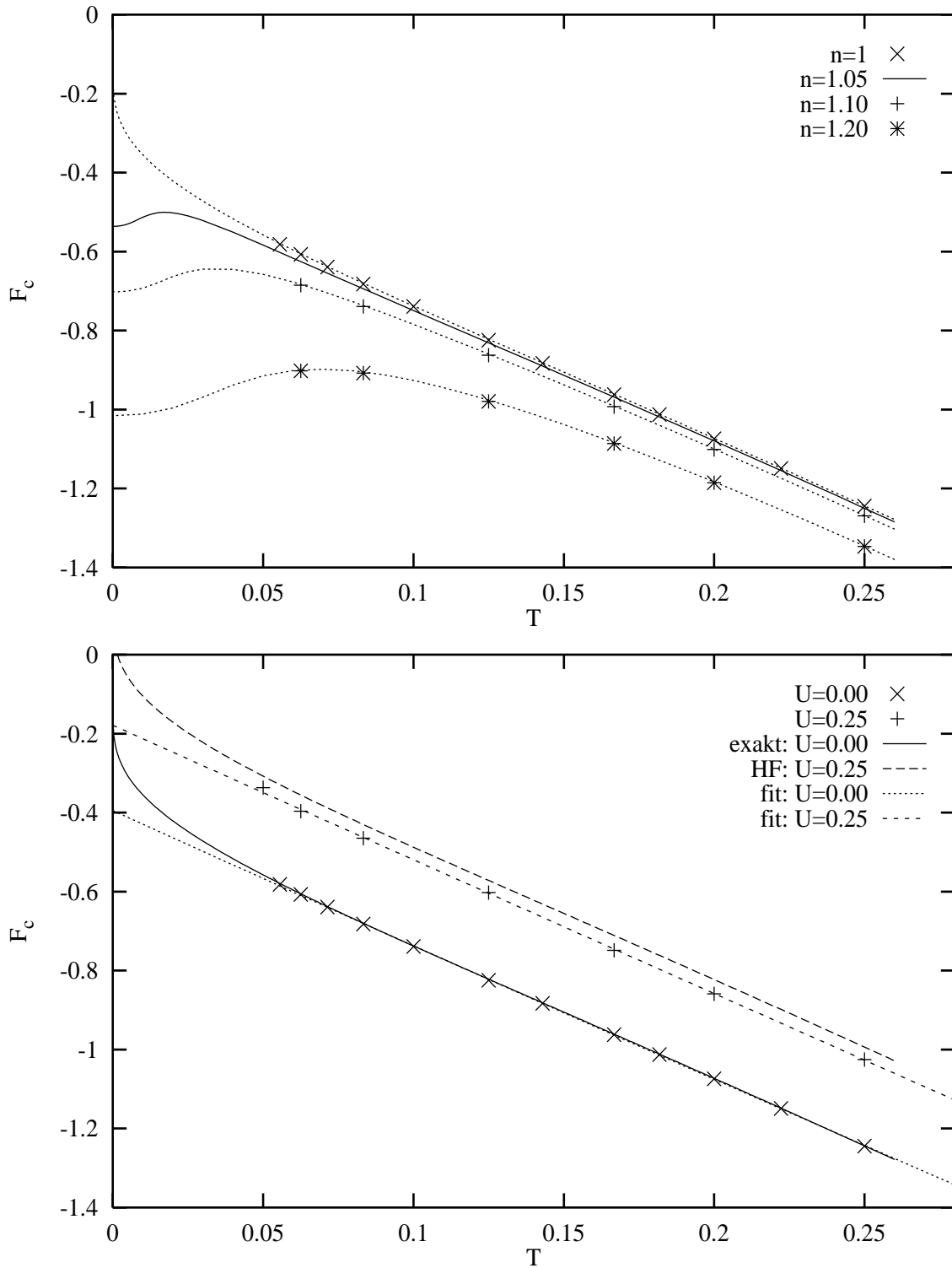


Abbildung 4.11: Oben: Phasengrenze zum Antiferromagnetismus bei $U = 0$. Durchgezogene Kurven exakt, Plotpunkte aus QMC-Simulationen. Die zu $n = 1$ gehörige Kurve erreicht bei $T = 0$ den Wert $F_c = 0$. Unten: Phasengrenzen bei $n = 1$. Zusätzlich zu den Kurven aus der Hartree-Fock-Näherung sind Fitkurven eingezeichnet.

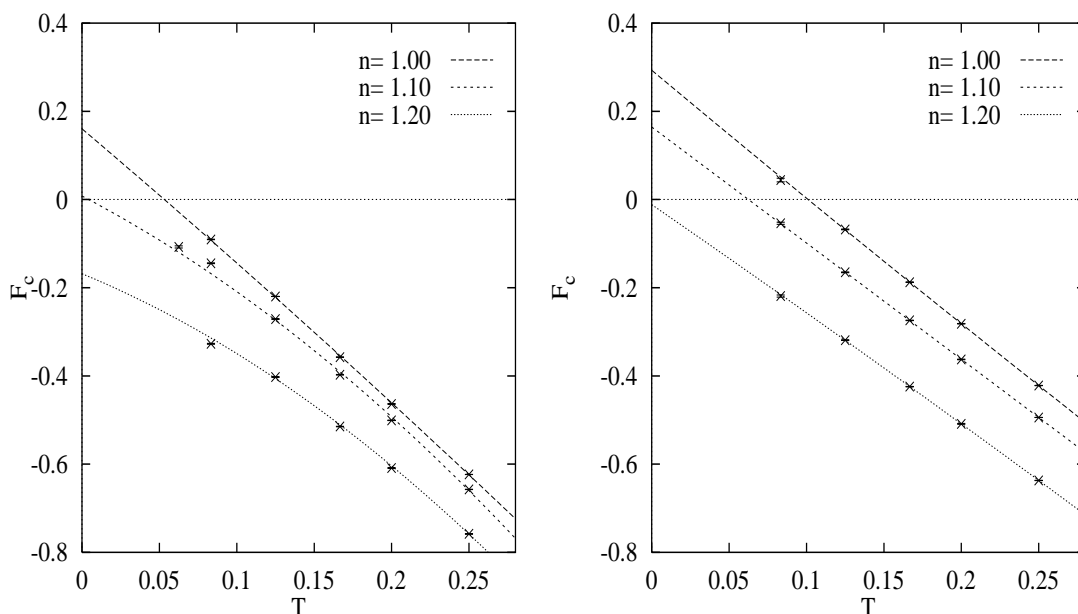


Abbildung 4.12: Phasengrenze zum Antiferromagnetismus. Ergebnisse aus QMC. Links: $U = 1$, rechts: $U = 2$.

Bevor wir die Ergebnisse dieses und des letzten Abschnitts zusammenfügen, wollen wir uns den bisher vernachlässigten nichtmagnetischen symmetriegebrochenen Phasen zuwenden.

4.3 Nächste-Nachbar-Dichte-Wechselwirkung

Die Ergebnisse dieses Abschnittes sind der Diplomarbeit von Karsten Held [Hel95] entnommen. Sie werden hier der Vollständigkeit der Argumentation halber referiert.

Wir hatten in Kapitel 2 gezeigt, daß die Nächste-Nachbar-Terme einen Einfluß nur in der symmetriegebrochenen Phase haben. Außerdem wurde erwähnt, daß die zu $V^* - F^*/2$ proportionale Nächste-Nachbar-Dichte-Wechselwirkung nur auf diejenigen Suszeptibilitäten wirkt, welche nichtmagnetische Symmetriebrechungen beschreiben. Die durch F^* charakterisierte Nächste-Nachbar-Spin-Wechselwirkung dagegen wirkt nur auf die magnetischen Suszeptibilitäten. Folglich treten nichtmagnetische Symmetriebrechungen im vollen Modell (2.6) genau dann auf, wenn sie auch in einem Hubbard-Modell auftreten, welches nur um den Dichte-Wechselwirkungs-Term erweitert ist.

Wie man in Abbildung 4.14 (links) sieht, tritt Phasenseparation im reinen Hubbard-Modell zumindest für mittlere Werte von U (dargestellt ist $U = 2$) nicht auf. Die Kompressibilität, deren Verschwinden eine solche Symmetriebrechung anzeigen würde, ist stets positiv. In dem Bereich, in dem die effektive Nächste-Nachbar-Dichte-Wechselwirkung abstoßend ist, bei $V^* - F^*/2 > 0$, wird eine Tendenz zur Phasenseparation

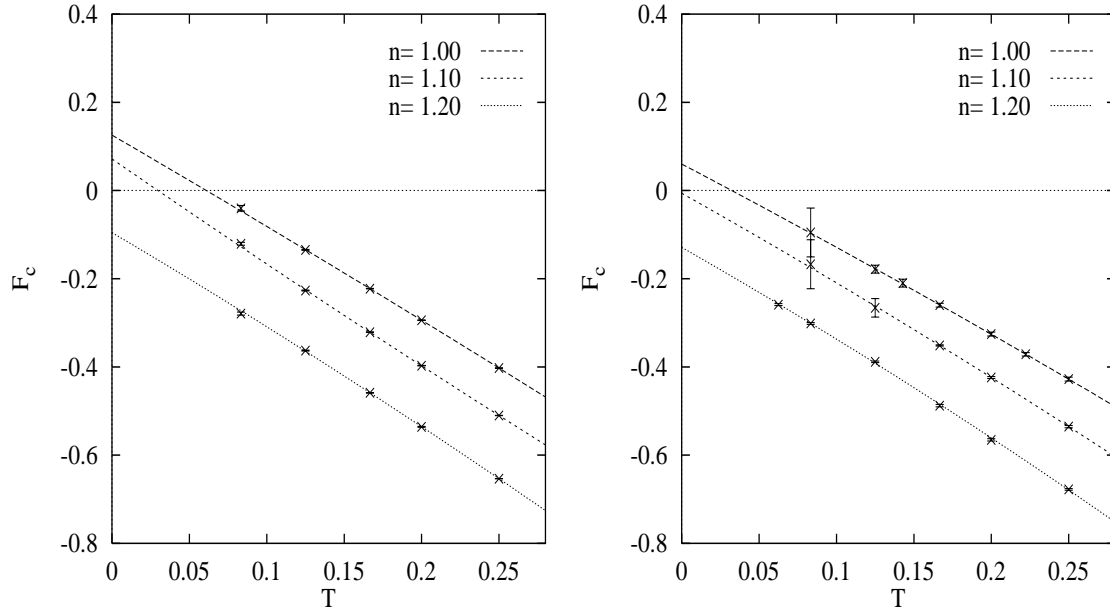


Abbildung 4.13: Phasengrenze zum Antiferromagnetismus. Ergebnisse aus QMC. Links: $U = 4$, rechts: $U = 6$.

zusätzlich unterdrückt. Diese Form der Symmetriebrechung tritt also nicht auf.

Wie man rechts in Abbildung 4.14 erkennt, unterstützt eine solche abstoßende Nächst-Nachbar-Wechselwirkung dagegen das Auftreten von kommensurablen Ladungsdichtewellen (*charge density wave*, CDW). Die in der Abbildung V genannte Größe muß in unserem Fall durch $V^* - F^*/2$ ersetzt werden. Nahe halber Bandfüllung treten die betrachteten kommensurablen Ladungsdichtewellen erst bei $V^* - F^*/2 > U$ auf.

Insgesamt läßt sich für unser erweitertes Hubbard-Modell feststellen: Wenn man sich auf einen Parameterbereich mit

$$0 < V^* - \frac{F^*}{2} < U \quad (4.26)$$

beschränkt, treten nichtmagnetische Symmetriebrechungen nicht auf, der entsprechende Nächst-Nachbar-Dichte-Wechselwirkungsterm hat dann keinen Einfluß und braucht nicht betrachtet zu werden.

4.4 Vollständiges Phasendiagramm

In Abbildung 4.15 sind für $U = 2$ die in den Simulationen berechneten Grenzen von der homogenen sowohl zur ferromagnetischen wie auch zur antiferromagnetischen Phase eingezeichnet. Bemerkenswert ist, daß sich bei halber Bandfüllung die Extrapolationen beider Phasengrenzen im Rahmen ihrer Fehler genau bei $T = 0$ treffen. In Abwesenheit

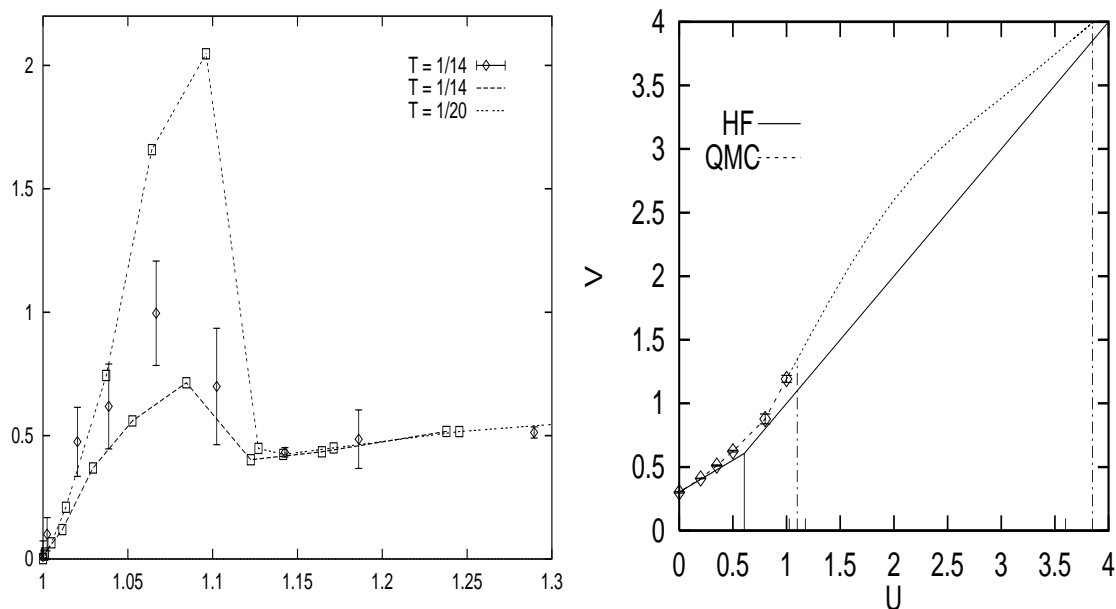


Abbildung 4.14: Links: Kompressibilität χ_{comp} als Funktion der Bandfüllung n bei $U = 2$. Die Berechnung erfolgte sowohl durch direkte Berechnung der Zwei-Teilchen-Größe (mit Fehlerbalken) als auch durch numerische Differentiation von $n(\mu)$. Rechts: Phasendiagramm des Hubbard-Modells mit V -Term bei $n = 1$. Eine CDW tritt nur bei $V > U$ auf. [Hel95]

von thermischen Fluktuationen findet der Übergang also (im Rahmen des Fehlers) direkt von der antiferromagnetischen zur ferromagnetischen Phase statt!

