

Physik des Hubbard-Modells zwischen einer und zwei Dimensionen

Dissertation zur Erlangung des
naturwissenschaftlichen Doktorgrades
der Bayerischen Julius-Maximilians-Universität
Würzburg

vorgelegt von

Heinz Endres

aus Gaukönigshofen

Würzburg 1996

Eingereicht am 22. Juli 1996

bei der Fakultät für Physik und Astronomie

1. Gutachter: Prof. Dr. W. Hanke

2. Gutachter: Priv. Doz. Dr. W. von der Linden

der Dissertation

1. Prüfer: Prof. Dr. W. Hanke

2. Prüfer: Prof. Dr. G. Schaack

der mündlichen Prüfung

Für meine Frau Beate

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	5
1 Einführung und Motivation	10
1.1 Die Physik von gekoppelten Ketten	10
1.2 Das Ein-Band-Hubbard-Modell	12
1.3 Das Drei-Band-Hubbard-Modell	15
2 Numerische Methoden	17
2.1 Das Quanten-Monte-Carlo-Verfahren	17
2.1.1 Abbildung auf ein klassisches Ising-Feld	18
2.1.2 Die Greensche Funktion	21
2.1.3 Importance Sampling – Die Markov-Kette	23
2.2 Numerische Realisierung der QMC-Methode	25
2.2.1 Stabilisierung	26
2.2.2 Minimierung der Rechenzeit	28
2.2.3 Das Vorzeichen- bzw. Phasenproblem	31
2.2.4 Die „Jackknife“-Methode in QMC	32
2.2.5 Die Wahl der Testwellenfunktion	33
2.3 Die analytische Fortsetzung	37

3	Gekoppelte Hubbard-Ketten bei Halbfüllung	41
3.1	Die Einteilchen-Spektraldichte	41
3.1.1	Ergebnisse der QMC-Rechnung	41
3.1.2	Schwache Kopplung: Die Spin-Dichte-Welle-Näherung	46
3.1.3	Starke Kopplung: Die lokale Singulett-Näherung	54
3.2	Spin- und Ladungskorrelationsfunktionen	61
4	Dotierte Hubbard-Ketten	69
4.1	Die lokale Singulett-Näherung bei kleiner Dotierung	69
4.2	Der Bereich mittlerer Dotierung	75
4.2.1	Die Einteilchen-Spektraldichte	75
4.2.2	Die Random-Phase-Approximation	76
4.3	Supraleitende Ordnung in dotierten Hubbard-Ketten	82
4.4	Kleine Kopplungsstärke $t_{\perp} \ll t$ – Kohärenz und Inkohärenz	86
4.4.1	Das Zwei-Niveau-System	87
4.4.2	Analyse des Ein-Band-Hubbard-Modells	88
4.4.3	Der Einfluß der anomalen Dimension α	96
5	ODLRO im Drei-Band-Hubbard-Modell	99
5.1	Einführung	99
5.2	Die Ergebnisse der QMC-Simulation	102
6	Zusammenfassung	109
A	Die Hubbard-Kette mit zwei Plätzen	113
B	Die Spinsuszeptibilität in LRA-Näherung	116
C	Die Darstellung von $P_{1,2}(E)$ durch die spektrale Dichte	120
	Literaturverzeichnis	122
	Danksagung	129

Einleitung

Seit der Einführung im Jahr 1963 [1,2] ist das Hubbard-Modell von hohem Interesse zur Beschreibung von stark korrelierten Fermionensystemen. Insbesondere durch die Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleiter (HTSL) durch G. Bednorz und K.A. Müller [3] vor bereits 10 Jahren wurde dieses Modell Gegenstand von weltweiter Forschungsaktivität und gilt heute als der vielversprechendste Ansatz, der zu einem mikroskopischen Verständnis der HTSL führen kann. Die Relevanz des Hubbard-Modells für die keramischen Supraleiter wird bereits durch die ungewöhnlichen normalleitenden Eigenschaften dieser Kupferoxid-Verbindungen unterstützt, die auf ein Material mit starken, elektronischen Wechselwirkungen hinweisen [4].

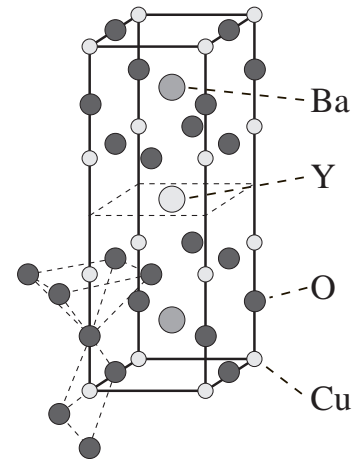


Abb. 1.1: Die Kristallstruktur von $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, einem HTSL mit $T_c \approx 92\text{K}$ bei optimaler Dotierung.