Dieses Verhalten entspricht dem, was man bei $n = 1$ für große U aus dem effektiven t - J -Modell (siehe Anfang Kapitel 3 und [Vol94]) erwartet. Dieses entspricht bei halber Füllung einem Heisenberg-Modell. Dessen Grundzustand ist ferromagnetisch, falls die Kopplungskonstante ($t^* = 1/2$ gemäß Abschnitt 2.5)

$$J_{\text{eff}} = \frac{4t^2}{U} - 2F = \frac{1}{Z} \left(\frac{4t^{*2}}{U} - 2F^* \right) \quad (4.27)$$

$$= \frac{1}{Z} \left(\frac{1}{U} - 2F^* \right) \quad (4.28)$$

negativ ist, und antiferromagnetisch, falls die Kopplungskonstante positiv ist. Nur wenn diese gerade verschwindet, ist auch bei $T = 0$ eine homogene Phase stabil.

$U = 2$ scheint also in diesem Sinne schon groß zu sein, weshalb wir der $T \rightarrow 0$ Extrapolation in diesem Bereich auch mehr vertrauen können als im Hartree-Fock-Limes kleiner Werte von U .

Das Grundzustands-Phasendiagramm für halbe Bandfüllung ist in Abbildung 4.16 (oben) gezeigt. Auch für größere Werte von U erkennt man eine Übereinstimmung der Phasengrenzen zum Ferro- bzw. Antiferromagnetismus. Zum Vergleich ist zusätzlich für

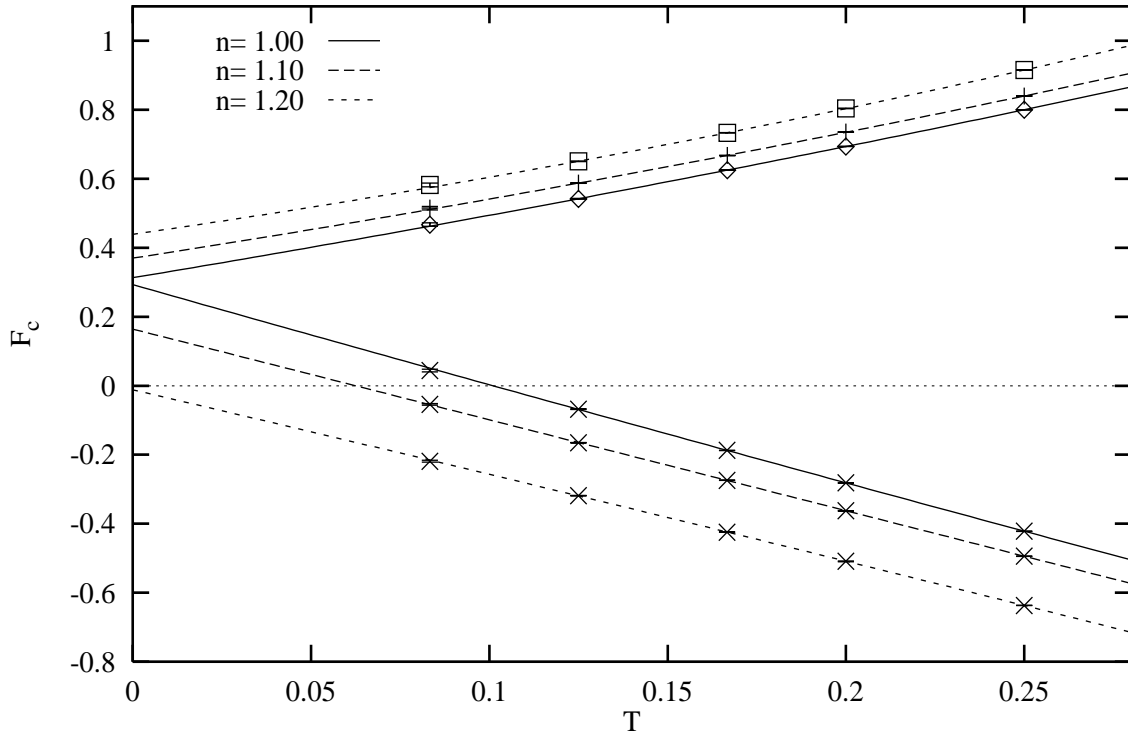


Abbildung 4.15: Phasendiagramm bei $U = 2$.

$U < 1$ die Phasengrenze zum Ferromagnetismus in Hartree-Fock-Näherung eingezeichnet. Die für $U > 1$ aufgetragene Kurve des t - J -Modells (welches hier einem Heisenberg-Modell entspricht) grenzt, wie gerade gesagt, direkt Ferro- von Antiferromagnetismus ab. Die Gründe für die Unsicherheit der aus Quanten-Monte-Carlo-Simulationen gewonnenen Grenze zum Antiferromagnetismus bei kleinen U wurden im Abschnitt 4.2 diskutiert.

Man kann erwarten, daß sich die homogene Phase in einem schmalen Streifen bis zu beliebig großen Werten von U erstreckt. Mit den hier verwendeten Methoden läßt sich diese Frage nicht klären.

In Abbildung 4.16 (unten) und 4.17 sind die Phasendiagramme für Dotierung bzw. endliche Temperaturen angegeben. Ihre Ähnlichkeit ist bemerkenswert. Offensichtlich führen Dotierung und Fluktuationen, wie sie bei endlichen Temperaturen auftreten, in einer sehr ähnlichen Weise zur Unterdrückung von magnetischer Ordnung. Allerdings strebt der kritische Wert von F^* für den Übergang zum Ferromagneten bei festem T mit $U \rightarrow \infty$ einem endlichen Wert der Größenordnung von T zu, während man bei $T = 0$ auch abseits halber Füllung ein Verschwinden von F_c für $U \rightarrow \infty$ erwarten kann.

Welche allgemeinen Schlüsse kann man nun zum Mechanismus des Ferromagnetismus ziehen? Von Anfang an war klar, daß der als ferromagnetischer Heisenberg-Austausch wirkende F -Term in unserem Modell letztendlich den Übergang zum Ferro-

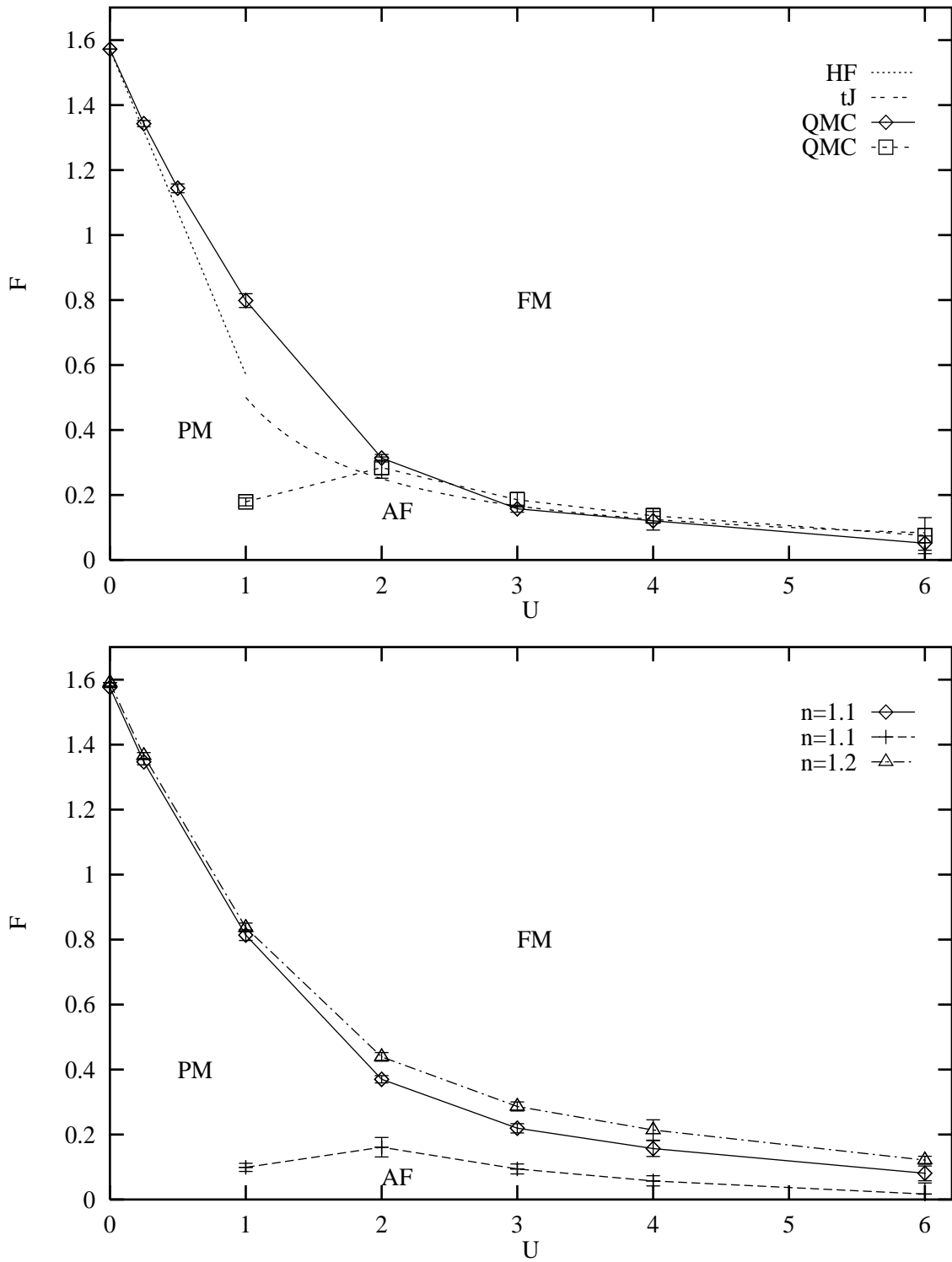


Abbildung 4.16: Phasendiagramme bei $T = 0$. Oben für das halbgefüllte Band, unten für den dotierten Fall.

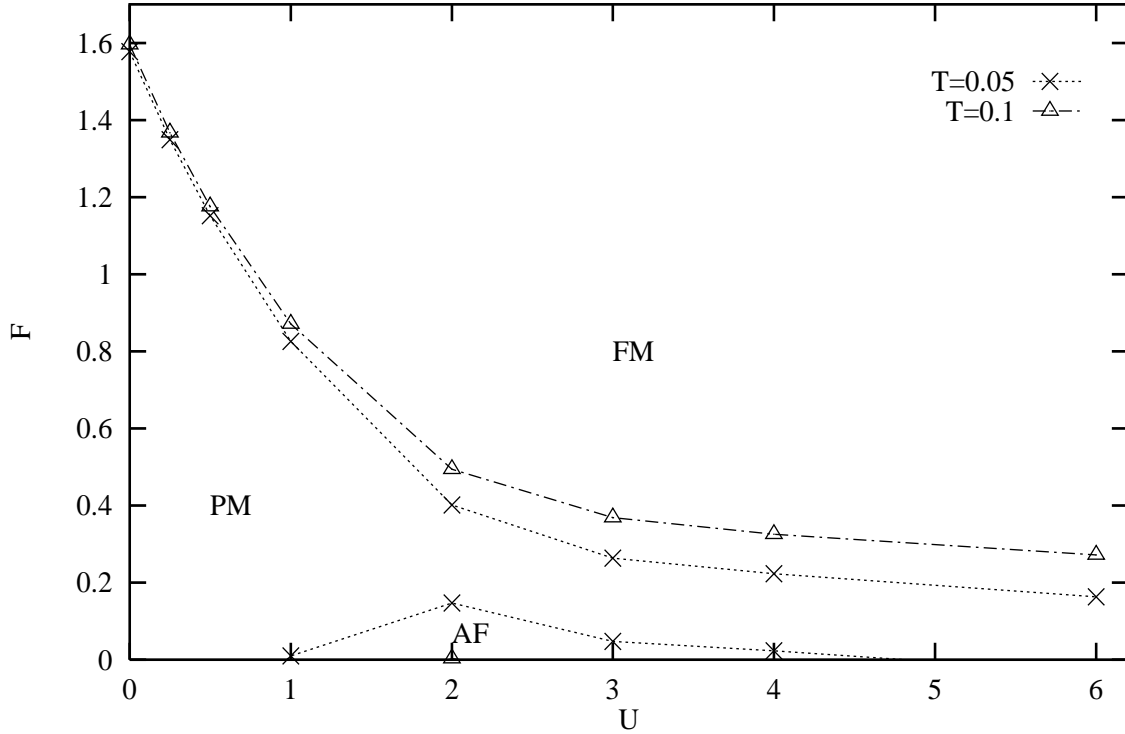


Abbildung 4.17: Phasendiagramm bei endlichen Temperaturen

magnetismus bewirkt. Bei halber Bandfüllung und $U \rightarrow \infty$ ist das effektive Heisenberg-Modell ohne F -Term maximal entartet (alle Zustände haben die gleiche Energie), so daß ein beliebig kleiner F -Term bei $T = 0$ zur Symmetriebrechung führt. Dieser Fall zeichnet sich dadurch aus, daß jeder Gitterplatz exakt mit einem Elektron besetzt ist. Der im Heisenberg-Modell zu berücksichtigende Spin ist also der eines Elektrons. Sowohl $U < \infty$ als auch $n \neq 1$ oder $T > 0$ führen zu Doppelbesetzungen und/oder leeren Gitterplätzen. Da im Fall von Doppelbesetzung die Elektronen auf einem Gitterplatz entgegengesetzten Spin haben, verringert sich der „effektive Spin“, welcher sich unter dem Einfluß einer Wechselwirkung ausrichten kann. Da der F -Term eine Nächst-Nachbar-Wechselwirkung zwischen den Spins beschreibt, wird (bei festem Wert von F) in diesem Fall sein Einfluß kleiner. Um mit wohldefinierten Begriffen zu arbeiten, betrachten wir im folgenden den Betrag des Quadrats der lokalen Magnetisierung.

Die Abhängigkeit von n läßt sich unter vereinfachenden Annahmen auf eine Abhängigkeit von den Doppelbesetzungen zurückführen. Dazu bilden wir (exakt) den Erwartungswert der mit dem F -Term assoziierten Energie pro Gitterplatz:

$$\langle \mathcal{H}_F \rangle = -\frac{1}{N} \sum_{\alpha, i \in \alpha, \sigma} \langle n_{i\alpha}^\sigma \rangle \frac{F^*}{2} \sigma m_{\bar{\alpha}} + \frac{F^*}{4} m_A m_B \quad (4.29)$$

$$= -\frac{F^*}{4} m_A m_B \quad (4.30)$$

Dabei sind m_A und m_B die Erwartungswerte des Operators der Magnetisierung

$$\hat{m}_i = \hat{n}_i^\uparrow - \hat{n}_i^\downarrow, \quad (4.31)$$

gemittelt über die A - bzw B -Gitterplätze. In der räumlich homogenen Phase sind die Erwartungswerte auf beiden Untergittern gleich, daher gilt:

$$\langle \mathcal{H}_F \rangle = -\frac{F^*}{4} \langle \hat{m} \rangle^2 \quad (4.32)$$

In der homogenen, paramagnetischen Phase verschwindet der Erwartungswert der Magnetisierung, also auch der Erwartungswert des Energieterms:

$$\langle \mathcal{H}_F \rangle_{\text{hom}} = 0 \quad (4.33)$$

Den Einfluß des F -Terms können wir nun leicht abschätzen. Wegen

$$\langle \hat{m} \rangle^2 \leq \langle \hat{m}^2 \rangle \quad (4.34)$$

ist die \mathcal{H}_F bei gegebenem $\langle \hat{m}^2 \rangle$ nach unten begrenzt durch

$$\langle \mathcal{H}_F \rangle \geq -\frac{F^*}{4} \langle \hat{m}^2 \rangle. \quad (4.35)$$

Der Erwartungswert $\langle \hat{m}^2 \rangle$ läßt sich wiederum durch die Doppelbesetzungs-Wahrscheinlichkeit d ausdrücken (nicht zu verwechseln mit der Dimension):

$$\begin{aligned} \langle \hat{m}^2 \rangle &= \langle (\hat{n}^\uparrow - \hat{n}^\downarrow)^2 \rangle \\ &= \langle \hat{n}^\uparrow + \hat{n}^\downarrow \rangle - 2\langle \hat{n}^\uparrow \hat{n}^\downarrow \rangle \\ &= n - 2d \end{aligned} \quad (4.36)$$

Die Doppelbesetzungs-Wahrscheinlichkeit d wurde während der Quanten-Monte-Carlo-Simulationen jeweils für die homogene Phase bestimmt. Daher läßt sich die aus dem F -Term erwachsende Energiedifferenz für folgenden hypothetischen Phasenübergang berechnen: Bei einer festen Doppelbesetzungs-Wahrscheinlichkeit d gehe das System von der paramagnetischen Phase in einen (für dieses d) maximal polarisierten Zustand über. Dann beträgt die Energiedifferenz

$$\Delta \mathcal{H}_F = -\frac{F^*}{4} \langle \hat{m}^2 \rangle = -\frac{F^*}{4} (n - 2d). \quad (4.37)$$

In diesem Fall könnte man also erwarten, daß $\frac{F^*}{4} (n - 2d)$ eine relevante Energieskala liefert. In Abbildung 4.18 ist links für $T = 1/8$ die Abhängigkeit von F_c , dem kritischen Wert von F^* für den Übergang zum Ferromagnetismus, von der Bandfüllung n aufgetragen. Diese Abbildung (im wesentlichen identisch mit Abb. 4.8) zeigt bei großen Werten von U eine starke n -Abhängigkeit. Rechts erkennt man, daß die Größe $F_c m^2$ bei großem U nur noch sehr schwach von n abhängt. Das ist ein Indiz dafür, daß die angegebene

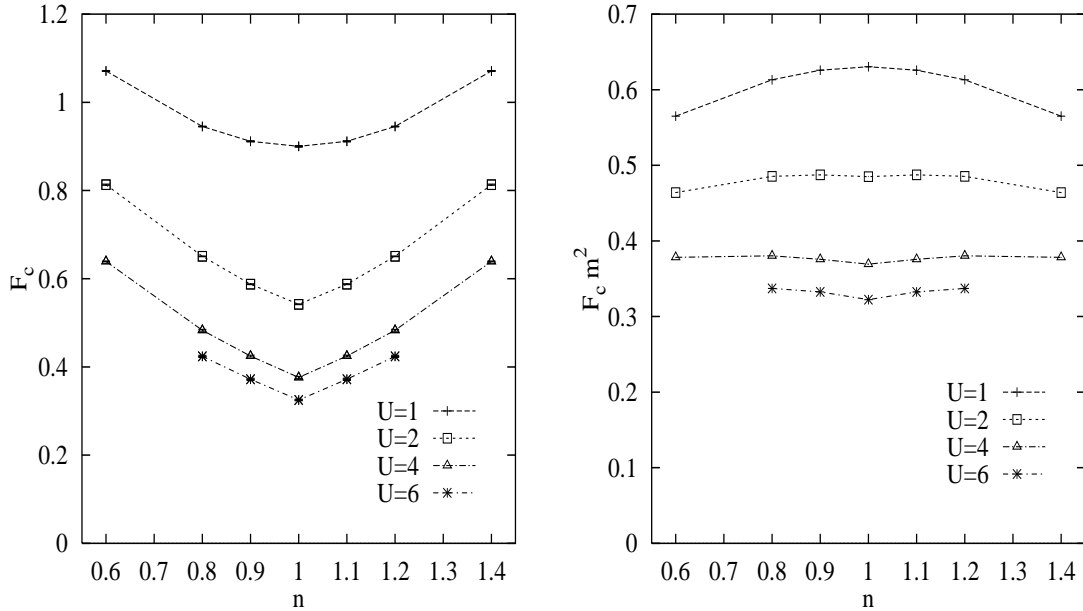


Abbildung 4.18: Links: F_c bei $T = 1/8$. Rechts: $F_c m^2$ bei $T = 1/8$

oder eine dazu proportionale Energieskala zumindest approximativ bei großen Werten von U tatsächlich auch für unser Modell relevant ist. Um genauere Aussagen machen zu können, müßte man Rechnungen in der symmetriebrochenen Phase ausführen. Dann könnte man feststellen, wie sich d bei dem Übergang ändert und wie stark polarisiert der ferromagnetische Zustand nahe der Phasengrenze ist.

Die Aussage, daß die Energie $\frac{F^*}{4}(n - 2d)$ relevant sein könnte, soll keinesfalls implizieren, daß die Terme des Hubbard-Modells kleiner oder unwichtiger sind. Da diese anderen Terme aber von F unabhängig sind, spielen sie bei für die Parametrisierung des Einflusses des F -Terms keine Rolle. Die Phasengrenzen werden dagegen vom Zusammenspiel aller Terme bestimmt.

Ein wichtiger Punkt ist, daß der Ordnungsparameter sich bei Phasenübergängen zweiter Ordnung, wie wir sie in unseren Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen angenommen haben, kontinuierlich ändert. Deshalb hätten wir in obigen Überlegungen eigentlich Ableitungen von Energien nach dem Ordnungsparameter betrachten müssen. Bis das geschehen ist, handelt es sich bei dem Versuch, den Einfluß des F -Terms zu parametrisieren, um eine spekulative Interpretation der numerischen Ergebnisse.

Bevor wir zum der Behandlung des Verhaltens von Antiferromagneten im äußeren Feld kommen, wollen wir die wesentlichen Aussagen dieses Kapitels zusammenfassen:

Wir haben das um Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen erweiterte Hubbard-Modell (2.6) im Limes unendlicher Raumdimensionen in einem weiten Bereich des durch die Hubbard-Wechselwirkung U , die Temperatur T , die Bandfüllung n und die Nächst-Nachbar-Wechselwirkungs-Parameter F^* und V^* aufgespannten Phasenraums auf kommensurable magnetische Symmetriebrechung hin untersucht. Für die Bestimmung der

Phasengrenzen zu magnetisch geordneten Phasen konnte gemäß der Diskussion in Abschnitt 4.3 der Dichte-Anteil der Nächst-Nachbar-Wechselwirkung unberücksichtigt bleiben.

Mit Quanten-Monte-Carlo-Simulationen wurden bei endlichen Temperaturen die Phasengrenzen von der homogenen zur ferro- bzw. antiferromagnetischen Phase berechnet. Diese Phasengrenzen stimmen nur bei halber Bandfüllung und $T = 0$ im Rahmen der Fehler überein. Insbesondere kommt es nicht zu einem Überkreuzen, weshalb Rechnungen in den symmetriegebrochenen Phasen und ein Vergleich von Freien Energien nicht notwendig waren.

Die so für die Phasengrenze zum Ferromagneten gewonnenen Ergebnisse konnten bei kleinem U mit analytischen Rechnungen in Hartree-Fock-Näherung verglichen werden. Die Übereinstimmung für $U \rightarrow 0$ war bei allen Dichten und Temperaturen hervorragend. Für halbe Bandfüllung und große Werte von U wurden die nach $T \rightarrow 0$ extrapolierten Daten mit der Vorhersage des tJ - (bzw. Heisenberg-)Modells verglichen. Die Übereinstimmung war (im Rahmen der hier größeren Fehler) ebenfalls gut. Damit haben die verwendeten Methoden (Bestimmung von Phasenübergängen anhand von Suszeptibilitäten, Quanten-Monte-Carlo-Methode, Extrapolationen) alle verfügbaren Tests bestanden. Da das Heisenberg-Modell unabhängig von der Dimension ist, konnte für große Werte von U sogar der Kontakt zu endlichen Dimensionen hergestellt werden.

Die Ergebnisse waren:

- Der kritische Wert von F^* für den Übergang zum Ferromagneten hat schon für nicht zu großes U eine realistische Größenordnung. Bei $U = 6$ und $T = 0$ wurde beispielsweise $F_c \approx 0.06$ berechnet.⁵
- Abseits halber Bandfüllung nimmt der kritische Wert von F^* zu. Zumindest im Limes unendlicher Dimensionen kann der Ferromagnetismus also nicht von der Unterdrückung des Antiferromagnetismus profitieren. Antiferromagnetische und ferromagnetische Phase haben abseits halber Füllung keine gemeinsame Grenze.
- Die Bedingungen an F und U für den Ferromagnetismus von Metallen ($n \neq 1$) unterscheiden sich nahe halber Bandfüllung nicht qualitativ von denen für Isolatoren ($n = 1$).
- Der Übergang von dem Hartree-Fock-Verhalten zu dem Heisenberg-Verhalten (bei halber Bandfüllung) ist „glatt“ und erfolgt bei $U \approx 1.5$.

⁵Hubbards grobe Abschätzung für Übergangsmetalle war $F/U \approx 1/400$ [Hub63].

Kapitel 5

Metamagnetismus im Hubbard-Modell mit Vorzugsrichtung

Die in diesem Kapitel vorgestellten Untersuchungen schließen direkt an von Karsten Held [Hel96] erzielten Ergebnisse an. Sie waren Teil der Einarbeitungsphase dieser Arbeit und vervollständigen die vorhandenen Erkenntnisse.

Gegenstand der Betrachtung ist das Hubbard-Modell (2.1) mit Kopplung (2.8) an ein äußeres Magnetfeld und der in Abschnitt 1.4 diskutierten Vorzugsrichtung. Die Charakterisierung des metamagnetischen Phasenübergangs erfolgt durch Berechnung von Magnetisierung und *staggered* Magnetisierung in der symmetriegebrochenen Phase. Um auch ferrimagnetische Mischphasen ($m \neq 0$ und $m_{st} \neq 0$) simulieren zu können, muß in einer *AB*-Phase gerechnet werden, in der die Möglichkeit der Symmetriebrechung in Orts- und Spinraum besteht. Die Green-Funktionen der *up*- und *down*-Elektronen auf dem *A*-Untergitter sind a priori unabhängig von einander und von denen des *B*-Gitters. Das Modell wird also durch $4L$ komplexe Zahlen (L ist die Anzahl betrachteter Matsubara-Frequenzen) beschrieben. Eine Kopplung der Spins bzw. der Untergitter erfolgt erst durch die Wechselwirkungen.