Als primär verantwortlich für die entscheidenden physikalischen Eigenschaften dieser Materialien können die CuO_2 -Schichten angesehen werden, die allen HTSL gemeinsam sind. Abb. 1.1 zeigt den atomaren Aufbau von $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, einem typischen Vertreter der Hoch- T_c 's mit einer Übergangstemperatur von $T_c \approx 92\text{K}$ bei optimaler Dotierung [5]. Die Kristallstruktur enthält zwei CuO_2 -Ebenen pro Einheitszelle, die durch Yttrium-Ionen voneinander getrennt sind. Diese Schichtstruktur führt zu einer starken Anisotropie, die sich in den Transportgrößen - z.B. der Leitfähigkeit - deutlich widerspiegelt. Zur Beschreibung dieser Systeme wurden daher meist zweidimensionale (2D) Hubbard-Modelle, wie z.B. das 2D-Ein-Band-Modell [4] oder das 2D-Drei-Band- bzw. Emery-Modell [6], herangezogen. Diese sind allerdings nicht exakt lösbar, vor al-

lem konnte deren Flüssigkeitsverhalten (Fermi- bzw. Luttinger-Flüssigkeit) bisher nicht endgültig geklärt werden.

Bereits in einer Dimension weicht die Physik des Ein-Band-Hubbard-Modells erheblich von einer gewöhnlichen Fermi-Flüssigkeit ab. Das mit Hilfe des Bethe-Ansatzes in einer Dimension exakt lösbare Modell [7] besitzt keine quasiteilchen-artigen elementaren Anregungen in der Nähe der Fermikante. Stattdessen wird die niederenergetische Physik durch kollektive Moden beschrieben, d.h. durch langwellige Fluktuationen der Spin- oder Ladungsdichte. Das Spektrum besteht schließlich aus spinlosen Ladungsanregungen und Spin- $\frac{1}{2}$ -Anregungen, die keine Ladung tragen. Diese Spin- und Ladungsfreiheitsgrade breiten sich mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten unabhängig voneinander aus (Spin-Ladungs-Trennung). Die Asymptotik, d.h. das langreichweitige Verhalten der Spin- und Ladungskorrelationsfunktionen, läßt sich mit Hilfe von Bosonisierungstechniken und des Bethe-Ansatzes berechnen und zeigt potenzartiges Verhalten, welches von einem einzelnen Parameter K_ρ bestimmt wird [8, 9]. Die niederenergetischen Anregungen dieses Systems sind identisch zu den Eigenschaften des Tomonaga-Luttinger-Modells zur Beschreibung einer sog. „Luttinger-Flüssigkeit“. Dieses Modell ist mit Hilfe der Bosonisierung exakt lösbar [8, 10], welche zu einem Hamiltonoperator führt, in dem die Spin- und Ladungsfreiheitsgrade völlig entkoppelt sind.

Das entsprechende Szenario in zweidimensionalen Hubbard-Modellen ist, trotz ihrer Bedeutung für die Hochtemperatur-Supraleiter, noch weitgehend unklar, vor allem die Frage, ob das Konzept einer Luttinger-Flüssigkeit auf zwei Dimensionen übertragbar ist. In der vorliegenden Arbeit soll dieser Übergang von dem exakt lösbaren, eindimensionalen Fall in das zweidimensionale, physikalisch für die HTSL relevante System untersucht werden. Hierzu werden hauptsächlich Systeme von zwei gekoppelten Hubbard-Ketten betrachtet, die in jüngster Zeit wegen ihrer zusätzlichen experimentellen Realisierbarkeit (z.B. in Systemen wie $(VO)_2P_2O_7$ [11], $SrCu_2O_3$ [12] oder $LaCuO_{2.5}$ [13]) weltweit ein hohes Interesse erzeugten. Die Verbindung $SrCu_2O_3$ enthält beispielsweise in ihrer Kristallstruktur Leitersysteme aus Kupfer- und Sauerstoffatomen, wobei pro Kupferplatz ein freier Elektronenspin vorhanden ist, der über die Sauerstoffplätze durch eine effektive, antiferromagnetische Austauschwechselwirkung an den Spin auf den benachbarten Kupferplätzen koppelt [12, 14, 15]. Die einzige bisher bekannte Substanz, die das Dotieren von derartigen gekoppelten Ketten erlaubt, ist die von Z. Hiroi und M. Takano [13] gefundene Verbindung $LaCuO_{2.5}$. Diese zeigt im dotierten Fall

jedoch keinen Übergang in eine supraleitende Phase, der theoretisch erwartet wurde [16, 17].

In einer Reihe von neueren Veröffentlichungen wurden zudem Modelle von Leitersystemen auf die vorerst rein theoretische Frage untersucht, ob das Hüpfen zwischen den Ketten bei kleiner Kopplung t_{\perp} kohärent oder inkohärent abläuft [18–21]. Als Folge einer inkohärenten Ketten-Kopplung ist das System nicht in der Lage, durch kohärentes Hüpfen seine Energie abzusenken. Trotzdem ist ein Absenken der Gesamtenergie durch kohärente Hüpfprozesse von Paaren möglich, wodurch eine stärkere Tendenz zu supraleitender Paarung erreicht wird [18]. Aufgrund von störungstheoretischen Betrachtungen kommen D.G. Clarke, S.P. Strong und P.W. Anderson [19, 20] zu dem Schluß, daß derartige inkohärente Hüpfprozesse bei Systemen von gekoppelten Luttinger-Flüssigkeiten möglich sind. In Übereinstimmung damit konnte in der vorliegenden Arbeit erstmals ein klarer Hinweis auf inkohärentes Verhalten bei Systemen aus gekoppelten Hubbard-Ketten gefunden werden (siehe Abschnitt 4.4). Trifft die Theorie von P.W. Anderson [22] zu, die das Auftreten von Luttinger-Flüssigkeitseigenschaften in zweidimensionalen Systemen vorhersagt, so kann dieses inkohärente Einteilchen-Hüpfen ein mögliches Szenario für die hohen Sprungtemperaturen von HTSL sein, die mehrere CuO_2 -Ebenen pro Elementarzelle besitzen. Systeme aus gekoppelten Ketten sind somit ein erster Schritt zum Verständnis von gekoppelten, stark korrelierten Fermionensystemen, die in den Hoch- T_c -Supraleitern auftreten.

Nach einer physikalischen Einführung und Motivation (Kapitel 1) sollen in einem ersten Teil der vorliegenden Arbeit gekoppelte Hubbard-Ketten sowohl bei Halbfüllung als auch bei Dotierung mit Hilfe der numerisch exakten Quanten-Monte-Carlo (QMC) Methode untersucht werden. Das QMC-Verfahren erlaubt im Gegensatz zur exakten Diagonalisierung die Simulation von großen Gittersystemen mit bis zu 300 Plätzen. In Verbindung mit dem Verfahren der maximalen Entropie (MaxEnt) ist es zudem möglich, komplette Spektren in Abhängigkeit von der reellen Frequenz zu berechnen. Auf diese Weise läßt sich z.B. die Impulsabhängigkeit der Spektralfunktion $A(\vec{k}, \omega)$ bestimmen, deren Peakstrukturen und -breiten in einer bestimmten Näherung (*Sudden-Approximation*) den Maxima (Quasiteilchen-Anregungen) und deren Breiten (inverse Lebensdauer) in den experimentellen Photoemissionsdaten entsprechen.

Die Möglichkeit, derartige dynamische Spektren zu berechnen, ist zusätzlich ein Vorteil der QMC-Methode gegenüber dem sog. Dichte-Matrix-Renormierungsgruppen-Verfahren, das neben der Beschränkung auf quasi-eindimensionale Systeme zumindest

im gegenwärtigen Stand der Entwicklung keine Berechnung von dynamischen Größen zuläßt. Mit Hilfe der Kombination QMC/MaxEnt konnten somit erstmals sowohl Einteilchen- als auch Zweiteilchen-Spektren von gekoppelten Hubbard-Ketten berechnet werden.

Der erste Teil der vorliegenden Arbeit ist dabei folgendermaßen gegliedert: In Kapitel 2 werden zuerst die verwendeten numerischen Methoden vorgestellt. Dabei enthält Abschnitt 2.1 und 2.2 eine ausführliche Darstellung des QMC-Algorithmus mit Hinweisen auf eine effiziente numerische Implementierung, während in Abschnitt 2.3 das Prinzip der analytischen Fortsetzung mit Hilfe des Verfahrens der maximalen Entropie erläutert wird. In Kapitel 3 wird auf die Physik von gekoppelten Hubbard-Ketten bei Halbfüllung eingegangen, wobei zwischen verschiedenen Kopplungsstärken t_{\perp} unterschieden wird. Zudem werden die Ergebnisse der QMC-Rechnung jeweils durch einfache, analytische Bilder, wie z.B. die Spin-Dichte-Welle-Näherung, die *Random-Phase-Approximation* (RPA) und die lokale Singulett-Näherung, erklärt und veranschaulicht.