Die mit der Wahl der z -Achse als Vorzugsrichtung verknüpfte Zwangsbedingung wird dadurch realisiert, daß die bezüglich dieser Achse nichtdiagonalen Terme der Green-Funktion, die einer Magnetisierung in der xy -Ebene entsprechen, gleich Null gesetzt werden:

$$G_{\alpha}^{\downarrow\uparrow} = -\langle \Psi_{\alpha}^{\downarrow} \Psi_{\alpha}^{\uparrow*} \rangle \equiv 0 \quad (5.1)$$

Schon bekannt aus der Arbeit von K. Held war die Situation bei $U = 2$ und halber Bandfüllung. Wie in der Einleitung qualitativ dargestellt, tritt bei Temperaturen unterhalb der Néel-Temperatur im wachsenden Magnetfeld ein metamagnetischer Phasenübergang auf. Besonders interessant ist der Wechsel in der Ordnung mit sinkender Temperatur: von der Néel-Temperatur ausgehend ist der Übergang zunächst von zweiter Ordnung, unterhalb einer zweiten kritischen Temperatur, der sogenannten *trikritischen Temperatur* T_t , ist er von erster Ordnung. Der Punkt (T_t, h_t) , an dem die Phasen-

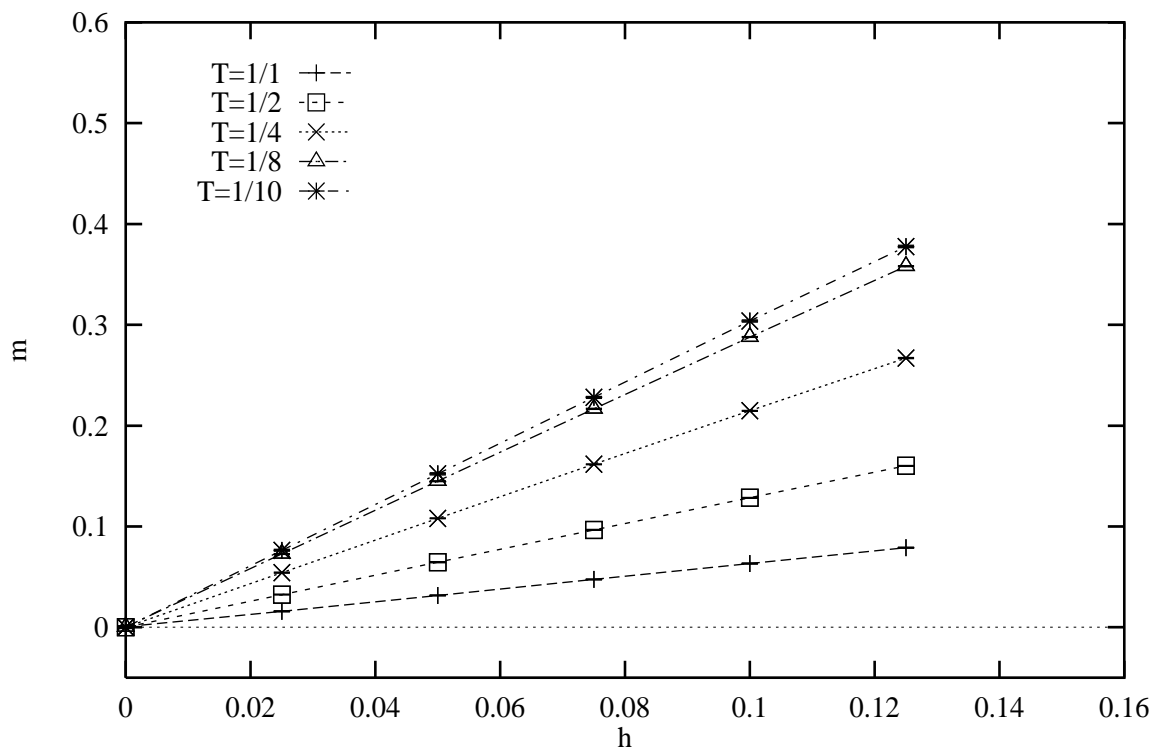


Abbildung 5.1: Magnetisierung bei $T > T_N$.

grenzen zusammenstoßen, wird nach Griffiths als trikritischer Punkt bezeichnet [Gri70]. Der Name beruht auf der Darstellung in dem um ein *staggered* Magnetfeld erweiterten Phasenraum. In diesem dreidimensionalen Raum laufen bei $(T = T_t, h = h_t, h_{st} = 0)$ drei Phasengrenzen zusammen.

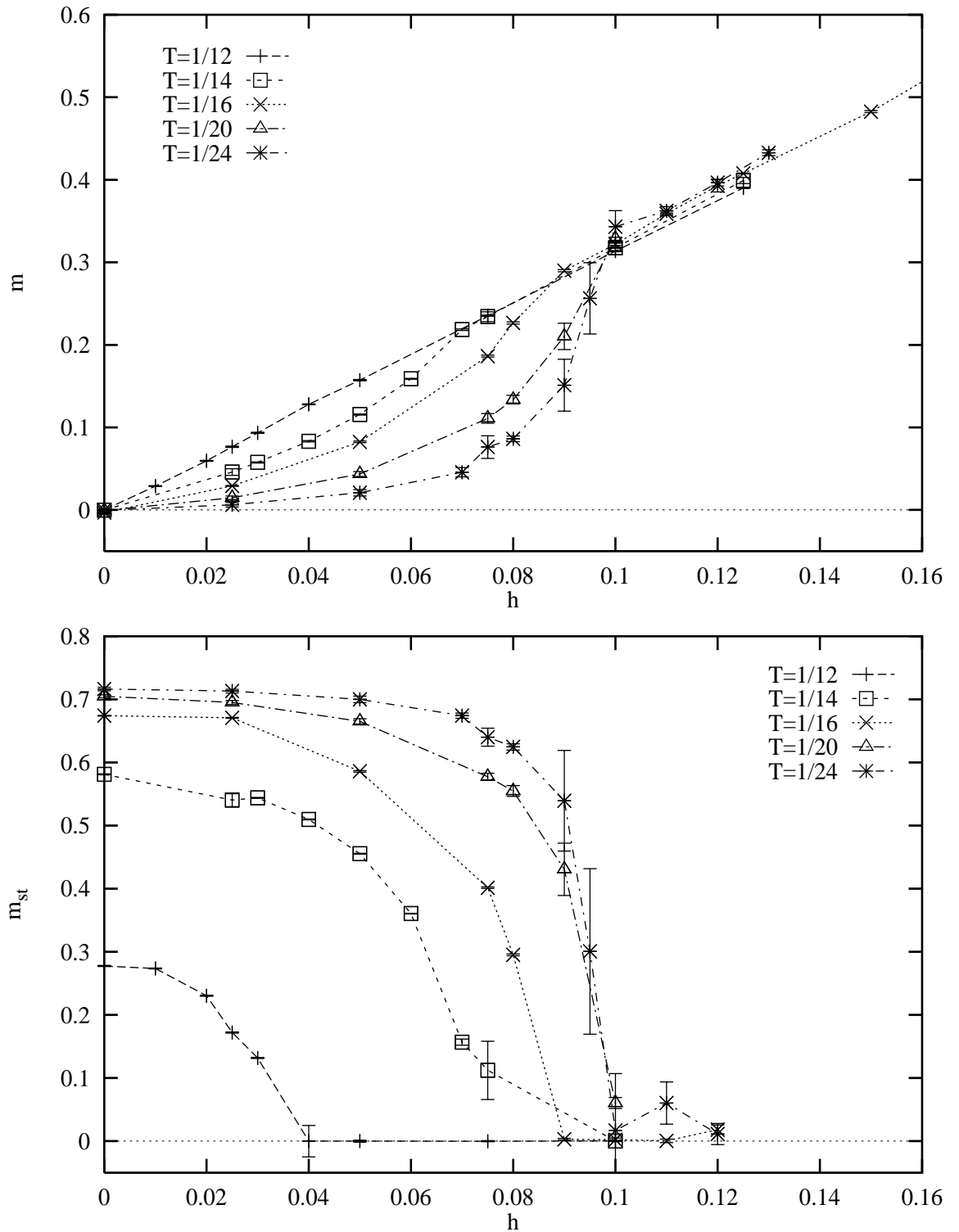
In dieser Arbeit sollte die Abhängigkeit von der Stärke der Hubbard-Wechselwirkung U beleuchtet werden. Dazu wurde das Modell bei $U = 1.5$ untersucht. Freie Parameter waren die Temperatur T (bzw. ihr Inverses $\beta = 1/T$) und das äußere Magnetfeld h .

5.1 Magnetisierungskurven

In Abbildung 5.1 ist die Magnetisierung für Temperaturen oberhalb der Néel-Temperatur aufgetragen.¹ Man erkennt das typische Verhalten eines Paramagneten. Die Suszeptibilität nimmt mit sinkender Temperatur zu.

Unterhalb der Néel-Temperatur setzt, wie man in Abbildung 5.2 erkennt, das metamagnetische Verhalten ein. Oben ist wieder die Magnetisierung, unten jetzt auch die *staggered* Magnetisierung aufgetragen. Das kontinuierliche Verschwinden des Ordnungs-

¹Die Verbindungslinien sind in diesem Kapitel stets „guide to the eye only“.

Abbildung 5.2: Magnetisierung (oben) und staggered Magnetisierung (unten), $T_t < T < T_N$.

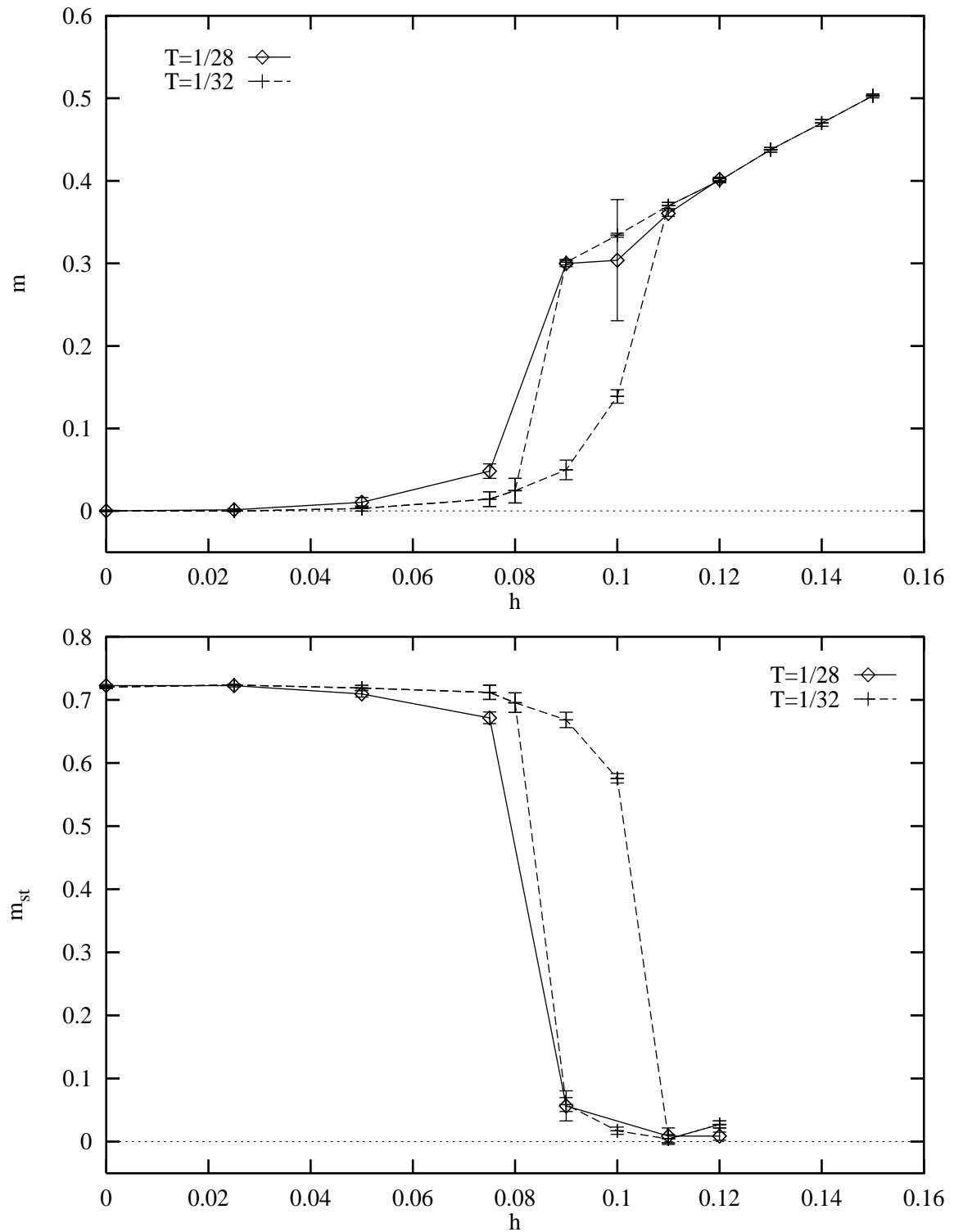


Abbildung 5.3: Magnetisierung (oben) und staggered Magnetisierung (unten) bei $T \approx T_t$.

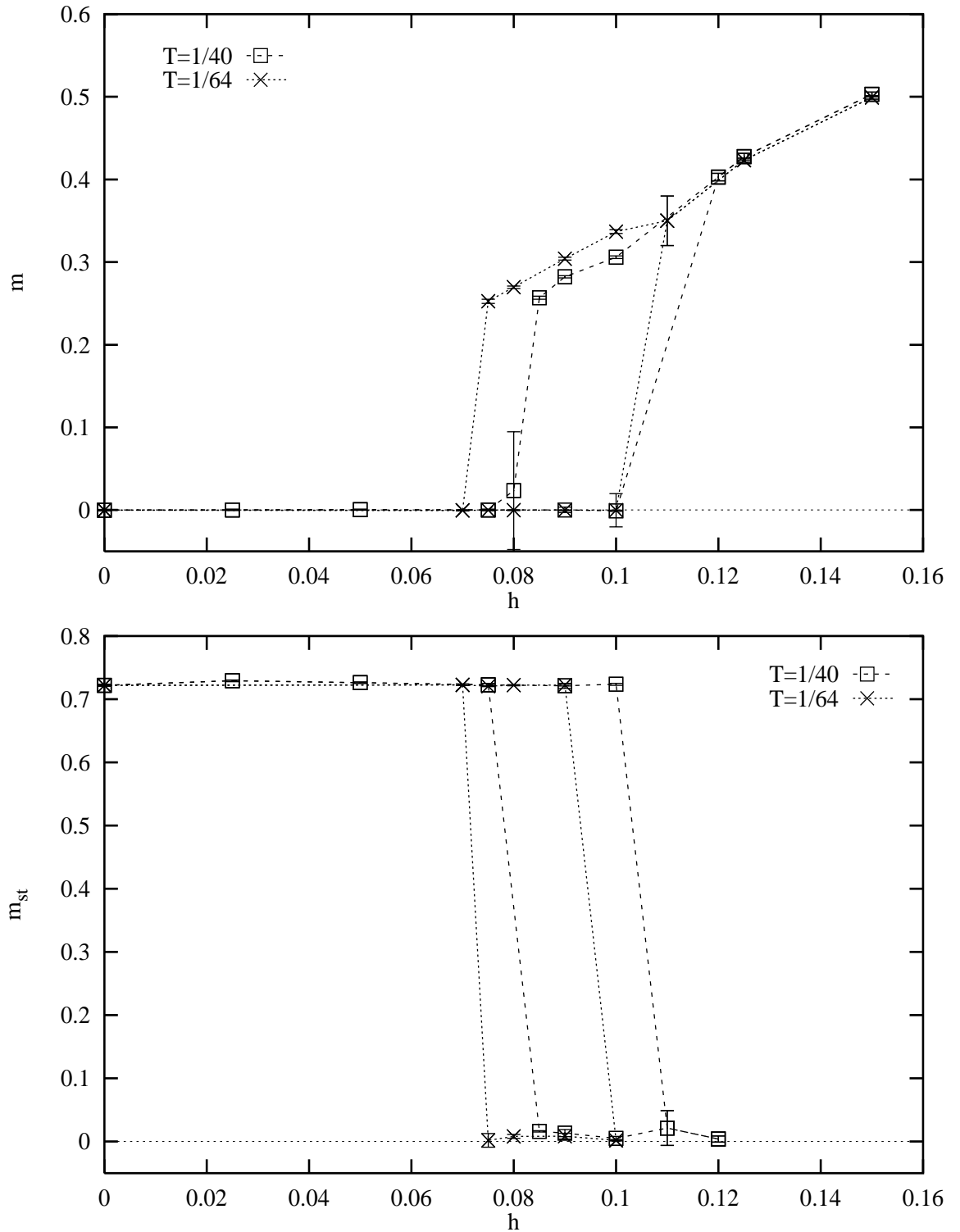


Abbildung 5.4: Magnetisierung (oben) und staggered Magnetisierung (unten) bei $T < T_t$.

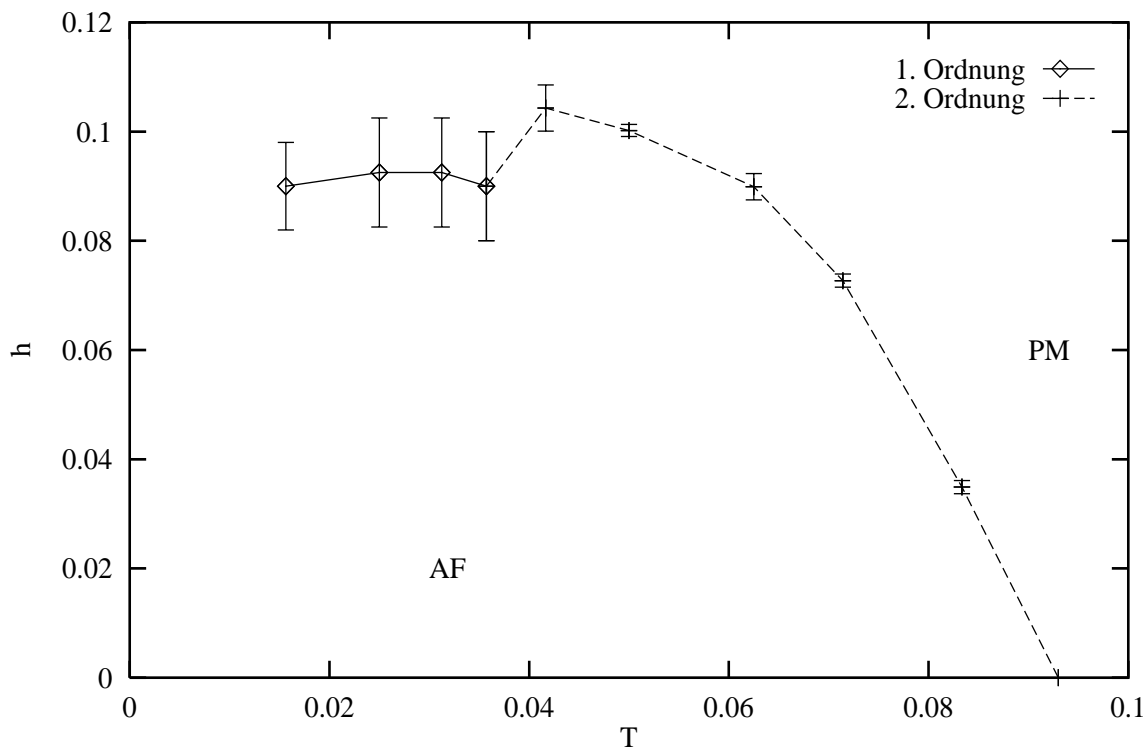


Abbildung 5.5: Metamagnetisches Phasendiagramm bei $U = 1.5$.

parameters als Funktion von h zeigt an, daß der Übergang bei diesen Temperaturen von zweiter Ordnung ist. Die Ergebnisse sind mit dem für *mean field*-Theorien typischen Exponenten von $1/2$ verträglich.

Abbildung 5.3 zeigt die entsprechenden Kurven bei Temperaturen im Bereich der trikritischen Temperatur. Während bei $T = 1/28$ noch ein kontinuierlicher, hysterese-freier Übergang beobachtet wird, ist bei $T = 1/32$ schon deutlich Hysterese zu erkennen.

In Abbildung 5.4 sind schließlich Ergebnisse bei noch tieferen Temperaturen gezeigt. Hier ist noch deutlicher zu sehen, daß die Phasenübergänge von erster Ordnung sind. In der Simulation wurde die Hysterese durch Rechnungen bei steigendem bzw. sinkendem Wert von h erreicht, wobei die Selbstenergie jeweils von einem Parametersatz zum nächsten übernommen wurde (vgl. Abschnitt 3.1.3). Man erkennt, daß der so numerisch bestimmte Hysteresebereich bei tiefen Temperaturen im Vergleich zum kritischen Magnetfeld selbst relativ breit ist. Bemerkenswert ist auch, daß das kritische Magnetfeld bei $T > T_t$ ein Maximum erreicht. Ein solches Maximum wurde experimentell in FeBr_2 nachgewiesen. Auch im Ising-Modell beobachtet man ein Maximum des kritischen Magnetfelds, der Übergang ist jedoch für alle Temperaturen $T > 0$ von zweiter Ordnung: $T_t = 0$ (Referenzen siehe [Hel96]).

Dieser Sachverhalt ist noch deutlicher im Phasendiagramm (Abbildung 5.5) zu sehen. Man erkennt einen „Knick“ der Phasengrenze am trikritischen Punkt, an dem der

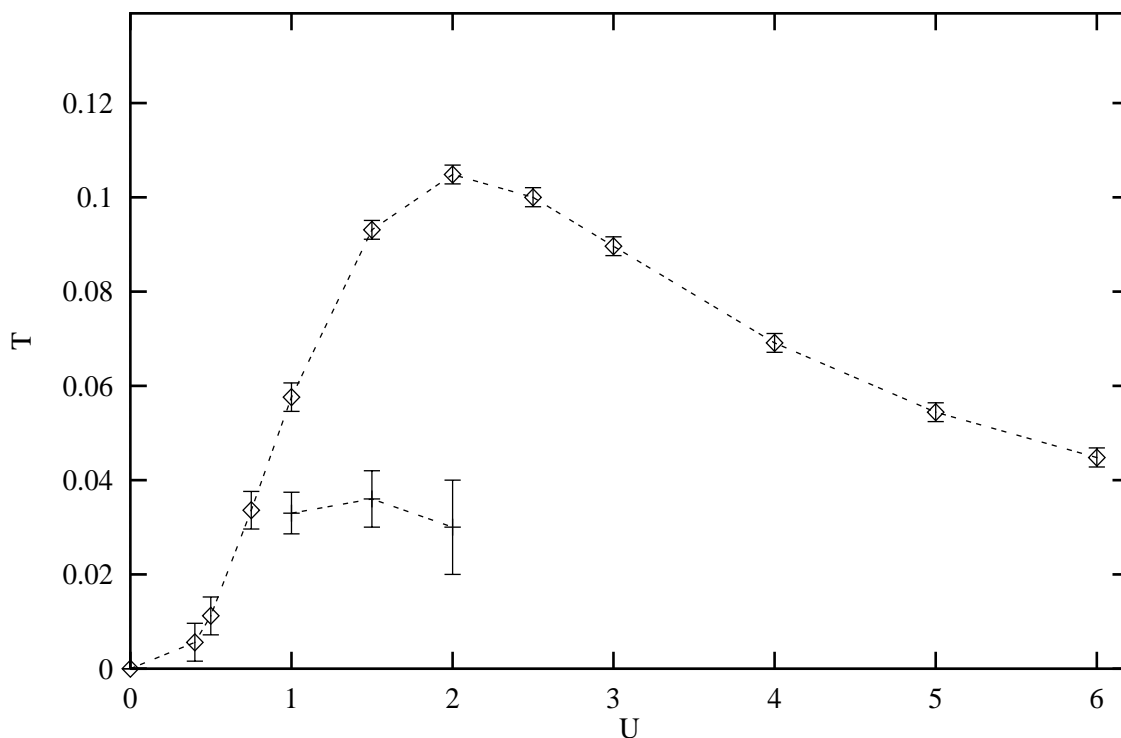


Abbildung 5.6: Verhalten von Néel-Temperatur T_N und trikritischer Temperatur T_t (unterhalb) als Funktion von U

Phasenübergang die Ordnung wechselt. Eine weitere, von diesem Punkt ausgehende Phasengrenze zwischen einer antiferromagnetischen und einer ferrimagnetischen Phase, wie sie bei $U = 2$ beobachtet worden war, konnte bei $U = 1.5$ nicht sicher bestimmt werden.

5.2 Einfluß der Hubbard-Wechselwirkung

Abbildung 5.6 zeigt neben dem schon aus Abbildung 4.1 bekannten Verlauf der Néel-Temperatur T_N den Verlauf der trikritischen Temperatur T_t als Funktion der Hubbard-Wechselwirkung U . Der Punkt bei $U = 1$ ist in neueren Untersuchungen von K. Held bestimmt worden. Offensichtlich ist die Abhängigkeit dieser Temperatur von U im untersuchten Bereich sehr schwach. Ein Vordringen zu noch höheren Werten von U wäre sicher möglich, wenn auch schwierig.² In diesem Bereich erwartet man ein schnelles Absinken von T_t auf Null, da das effektive Heisenberg-Modell aufgrund der Vorzugsrichtung einem Ising-Modell entspricht, und der Übergang für sehr große U folglich für

²Die Trotter-Zerlegung ist nur für $U\Delta\tau < 1$ sinnvoll. Für großes U und kleine Temperaturen wird also die notwendige Anzahl L von Diskretisierungsschritten groß.

alle Temperaturen von zweiter Ordnung ist. Dieses Szenario ist mit den vorliegenden Daten verträglich, läßt sich aber nicht aus diesen ableiten. Für kleine U erwartet man in Hartree-Fock-Näherung Phasenübergänge erster Ordnung über den gesamten Temperaturbereich ($T_N = T_t$).³ T_t hängt im beobachteten Bereich nur schwach von U ab. Dies spricht dafür, daß der Übergang in das Hartree-Fock-Verhalten erfolgt, indem T_t bei sinkendem U so lange nahezu konstant bleibt, bis $T_N \approx T_t$ ist. Die Frage, ob es ein kritisches $U > 0$ gibt, unterhalb dessen $T_N = T_t$ ist, oder ob sich ein Bereich des Phasenübergangs zweiter Ordnung bis $U = 0$ zieht, wird sich in Quanten-Monte-Carlo-Untersuchungen nicht klären lassen. Das hier beobachtete Verhältnis von T_N zu T_t variiert etwa zwischen 0.3 und 0.5. Dieser Wert liegt im Rahmen von experimentellen Ergebnissen.