Kapitel 4 beschäftigt sich schließlich mit gekoppelten Hubbard-Ketten bei Dotierung. Die spektralen Eigenschaften bei kleiner (Abschnitt 4.1) und mittlerer Dotierung (Abschnitt 4.2) können dabei wieder durch einfache Bilder (RPA, *Slave-Boson-Mean-Field*-Berechnung und lokale Singulett-Näherung) verstanden werden. In Abschnitt 4.3 wird das Leitersystem für einen physikalisch relevanten Parametersatz auf das Auftreten von supraleitender Ordnung untersucht, während Abschnitt 4.4 sich schließlich mit der Frage nach kohärentem und inkohärentem Einteilchen-Hüpfen bei kleiner Kopplung $t_{\perp} \ll t$ beschäftigt.

Im zweiten Teil der Arbeit soll der Übergang zu zwei Dimensionen vollzogen werden. In einer Reihe von Veröffentlichungen von G. Dopf et al. [23–26] wurde gezeigt, daß das 2D-Drei-Band-Hubbard-Modell mit Hilfe eines universellen Parametersatzes ein breites Spektrum von Normalzustandseigenschaften in zum Teil quantitativer Übereinstimmung mit dem Experiment reproduzieren kann. Darüber hinaus konnte eine attraktive Paarwechselwirkung im erweiterten s^* -Kanal nachgewiesen werden, die das im Experiment beobachtete Dotierungsverhalten besitzt [25]. Jedoch wurde von G. Dopf et al. [24] kein Hinweis auf langreichweitige, supraleitende Ordnung (*off-diagonal-long-range-order*, ODLRO) gefunden. Dieses Ergebnis konnte von F.F. Assaad et al. [27] durch Berechnung der Flußquantisierung bei der Temperatur $T = 0$ und der Ableitung der superfluiden Dichte nach der Temperatur ($T > 0$) bestätigt werden.

Motiviert durch technische Fortschritte im $T = 0$ Projektor-QMC-Formalismus und durch zu früheren Untersuchungen widersprüchliche Veröffentlichungen von K. Kuroki und H. Aoki [28], die Hinweise auf eine langreichweitige, supraleitende Ordnung im $d_{x^2-y^2}$ -Kanal finden, wird beim Übergang auf zwei Dimensionen die zentrale Frage nach der Supraleitung (ODLRO) im 2D-Drei-Band-Modell untersucht (Kapitel 5). Dabei kommt ein für die Projektor-QMC-Methode entwickeltes Verfahren einer optimierten Testwellenfunktion zum Einsatz, welches trotz des Vorzeichenproblems die Simulation von sämtlichen Dotierungen in Systemgrößen bis zu 8×8 Einheitszellen erlaubt (siehe auch Abschnitt 2.2.5).

Eine Zusammenfassung in Kapitel 6 rundet schließlich die Arbeit ab.

Kapitel 1

Einführung und Motivation

1.1 Die Physik von gekoppelten Ketten

Systeme von gekoppelten Ketten sind in Materialien wie z.B. $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ [11], SrCu_2O_3 [12] oder $\text{LaCuO}_{2.5}$ [13] realisiert. Abb. 1.2 zeigt die aus V^{4+} -Ionen bestehenden Ketten der Verbindung $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$. Die V^{4+} -Ionen besitzen eine $[\text{Ar}]4s$ -Elektronenkonfiguration und somit einen Gesamtspin $S = \frac{1}{2}$. Die Kopplung dieser Spins über die Sauerstoffionen führt zu einer effektiven, antiferromagnetischen Wechselwirkung, so daß sich das Kettensystem mit Hilfe eines Heisenberg-Modells beschreiben läßt. Das Anpassen der magnetischen Suszeptibilität des Heisenberg-Modells zweier gekoppelter Ketten, mit einer Wechselwirkung J_{\parallel} innerhalb der Ketten und einer Wechselwirkung J_{\perp} senkrecht zu den Ketten, an die experimentell gemessene Suszeptibilität von $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ führt zu Kopplungsstärken von $J_{\parallel} = 7.76 \text{ meV}$ und $J_{\perp} = 7.82 \text{ meV}$ [29]. Diese Parameterwerte