Das Hubbard-Modell mit Vorzugsrichtung interpoliert also bei halber Bandfüllung zwischen dem Hartree-Fock- und dem Ising-Verhalten (Phasenübergang erster bzw. zweiter Ordnung). Im Gegensatz zu beiden genannten Modellen⁴ beschreibt es (auch) das Verhalten bei dem interessanten Fall mittlerer Kopplung. Die diskutierten Ergebnisse geben wichtige experimentelle Befunde qualitativ richtig wieder.

³Für einen Überblick siehe [Law84].

⁴In einem Ising-Modell mit Nächst-Nachbar- und Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung findet man in *mean field*-Theorie Phasenübergänge erster und zweiter Ordnung [Kin74]. Eine Diskussion und weitere Referenzen finden sich in [Hel95, Hel96].

Kapitel 6

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das um Nächst-Nachbar-Wechselwirkung und die Ankopplung eines Magnetfeldes erweiterte Hubbard-Modell studiert. Mit Hilfe von QMC-Simulationen wurden im Limes unendlicher Dimension zum einen Phasengrenzen im feldfreien Fall (Kapitel 4) und zum anderen der metamagnetische Phasenübergang im äußeren Magnetfeld (Kapitel 5) untersucht.

Die verwendeten Methoden erlaubten es in beiden Fällen, zuverlässige Ergebnisse in dem Bereich mittlerer Kopplungsstärke zu erzielen, der analytischen Rechnungen nur schwer zugänglich ist. Bei den Untersuchungen zum Ferromagnetismus konnten neue Erkenntnisse auch abseits halber Bandfüllung gewonnen werden.

Ferromagnetismus

Die Einbeziehung von Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen führt auf natürliche Weise zu Ferromagnetismus. Im Zusammenspiel mit den Termen des Hubbard-Modells reicht schon eine schwache Nächst-Nachbar-Spin-Wechselwirkung aus, um den Phasenübergang zu bewirken. Hinweise auf die Möglichkeit einer ferromagnetischen Symmetriebrechung des reinen Hubbard-Modells wurden nicht gefunden.

Abseits halber Bandfüllung wird Ferromagnetismus unterdrückt. Die Abhängigkeit von der Bandfüllung ist „glatt“, so daß sich die Bedingungen für Ferromagnetismus bei Isolatoren und bei Metallen nicht qualitativ unterscheiden.

Die Übereinstimmung von für das reine Hubbard-Modell berechneten Néel-Temperaturen läßt erwarten, daß alle für die semielliptische Zustandsdichte des Bethe-Gitters erzielten Ergebnisse im wesentlichen auch für die Gaußsche Zustandsdichte des hyperkubischen Gitters gelten. Aus den Untersuchungen von M. Ulmke [Ulm96] wissen wir andererseits, daß auf Gittern mit singulärer Zustandsdichte (f.c.c. in $d = \infty$) Ferromagnetismus schon ohne Nächst-Nachbar-Spin-Wechselwirkung auftreten kann.

Es wäre also sehr interessant, unsere Untersuchungen mit einer realistischen, stark gepeakten Zustandsdichte zu wiederholen. Die Bedingungen für Ferromagnetismus sollten dann wesentlich günstiger sein. Als günstigste Füllung würde man diejenige erwarten, bei der die Fermi-Kante am Maximum der Zustandsdichte liegt.

Die simulierten Temperaturen waren vergleichsweise hoch. Es ist nicht völlig auszuschließen, daß Effekte, die erst bei tiefen Temperaturen einsetzen, „übersehen“ wurden, die Extrapolationen $T \rightarrow 0$ also ein falsches Bild liefern. Die in den Grenzfällen starker und schwacher Kopplung erzielten Übereinstimmungen mit analytischen Ergebnissen machen dies aber unwahrscheinlich.

Inkommensurable Spindichtewellen wurden in den Untersuchungen nicht berücksichtigt. Eine Bestimmung der zugehörigen Phasengrenzen wäre möglich und wünschenswert. Da die Spindichtewellen typischerweise stark antiferromagnetischen Charakter haben [Fre95], kann man vorab vermuten, daß sich die Phasengrenzen nicht zu stark von denen unterscheiden, die wir für den Übergang zum Antiferromagnetismus bestimmt haben.

Metamagnetismus

Zur Beschreibung des metamagnetischen Phasenübergangs ist offenbar die nullte Näherung in der Stärke der Nächst-Nachbar-Wechselwirkung ausreichend. Es ist dagegen notwendig, die Spin-Bahn-Kopplung, einen relativistischen Effekt, durch das Erzwingen einer Vorzugsrichtung zu berücksichtigen.

Die bei mittlerer Kopplungsstärke und halber Bandfüllung durchgeführten Untersuchungen zeigen das auch experimentell beobachtete Verhalten: Der im äußeren Feld beobachtete Phasenübergang ist unterhalb der Néel-Temperatur bis zur trikritischen Temperatur zweiter, darunter erster Ordnung. Die kritische Stärke des Magnetfeldes hat ein Maximum oberhalb der trikritischen Temperatur.

Eine wünschenswerte Erweiterung der Untersuchungen wäre die Einbeziehung der Spin-Bahn-Wechselwirkung auf einer mikroskopischeren Ebene.

Die Untersuchungen dieser Arbeit haben gezeigt, daß das erweiterte 1-Band, Spin-1/2 Hubbard-Modell neben nichtmagnetischen Phasen und Antiferromagnetismus in einem realistischen Parameterbereich auch itineranten Ferromagnetismus beschreibt.

Es ist eine interessante Fragestellung für zukünftige Untersuchungen, ob die Einbeziehung des Mehrband-Falles eine noch realistischere Beschreibung für die Physik der Übergangsmetalle, insbesondere für Ferromagnetismus, liefern kann.

Anhang A

Formalismus

Zur Begriffsklärung sollen an dieser Stelle einige Definitionen des Formalismus der Quantenstatistik für endliche Temperaturen angeführt werden. Eine Einführung kann hier nicht erfolgen, diese findet man in entsprechenden Lehrbüchern wie z.B. [Neg88, Ric88]. Zu beachten ist, daß in der Literatur mehrere Konventionen bezüglich der Definition von Green-Funktion und Zeitordnungsoperator in Gebrauch sind. Die hier verwendete folgt [Ric88]. Sie weicht teilweise von den Definitionen in [Neg88] ab.

Der Ein-Teilchen-Propagator, auch als Ein-Teilchen-Green-Funktion bezeichnet, hat in der Realzeit-Darstellung die Form

$$G_{ij}^{\sigma}(t, t') = -i \langle T [c_{i\sigma}^{\dagger}(t) c_{j\sigma}(t')] \rangle. \quad (\text{A.1})$$

Die Erzeuger- und Vernichtoperatoren sind hier in der Heisenberg-Darstellung geschrieben, T bezeichnet den Zeitordnungsoperator, die Klammern $\langle \rangle$ stehen für eine thermische Mittelung. Da der bei der thermische Mittelung auftretende Boltzmann-Faktor einen reellen Exponenten $-\beta H$ hat, die Heisenberg-Darstellung der zu mittelnden Operatoren aber Faktoren der Form $\exp(iHt)$ involviert, ist es zweckmäßig, zu imaginären Zeiten $\tau = it$ überzugehen. Die Ein-Teilchen-Green-Funktion, in imaginärer Zeit dargestellt, ist analog zu (A.1) definiert. Wegen der zeitlichen Translationsinvarianz kann sie in unserem Modell nur von Zeitdifferenzen abhängen:

$$G_{ij}^{\sigma}(\tau, \tau') = G_{ij}^{\sigma}(\tau - \tau') = \langle T [c_{i\sigma}^{\dagger}(\tau) c_{j\sigma}(\tau')] \rangle \quad (\text{A.2})$$

Der Zeitordnungsoperator T ordnet hier imaginäre Zeiten.

Häufig geht man durch Fourier-Transformation zur Darstellung in fermionischen Matsubara-Frequenzen

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \quad n \text{ ganzzahlig}, \quad (\text{A.3})$$

über. In der kontinuierlichen Version lautet diese:

$$G_{ij}^{\sigma}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} G_{ij}^{\sigma}(\omega_n) \quad (\text{A.4})$$

$$G_{ijn}^{\sigma} \equiv G_{ij}^{\sigma}(\omega_n) = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} G_{ij}^{\sigma}(\tau) \quad (\text{A.5})$$

In der diskretisierten Version, in der das Intervall $[0, \beta]$ in L Intervalle der Länge $\Delta\tau$ eingeteilt ist, finden nur L Matsubara-Frequenzen Berücksichtigung:

$$G_{\alpha}^{\sigma}(l\Delta\tau) = \frac{1}{T} \sum_{n=-L/2}^{L/2} G_{\alpha n}^{\sigma} e^{i\omega_n l\Delta\tau} \quad G_{\alpha n}^{\sigma} = \Delta\tau \sum_{l=0}^{L-1} G_{\alpha}^{\sigma}(l\Delta\tau) e^{-i\omega_n l\Delta\tau} \quad (\text{A.6})$$

Die Ein-Teilchen-Green-Funktion beschreibt die Propagation der Elektronen. Insbesondere gibt die gleichzeitige, lokale Ein-Teilchen-Green-Funktion die (spinabhängige) Dichte am Gitterplatz i an:

$$n_i^{\sigma} = 1 + G_{ii}^{\sigma}(\tau = 0) = 1 + \frac{1}{\beta} \sum_n G_{ii}^{\sigma} \quad (\text{A.7})$$

Im freien Fall hängt die impuls- und frequenzabhängige Green-Funktion einfach mit der Ein-Teilchen-Dispersion $\epsilon_{\mathbf{k}}$ des nichtwechselwirkenden Systems zusammen:

$$G_{\mathbf{k}n}^{0\sigma} = \frac{1}{i\omega_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} \quad (\text{A.8})$$

Folglich läßt sich der lokale Propagator durch die nichtwechselwirkende Zustandsdichte $D(\epsilon)$ ausdrücken:

$$G_{ii}^{0\sigma} = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{i\omega_n + \mu - \epsilon} \quad (\text{A.9})$$

Die Selbstenergie Σ ist so definiert, daß sie den Übergang vom nichtwechselwirkenden zum wechselwirkenden System beschreibt:

$$G_{ij}^{\sigma}(i\omega_n) = G_{ij}^{0\sigma}(i\omega_n - \Sigma_{ij}^{\sigma}(i\omega_n)) \quad (\text{A.10})$$

Anhang B

Berechnung der Suszeptibilitäten im erweiterten Hubbard-Modell

Wir hatten im Abschnitt 2.4.2 gesehen, daß die Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen im Limes hoher Dimensionen lediglich zu einer spin- und untergitterabhängigen Verschiebung des chemischen Potentials führen. Bis auf Konstanten waren die Zusatzterme in Gleichung (2.25) die folgenden:

$$\mathcal{H}_{nn} = \sum_{i,\alpha,\sigma} n_{i\alpha}^{\sigma} \left(-\frac{F^*}{2} \sigma m_{\bar{\alpha}} + \left(V^* - \frac{1}{2} F^* \right) n_{\bar{\alpha}} \right) \quad (\text{B.1})$$

Damit können wir die Verallgemeinerung von (3.40) aufschreiben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_{\alpha n}^{\sigma}}{\partial x} &= T \sum_{\sigma' n'} \Gamma_{nn'}^{\alpha \sigma \sigma'} \left[\gamma_{\alpha n'}^{\sigma' x} - \left(V^* - \frac{F^*}{2} \right) \sum_{\sigma''} \frac{\partial \langle n_{\bar{\alpha}}^{\sigma''} \rangle}{\partial x} + \frac{F^*}{2} \sum_{\sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{\partial \langle n_{\bar{\alpha}}^{\sigma''} \rangle}{\partial x} \right] \\ &= T \sum_{\sigma' n'} \Gamma_{nn'}^{\alpha \sigma \sigma'} \left[\gamma_{\alpha n'}^{\sigma' x} + \sum_{\sigma''} \left[\left(\frac{F^*}{2} - V^* \right) + \frac{F^*}{2} \sigma' \sigma'' \right] T \sum_{n''} \frac{\partial G_{\bar{\alpha} n''}^{\sigma''}}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Um ein Gleichungssystem für die Green-Funktionen eines Untergitters zu bekommen, müssen wir die Symmetrie der betrachteten Suszeptibilität berücksichtigen:

$$\frac{\partial G_{\bar{\alpha} n''}^{\sigma''}}{\partial x} = \begin{cases} \frac{\partial G_{\alpha n''}^{\sigma''}}{\partial x} & \text{für } x = h, \mu \\ -\frac{\partial G_{\alpha n''}^{\sigma''}}{\partial x} & \text{für } x = h_{st}, \mu_{CDW} \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

Wir definieren daher einen Symmetriefaktor:

$$s = \begin{cases} +1 & \text{für } x \text{ antisymmetrisch bzgl. } \alpha \\ -1 & \text{für } x \text{ symmetrisch bzgl. } \alpha \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Mit den Abkürzungen

$$\tilde{G}_\alpha^\sigma = T \sum_n \frac{\partial G_{\alpha n}^\sigma}{\partial x} \quad (\text{B.5})$$

$$\tilde{\Gamma}_\alpha^{\sigma\sigma'} = T^2 \sum_{n n'} \Gamma_{n n'}^{\alpha\sigma\sigma'} \quad (\text{B.6})$$

$$g_\alpha^\sigma = T^2 \sum_{\sigma' n n'} \Gamma_{n n'}^{\alpha\sigma\sigma'} \gamma_{\alpha n'}^{\sigma'x} \quad (\text{B.7})$$

läßt sich die über n summierte und mit T multiplizierte Gleichung (B.2) kompakt schreiben:

$$\tilde{G}_\alpha^\sigma = g_\alpha^\sigma + s \sum_{\sigma' \sigma''} \tilde{\Gamma}_\alpha^{\sigma\sigma'} \left[\left(\frac{F^*}{2} - V^* \right) + \frac{F^*}{2} \sigma' \sigma'' \right] \tilde{G}_\alpha^{\sigma''} \quad (\text{B.8})$$

Damit haben wir also ein inhomogenes Gleichungssystem für die Summen der Ableitungen der Green-Funktionen gewonnen. Die Kopplung zwischen verschiedenen σ hat ihre Ursache in der Spinabhängigkeit der Wechselwirkung. Die Diagonalität bzgl. n resultiert aus dem statischen Charakter der Hartree-Fock-Näherung, die Diagonalität bzgl. α aus der Annahme der Homogenität (Rechnen in homogener Phase).

Zur Lösung schreiben wir das System als Matrix-Gleichung:

$$\begin{pmatrix} \tilde{G}_\alpha^\uparrow \\ \tilde{G}_\alpha^\downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_\alpha^\uparrow \\ g_\alpha^\downarrow \end{pmatrix} + s \begin{pmatrix} \tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\uparrow} & \tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\downarrow} \\ \tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\uparrow} & \tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F^* - V^* & V^* \\ V^* & F^* - V^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{G}_\alpha^\uparrow \\ \tilde{G}_\alpha^\downarrow \end{pmatrix} \quad (\text{B.9})$$

Wir führen weitere Abkürzungen ein:

$$a = s(F^* - V^*), \quad b = -sV^*$$

und multiplizieren die beiden Matrizen in (B.9) aus:

$$\begin{pmatrix} 1 - a\tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\uparrow} - b\tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\downarrow} & -b\tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\uparrow} - a\tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\downarrow} \\ -a\tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\uparrow} - b\tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\downarrow} & 1 - b\tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\uparrow} - a\tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{G}_\alpha^\uparrow \\ \tilde{G}_\alpha^\downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_\alpha^\uparrow \\ g_\alpha^\downarrow \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

Die Lösung lautet (g_α^σ wieder eingesetzt):

$$\begin{pmatrix} \tilde{G}_\alpha^\uparrow \\ \tilde{G}_\alpha^\downarrow \end{pmatrix} = \frac{1}{\det A} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 - b\tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\downarrow} - a\tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\uparrow} & b\tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\uparrow} + a\tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\downarrow} \\ a\tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\uparrow} + b\tilde{\Gamma}_\alpha^{\downarrow\downarrow} & 1 - a\tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\uparrow} - b\tilde{\Gamma}_\alpha^{\uparrow\downarrow} \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} T^2 \sum_{\sigma' n n'} \Gamma_{n n'}^{\alpha\uparrow\sigma'} \gamma_{\alpha n'}^{\sigma'x} \\ T^2 \sum_{\sigma' n n'} \Gamma_{n n'}^{\alpha\downarrow\sigma'} \gamma_{\alpha n'}^{\sigma'x} \end{pmatrix} \quad (\text{B.11})$$

Dieser Ausdruck für \tilde{G}_α^σ kann in Gleichung (B.2) eingesetzt werden. Man erhält dann einen Ausdruck der Form:

$$\frac{\partial G_{\alpha n}^\sigma}{\partial x} = T \sum_{\sigma' n'} \Gamma_{\mathbf{V}\mathbf{F}}^{\alpha\sigma\sigma'} \gamma_{\alpha n'}^{\sigma'x} \quad (\text{B.12})$$

Das so definierte $\Gamma_{\mathbf{V}\mathbf{F}}^{\alpha\sigma\sigma'}$ kann nun statt $\Gamma_{n n'}^{\alpha\sigma\sigma'}$ in Gleichung (3.46) eingesetzt werden, um $\gamma_{\mathbf{V}\mathbf{F}}^{\sigma'x}$ und letztendlich die Suszeptibilitäten des erweiterten Hubbard-Modells in der homogenen Phase zu berechnen.

Anhang C

Sommerfeld-Entwicklung

Allgemeine Form

Die Sommerfeld-Entwicklung (Darstellung nach [Ash76]) wird angewandt auf Integrale der Form

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon H(\epsilon) f(\epsilon), \quad (\text{C.1})$$

wobei H meistens im wesentlichen die Zustandsdichte ist und f die Fermifunktion

$$f(\epsilon) = \frac{1}{\exp(\frac{\epsilon-\mu}{kT}) + 1} \quad (\text{C.2})$$

bezeichnet. Damit obiges Integral für jedes μ existiert, darf $H(\epsilon)$ für $\epsilon \rightarrow \infty$ nicht schneller als eine Potenz von ϵ divergieren und muß für ϵ gegen $-\infty$ so schnell verschwinden, daß das Integral

$$K(\epsilon) := \int_{-\infty}^{\epsilon} H(\epsilon') d\epsilon' \quad (\text{C.3})$$

existiert. Eine partielle Integration von I liefert (die Randterme verschwinden wegen $f \rightarrow 0$ bzw. $K \rightarrow 0$ für $\epsilon \rightarrow \pm\infty$):

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon K(\epsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) \quad (\text{C.4})$$

Falls $H(\epsilon)$ (und damit auch $K(\epsilon)$) analytisch in ϵ ist¹, kann man $K(\epsilon)$ in eine Taylor-Reihe entwickeln:

$$K(\epsilon) = K(\mu) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\epsilon - \mu)^k}{k!} \left. \frac{d^k K(\epsilon)}{d\epsilon^k} \right|_{\epsilon=\mu} \quad (\text{C.5})$$

Das Einsetzen der Entwicklung (C.5) in Gleichung (C.4) liefert:

$$I = \int_{-\infty}^{\mu} d\epsilon H(\epsilon) + \sum_{k=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\epsilon - \mu)^k}{k!} \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) d\epsilon \left. \frac{d^{k-1} H(\epsilon)}{d\epsilon^{k-1}} \right|_{\epsilon=\mu} \quad (\text{C.6})$$

$$= \int_{-\infty}^{\mu} d\epsilon H(\epsilon) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (kT)^{2n} \left. \frac{d^{2n-1} H(\epsilon)}{d\epsilon^{2n-1}} \right|_{\epsilon=\mu} \quad (\text{C.7})$$

¹Diese Voraussetzung ist im allgemeinen nicht erfüllt! Siehe weiter unten.

$$\text{mit } a_n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^{2n}}{(2n)!} \left(-\frac{d}{dx} \frac{1}{e^x + 1}\right) dx \quad (\text{C.8})$$

Die Zahlenfolge a_n läßt sich durch die Riemannsche Zeta-Funktion ausdrücken, die Glieder sind:

$$a_1 = \frac{\pi^2}{6} \approx 1.64, \quad a_2 = \frac{7\pi^4}{360} \approx 1.89, \quad a_3 = \frac{31\pi^6}{15120} \approx 1.97, \quad a_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 2 \quad (\text{C.9})$$

Anwendung auf Zustandsdichte des Bethe-Gitters

Die Zustandsdichte des Bethe-Gitters hat (Normierung der Energie auf die halbe Bandbreite) die Form:

$$D(\epsilon) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \sqrt{1 - \epsilon^2}, & |\epsilon| \leq 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{C.10})$$

Um die bei der Sommerfeld-Entwicklung gemachten Fehler zu illustrieren und aufzuzeigen, wie man prinzipiell vorgehen müßte, um diese zu vermeiden, wollen wir das Integral in (4.16) nach der Temperatur entwickeln. Dabei untersuchen wir den Fall $n = 1$, also $\mu = 0$:

$$\begin{aligned} I &:= \frac{\beta}{4} \int d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{\cosh^2(\beta \frac{\epsilon - \mu}{2})} = \int_{-1}^1 d\epsilon D(\epsilon) \left(\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (kT)^{2n} \left. \frac{d^{2n} D(\epsilon)}{d\epsilon^{2n}} \right|_{\epsilon=0} a_n(T) \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

$$\text{mit } a_n(T) = \int_{-1/kT}^{1/kT} dx \frac{x^{2n}}{(2n)!} \left(-\frac{d}{dx} \frac{1}{e^x + 1}\right) \quad (\text{C.12})$$

Mit Hilfe der Entwicklung

$$\sqrt{1-x} = 1 - \frac{1}{2}x - \frac{1 \cdot 1}{2 \cdot 4}x^2 - \frac{1 \cdot 1 \cdot 3}{2 \cdot 4 \cdot 6}x^3 - \dots = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-3)!!}{2n!!} x^n \quad (\text{C.13})$$

findet man, daß für die Ableitungen der Zustandsdichte bei $\epsilon = 0$ gilt:

$$\left. \frac{d^{2k} D(\epsilon)}{d\epsilon^{2k}} \right|_{\epsilon=0} = -\frac{2}{\pi} \frac{2k!(2k-3)!!}{2k!!} = -\frac{2}{\pi} (2k-1)!!(2k-3)!! \quad (\text{C.14})$$

Die ungeraden Ableitungen verschwinden aus Symmetriegründen. Die ersten Ableitungen sind:

$$\frac{d^2 D(\epsilon)}{d\epsilon^2} = -\frac{2}{\pi}, \quad \frac{d^4 D(\epsilon)}{d\epsilon^4} = -\frac{2 \cdot 3}{\pi}, \quad \frac{d^6 D(\epsilon)}{d\epsilon^6} = -\frac{2 \cdot 45}{\pi}, \quad \frac{d^8 D(\epsilon)}{d\epsilon^8} = -\frac{2 \cdot 1575}{\pi} \quad (\text{C.15})$$

Sie divergieren für $n \rightarrow \infty$ etwa wie $n!$. Trotzdem konvergiert die Summe (C.11), da die „Koeffizienten“ $a_n(T)$ für festes T und $n \rightarrow \infty$ genügend schnell verschwinden. Qualitativ erkennt man dies daran, daß die jeweiligen Integranden in (C.12)

$$\frac{x^{2n}}{(2n)!} \frac{1}{4 \cosh^2(\frac{x}{2})} \quad (\text{C.16})$$

ihre Maxima bei $|x| = 2n$ haben. Bei der Integration wandern diese Beiträge (T fest) für $n \rightarrow \infty$ aus dem Integrationsbereich hinaus.

Eine Anwendung der „normalen“ Sommerfeld-Entwicklung ergibt ein formal zu (C.11) fast identisches Ergebnis. Der einzige Unterschied: Statt der von T abhängigen Integrationsgrenzen integriert man bei der Sommerfeld-Entwicklung immer von $-\infty$ bis ∞ und erhält statt der Funktionen $a_n(T)$ die Sommerfeld-Koeffizienten a_n . Die entsprechende Reihe

$$I_{\text{Sommerfeld}} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n (kT)^{2n} \frac{2}{\pi} (2k-1)!! (2k-3)!! \quad (\text{C.17})$$

divergiert für jeden (!) Wert von T .

Insgesamt kann man feststellen, daß die Sommerfeld-Entwicklung, wie sie im ersten Abschnitt dargestellt wurde, unter den gemachten Voraussetzungen exakt ist. Da man in der Regel Zustandsdichten mit algebraischen Bandkanten untersucht, wird sie jedoch meistens außerhalb ihres Geltungsbereiches angewendet. Dann beschreibt sie nicht mehr eine exakte, sondern nur noch eine asymptotische Entwicklung. Bei jeder Temperatur gibt es in diesem Fall eine optimale Anzahl von Termen, deren Summe dem wahren Ergebnis am nächsten kommt. Bei Temperaturen, die klein sind im Verhältnis zur Entfernung zwischen Fermi-Kante und Nichtanalytizitäten, ist diese Zahl groß. Man kann also viele Terme aufsummieren und dem wahren Ergebnis sehr nahe kommen.

Wie in Abbildung 4.3 in Kapitel 4 gezeigt ist, liegt dieser Fall bei den für das Bethe-Gitter betrachteten Temperaturen bis $T = 0.25$ nicht mehr vor. Schon der T^4 -Term verschlechtert das Ergebnis für große Werte von T . Deswegen war hier eine direkte numerische Lösung des Integrals unvermeidlich. Für die Berechnung der Füllung als Funktion von μ und T reichte dagegen, wie in Anhang D dargestellt, die Genauigkeit der Sommerfeld-Entwicklung aus.

Interessant ist, daß die Sommerfeld-Entwicklung für die Gaußsche Zustandsdichte exakt ist. Gerade weil diese keine algebraischen Bandkanten hat, ist sie analytisch und erfüllt damit die rigorosen Voraussetzungen dieser Entwicklung.