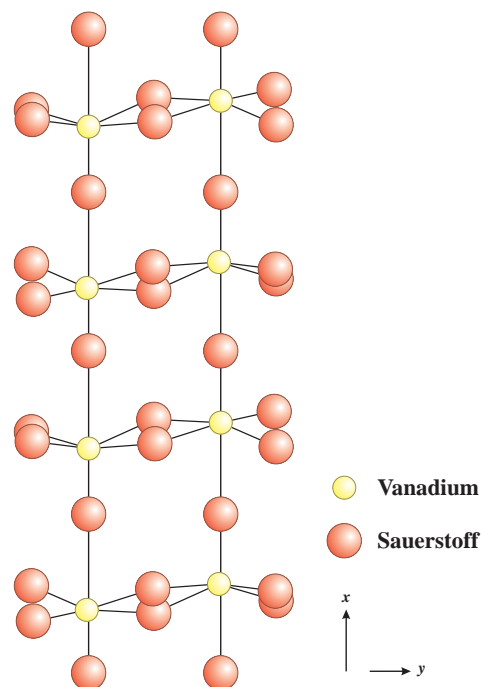


Abb. 1.2: Das System aus gekoppelten Ketten von Sauerstoff- und Vanadiumionen der Verbindung $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$, entnommen aus [11].

entsprechen einem Singulett-Triplett-Spinalgap von $\Delta E_s^{\text{Heisenberg}} = 3.94 \text{ meV}$ [29], welches experimentell mit Hilfe von inelastischer Neutronenstreuung an $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ bestätigt wurde ($\Delta E_s^{\text{Experiment}} = 3.7 \pm 0.2 \text{ meV}$, [30]).

Vor einem Jahr gelang es Z. Hiroi und M. Takano [13] zum ersten Mal, die aus gekoppelten Cu-O-Ketten bestehende Substanz $\text{LaCuO}_{2.5}$ durch Substitution der La^{3+} -Ionen mit Sr^{2+} zu dotieren. Das dotierte System zeigt experimentell die theoretisch erwartete Reduzierung des Spinalgaps [31], es wurde jedoch kein Übergang in eine supraleitende Phase bei tiefen Temperaturen gefunden, der ebenfalls theoretisch vorhergesagt wurde (siehe z.B. [16, 17]). Eine mögliche Ursache für das Fehlen des supraleitenden Übergangs wird beim Betrachten der Kristallstruktur (Abb. 1.3) deutlich: Der räumliche Abstand zwischen den Kupfer- und Sauerstoffionen zwischen zwei Leitern ist lediglich geringfügig größer als der entsprechende Abstand innerhalb der beiden Ketten. Dies führt zu einer nicht unbedeutenden dreidimensionalen Kopplung, die den Übergang in die supraleitende Phase verhindern kann.