Anhang D

Berechnung des chemischen Potentials

In Kapitel 4 wird das chemische Potential μ als Funktion der Dichte n und der Temperatur T benötigt. Während der Ausdruck

$$n(\mu, T) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} D_0(\epsilon) f(\epsilon - \mu, T) d\epsilon = \frac{4}{\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - \epsilon^2} f(\epsilon - \mu, T) \quad (\text{D.1})$$

numerisch leicht auszuwerten ist, ist eine analytische Auflösung nach μ (bei vorgegeben n und T) nicht ohne Näherung möglich. Daher führen wir eine Sommerfeld-Entwicklung bis zur 4. Potenz in T durch und entwickeln anschließend bis zur 3. Ordnung in μ um $\mu = 0$:

$$\begin{aligned} n(\mu, T) &\approx 2 \left[\int_{-1}^{\mu} D_0(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \left. \frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=\mu} + \frac{7\pi^4}{360} (kT)^4 \left. \frac{d^3 D(\epsilon)}{d\epsilon^3} \right|_{\epsilon=\mu} \right] \\ &= 2 \left[\frac{1}{2} + D(0)\mu + D''(0) \frac{\mu^3}{6} + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \left(D''(0)\mu + D^{(4)}(0) \frac{\mu^3}{6} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{7\pi^4}{360} (kT)^4 \left(D^{(4)}(0)\mu + D^{(6)}(0) \frac{\mu^3}{6} \right) \right] \quad (\text{D.2}) \\ &= 1 + \left(\frac{4}{\pi} - \frac{2\pi}{3} (kT)^2 - \frac{7\pi^3}{30} (kT)^4 \right) \mu + \left(-\frac{2}{3\pi} - \frac{\pi}{3} (kT)^2 - \frac{7\pi^3}{12} (kT)^4 \right) \mu^3 \end{aligned}$$

Da $n - 1$ eine ungerade Funktion von μ ist, ist umgekehrt auch die gesuchte Funktion μ eine ungerade Funktion in $n - 1$. Deren Taylor-Entwicklung läßt sich mit folgender allgemeinen Überlegung finden: Sei

$$y(x) = a_1 x + a_3 x^3 \quad \text{und} \quad x(y) = b_1 y + b_3 y^3 + \mathcal{O}(y^5) \quad (\text{D.3})$$

$$y(x(y)) = y \Leftrightarrow a_1 (b_1 y + b_3 y^3) + a_3 (b_1 y + b_3 y^3)^3 + \text{calO}(y^5) = y \quad (\text{D.4})$$

$$\Rightarrow b_1 = \frac{1}{a_1}, \quad b_3 = -\frac{a_3}{a_1^4}. \quad (\text{D.5})$$

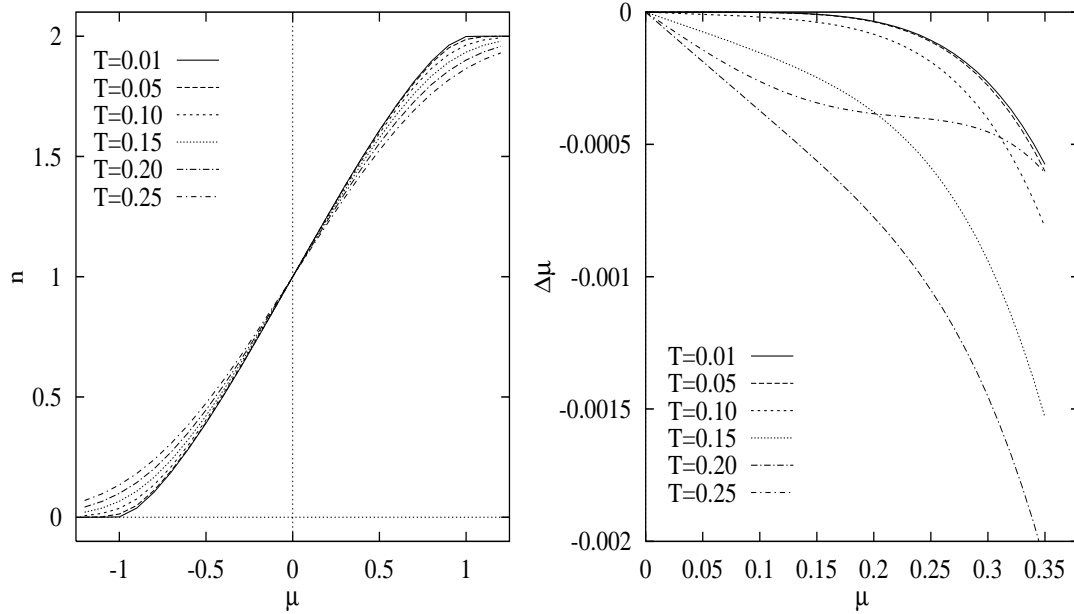


Abbildung D.1: Links: Füllung n als Funktion des chemischen Potentials μ . Rechts: Fehler in der Bestimmung von μ gemäß (D.6).

Nach einer Entwicklung der so erhaltenen Koeffizienten bis zur 4. Potenz in T erhalten wir:

$$\begin{aligned} \mu(n, T) &= \frac{1}{\frac{4}{\pi} - \frac{2\pi}{3}(kT)^2 - \frac{7\pi^3}{30}(kT)^4} (n-1) - \frac{-\frac{2}{3\pi} - \frac{\pi}{3}(kT)^2 - \frac{7\pi^3}{12}(kT)^4}{\left(\frac{4}{\pi} - \frac{2\pi}{3}(kT)^2 - \frac{7\pi^3}{30}(kT)^4\right)^4} (n-1)^3 \\ &\approx \left(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi^3}{24}T^2 + \frac{31\pi^5}{1440}T^4 \right) (n-1) \\ &\quad + \left(\frac{\pi^3}{384} + \frac{7\pi^5}{2304}T^2 + \frac{619\pi^7}{138240}T^4 \right) (n-1)^3 \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Die Qualität der Näherung läßt sich in Abbildung D.1 (rechts) beurteilen. Die Datenpunkte wurden folgendermaßen erhalten: Zu einem μ und T wurde numerisch nach Formel (D.1) die Bandfüllung n berechnet. Aus diesem n und dem vorgegebenen T wurde mit der genäherten Umkehrformel (D.6) wieder ein μ bestimmt. Die Differenz $\Delta\mu$ zwischen dem ursprünglichem und dem zurückgerechneten Wert des chemischen Potentials ist folglich der Fehler der Näherung. Links ist zum Vergleich die Bandfüllung als Funktion von μ aufgetragen. Man erkennt, daß bei den untersuchten Bandfüllungen nur $0 < \mu < 0.35$ relevant ist. Also ist der maximal auftretende Fehler $\Delta\mu$, wie rechts abzulesen, etwa $2 \cdot 10^{-3}$.

Literaturverzeichnis

- [And63] P. W. ANDERSON, *Solid state physics*, no. 14, Hrsg: F. SEITZ und D. TURNBULL, Academic Press, New York, 1963.
- [Ash76] N. W. ASHCROFT und N. D. MERMIN, *Solid state physics*, Saunders College Publishing, 1976.
- [Bay62] G. BAYM, *Phys. Rev.* **127** (1962), 1391.
- [Bla81] R. BLANKENBECLER, D. J. SCALAPINO und R. L. SUGAR, *Phys. Rev.* **D 24** (1981), 2278.
- [Bul68] L. N. BULAEVSKII, E. L. NAGAEV und D. I. KHOMSKII, *Ž. Ėksp. Teor. Fiz* **54** (1968), 1562, nachgedruckt in *Sov. Phys. JETP*, **27**, 836 (1968).
- [Czy92a] G. CZYCHOLL und Q. QIN, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992), 3244.
- [Czy92b] G. CZYCHOLL und Q. QIN, *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), 2879.
- [Eco79] E. N. ECONOMU, *Green's functions in quantum physics*, Springer, 1979.
- [Fie94] M. FIEBIG, D. FRÖHLICH, B. B. KRICHEVTSOV und R. V. POSAREV, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994), 2127.
- [Fie96] M. FIEBIG, D. FRÖHLICH und C. GROS, *Physikalische Blätter* **52** (1996), 455.
- [Fla94] B. P. FLANNERY, W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY und W. T. VETTERLING, *Numerical recipes in c*, Cambridge University Press, 1994.
- [Fre95] J. K. FREERICKS und M. JARRELL, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995), 186.
- [Geb96] F. GEBHARD, *The Mott metal-insulator transition*, Springer, 1996.
- [Geo93] A. GEORGES und W. KRAUTH, *Phys. Rev.* **B 48** (1993), 7167.
- [Gre83] N. GREWE, *Z. Phys. B - Condens. Matter* **52** (1983), 193.
- [Gri70] R. B. GRIFFITHS, *Phys. Rev. Lett.* **24** (1970), 715.

- [Gut63] M. C. GUTZWILLER, *Phys. Rev. Lett.* **10** (1963), 159.
- [Hel95] K. HELD, *Quanten-Monte-Carlo Untersuchungen des Hubbard-Modells mit Nächst-Nachbar Wechselwirkung*, Diplomarbeit, RWTH Aachen, 1995.
- [Hel96] K. HELD, M. ULMKE und D. VOLLHARDT, *akzeptiert bei Mod. Phys Lett.***B** (1996).
- [Hir83] J. E. HIRSCH, *Phys. Rev.* **B 28** (1983), 4059.
- [Hir86] J. E. HIRSCH und R. M. FYE, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986), 2521.
- [Hub63] J. HUBBARD, *Proc. Phys. Soc. (London)* **A 276** (1963), 238.
- [Itz89] C. ITZYKSON und J.-M. DROUFFE, *Statistical field theory*, Cambridge University Press, 1989.
- [Jac67] L. S. JACOBS und P. E. LAWRENCE, *Phys. Rev.* **164** (1967), 66.
- [Jan91] V. JANIŠ, *Z. Phys. B - Condens. Matter* **83** (1991), 227.
- [Jan93] V. JANIŠ, M. ULMKE und D. VOLLHARDT, *Europhys. Lett.* **24** (1993), 287.
- [Kan63] J. KANAMORI, *Prog. Theor. Phys.* **30** (1963), 275.
- [Kin74] J. M. KINCAID und E. G. D. COHEN, *Physics Letters* **50A** (1974), 317.
- [Kol96] M. KOLLAR, R. STRACK und D. VOLLHARDT, *Phys. Rev.* **B 53** (1996), 9225.
- [Kru74] J. A. KRUMHANSL und P. L. LEATH, *Rev. Mod. Phys.* **46** (1974), 465.
- [Kur83] Y. KURAMOTO, *Z. Phys. B - Condens. Matter* **53** (1983), 37.
- [Lan71] D. P. LANDAU, B. E. KENN, B. SCHNEIDER und W. P. WOLF, *Phys. Rev.* **B 3** (1971), 2310.
- [Law84] I. D. LAWRIE und S. SARBACH, in *Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 9*, Hrsg: C. Domb und J. L. Lebowitz, Academic Press, 1984.
- [Lie68] E. H. LIEB und F. Y. WU, *Phys. Rev. Lett.* **20** (1968), 1445.
- [Lie89] E. H. LIEB, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989), 1201.
- [Luk93] LUKREZ, *Von der Natur*, Artemis und Winkler, 1993.
- [Mat81] D. C. MATTIS, *The theory of magnetism*, Springer Series in Solid State Sciences, 1981.

- [Met53] N. METROPOLIS, A. ROSENBLUTH, M. ROSENBLUTH, A. TELLER und E. TELLER, *J. Chem. Phys.* **21** (1953), 1087.
- [Met89a] W. METZNER und D. VOLLHARDT, *Phys. Rev.* **B 39** (1989), 4462.
- [Met89b] W. METZNER und D. VOLLHARDT, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989), 324.
- [MH89] E. MÜLLER-HARTMANN, *Z. Phys. B - Condens. Matter* **74** (1989), 507.
- [MH95] E. MÜLLER-HARTMANN, *J. Low Temp. Phys.* **99** (1995), 385.
- [Mie91] A. MIELKE, *J. Phys.* **A 24** (1991), 3311.
- [Nag66] Y. NAGAOKA, *Phys. Rev.* **147** (1966), 392.
- [Neg88] J.W. NEGELE und H. ORLAND, *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley Publishing Company, 1988.
- [Ric88] G. RICKAYZEN, *green-functions and condensed matter*, Academic Press, London, 1988.
- [Rot67] L. ROTH, *J. Phys. Chem. Solids* **28** (1967), 1549.
- [Sha90] B. S. SHASTRY, H. R. KRISHNAMURTHY und P. W. ANDERSON, *Phys. Rev.* **B 41** (1990), 2375.
- [Sov67] P. SOVEN, *Phys. Rev. Lett.* **156** (1967), 809.
- [Str77] E. STRYJEWSKI und N. GIORDANO, *Adv. Physics* **26** (1977), 487.
- [Suz76] M. SUZUKI, *Prog. Theor. Phys.* **56** (1976), 1454.
- [Tas92] H. TASAKI, *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), 1608.
- [Tay67] D. W. TAYLOR, *Phys. Rev. Lett.* **156** (1967), 1017.
- [Tro59] H. F. TROTTER, *Proc. Am. Math. Soc.* **10** (1959), 545.
- [Ulm95] M. ULMKE, *Phasenübergänge in stark korrelierten Elektronensystemen*, Doktorarbeit, KFA-Jülich, Jülich, 1995.
- [Ulm96] M. ULMKE, *preprint cond-mat/9512044* (1996).
- [vD91] P. G. J. VAN DONGEN, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991), 757.
- [vD92] P. G. J. VAN DONGEN, *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), 2878.
- [Vol93] D. VOLLHARDT, in *Proceedings of the Jerusalem Winter School of Theoretical Physics*, Hrsg: V. J. Emery, World Scientific, Singapore, 1993.

- [Vol94] D. VOLLHARDT, in *Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi*, Hrsg: R. A. Broglia und J. R. Schrieffer, Noorth Holland, Amsterdam, 1994.
- [Whi89] S. R. WHITE, D. J. SCALAPINO, R. L. SUGAR, E. Y. LOH, J. E. GUBERNATIS und R. T. SCALETTAR, *Phys. Rev.* **B 40** (1989), 506.
- [Wur95] P. WURTH, G. S. UHRIG und E. MÜLLER-HARTMANN, *preprint* (1995).
- [Yon73] F. YONEZAWA und K. MORIGAKI, *Suppl. Prog. Theor. Phys* **53** (1973), 1.