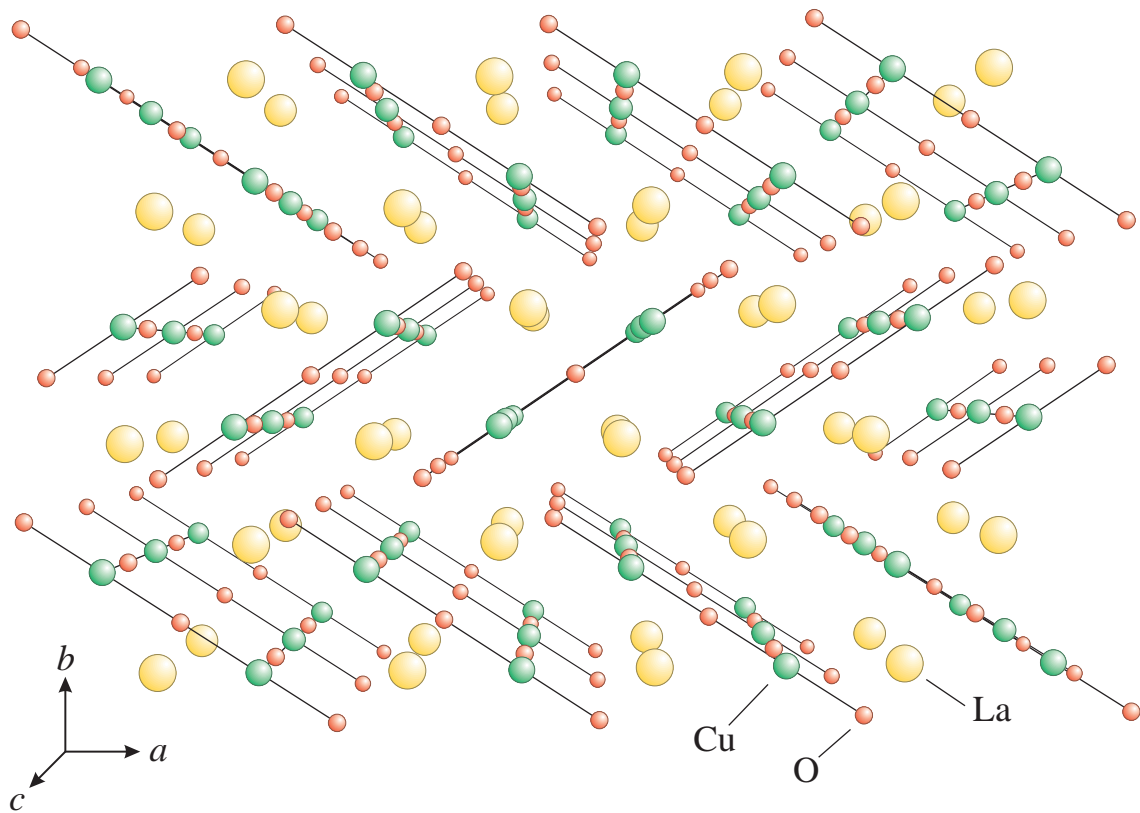


Abb. 1.3: Kristallstruktur von $\text{LaCuO}_{2.5}$, entnommen aus [13]. Deutlich erkennbar sind die gekoppelten Ketten aus Kupfer- und Sauerstoffionen.

Zur Beschreibung derartiger Systeme bieten sich verschiedene Modelle an. Wie bereits erwähnt, kann bei Halbfüllung das Heisenberg-Modell herangezogen werden. In Erweiterung dessen berücksichtigt das für den dotierten Fall relevante tJ -Modell zusätzlich Hüpfprozesse zwischen benachbarten Plätzen. Beide Modelle erlauben jedoch keine Doppelbesetzung der Gitterplätze und können so als Grenzfall des allgemeineren Hubbard-Modells für unendlich hohe lokale Coulomb-Abstoßung angesehen werden. In dieser Arbeit soll daher ausschließlich das realistischere Hubbard-Modell zur Beschreibung der Leitersysteme herangezogen werden.

1.2 Das Ein-Band-Hubbard-Modell

Der Hamiltonoperator des Ein-Band-Hubbard-Modells in beliebiger Geometrie mit rein lokaler Wechselwirkung läßt sich in zweiter Quantisierung folgendermaßen schreiben:

$$H = - \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.1)$$

Dabei läuft die Summe i und j jeweils über alle N Gitterplätze, $c_{i\sigma}$ bzw. $c_{i\sigma}^\dagger$ sind die Fermionenerzeuger bzw. -vernichter am Platz i mit Spin σ , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ ist der lokale Dichte-Operator und t_{ij} das Hüpfmatrixelement zwischen den Plätzen i und j . Durch die lokale Coulomb-Wechselwirkung U liegt ein System aus korrelierten Fermionen vor, welches keine einfache Lösung in Form einer Slater-Determinante besitzt. Für eine Leiter aus zwei gekoppelte Ketten der Länge L wird zur Vereinfachung folgende Notation verwendet:

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{i,\lambda\sigma} (c_{i,\lambda\sigma}^\dagger c_{i+1,\lambda\sigma} + h.c.) - t_\perp \sum_{i,\sigma} (c_{i,1\sigma}^\dagger c_{i,2\sigma} + h.c.) \\ & + U \sum_{i\lambda} n_{i,\lambda\uparrow} n_{i,\lambda\downarrow} + \sum_{r=1}^R V_r \sum_{i\lambda} (n_{i,\lambda\uparrow} + n_{i,\lambda\downarrow})(n_{i+r,\lambda\uparrow} + n_{i+r,\lambda\downarrow}). \end{aligned} \quad (1.2)$$

Dabei numeriert $\lambda = 1, 2$ die beiden Ketten und $i = 1 \dots L$ die Leitersprossen, t ist das Hüpfmatrixelement innerhalb der Ketten und t_\perp die Stärke der Kopplung zwischen den Ketten. Ferner ist ein zusätzlicher Wechselwirkungsterm proportional zu V_r mit $r = 1 \dots R$ eingeführt, der eine Coulomb-Wechselwirkung der Reichweite R beschreibt (siehe hierzu Abschnitt 4.4). Abb. 1.4 zeigt die verschiedenen Hüpfmatrixelemente und Wechselwirkungen in der Geometrie des Hamiltonoperators Gl. 1.2.

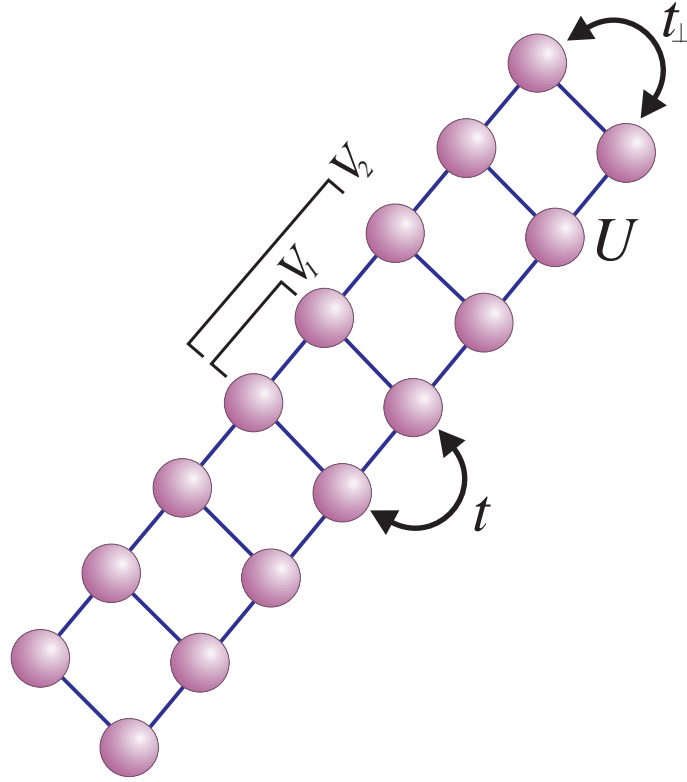


Abb. 1.4: Geometrie von zwei gekoppelten Hubbard-Ketten mit der lokalen Wechselwirkung U , der längerreichweitigen Wechselwirkung V_r und dem Hüpfen parallel (t) und senkrecht (t_{\perp}) zu den Ketten.

In den letzten Jahren wurden zahlreiche Arbeiten veröffentlicht, die sich mit der Physik des Ein-Band-Hubbard-Modells in Leitersystemen beschäftigen. Zum einen sind hier *Weak-coupling* Analysen zu nennen, d.h. die Untersuchung der Ketten in Abhängigkeit von den Parametern t_{\perp} und U im Limes kleiner Kopplung U , beispielsweise mit Hilfe von Renormierungsgruppen-Techniken (siehe z.B. [32–34]). Besonders erwähnenswert ist ein von L. Balents und M.P.A. Fisher [35] erstelltes Phasendiagramm (siehe Abb. 1.5) im Limes $U \rightarrow 0+$, jedoch für beliebige Werte von t_{\perp} . Insgesamt sind im *Weak-coupling*-Bild neun verschiedene Phasen möglich: Sowohl im Spin- als auch im Ladungskanal können maximal zwei gaplose Moden auftreten (jeweils für eine der beiden möglichen Impulskomponenten $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \pi$ senkrecht zu den Ketten). Die entsprechenden Phasen werden nach Ref. [35] mit $CmSn$ bezeichnet, wobei $m = 0, 1, 2$ für die Anzahl der gaplosen Ladungsmoden und $n = 0, 1, 2$ für die Zahl der gaplosen Spinmoden steht. Beispielsweise entspricht die Bezeichnung $C1S0$ einer Phase mit einer gaplosen Ladungsmoden und einer Energielücke im Spinkanal (*Spingap*). Von den neun

möglichen Phasen wurden im *Weak-coupling-Limes* insgesamt sieben gefunden, die in Abb. 1.5 eingezeichnet sind.

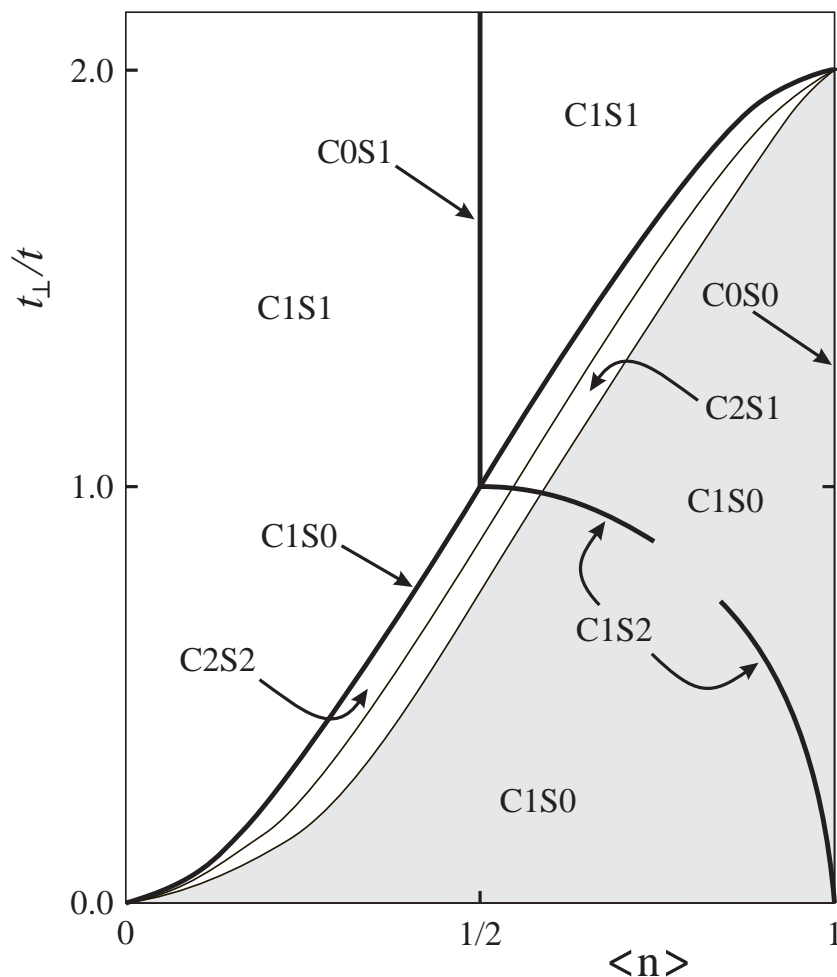


Abb. 1.5: Weak-coupling-Phasendiagramm für zwei gekoppelte Hubbard-Ketten im Limes $U \rightarrow 0+$, entnommen aus Ref. [35].

Besonders erwähnenswert ist hier die Phase C1S0, die in Abb. 1.5 grau unterlegt ist. In diesem Bereich des Phasendiagramms besitzen die gekoppelten Ketten eine einzelne gaplose Ladungsmode und ein endliches Spingap. Das Analogon dieser Phase in einer Dimension ist die sog. Luther-Emery-Flüssigkeit, die entweder dominante supraleitende Korrelationsfunktionen (SC) oder Ladungs-Dichte-Wellen (CDW) besitzt (siehe hierzu Ref. [36–38]). In diesem Bereich könnte somit bei endlichen, realistischen Werten der Wechselwirkung U eine supraleitende Phase auftreten.

R.M. Noack, S.R. White und D.J. Scalapino untersuchten in einer Reihe von Arbeiten

[16, 31, 39] zwei und mehrere gekoppelte Heisenberg- und Hubbard-Ketten mit Hilfe eines *Resonating-valence-bond*-Bildes (RVB) und vor allem mit dem Dichte-Matrix-Renormierungsgruppen-Verfahren (DMRG) [40, 41]. Für einen realistischen Wert der Wechselwirkung $U = 8t$ zeigt sich in der von L. Balents und M.P.A. Fisher [35] beschriebenen Phase C1S0 tatsächlich das Auftreten eines Spingaps [31] und metallisches Verhalten, d.h. die Abwesenheit einer Ladungslücke [16]. Ferner liegt eine interessante Korrelation zwischen der Stärke der supraleitenden Paar-Paar-Korrelationsfunktion und dem Spingap vor [16], die auf das Auftreten einer supraleitenden Phase hinweist. Die dominante Paar-Paar-Korrelationsfunktion besitzt eine modifizierte $d_{x^2-y^2}$ -Symmetrie mit potenzartigem langreichweitigen Verhalten. Inwiefern jedoch, analog zum tJ -Modell [17], wirklich dominante, supraleitende Paarung auftritt, ist noch weitgehend ungeklärt.

1.3 Das Drei-Band-Hubbard-Modell

Um den Übergang zu zwei Dimensionen zu vollziehen, findet schließlich das von V.J. Emery [6, 42] vorgeschlagene Drei-Band-Hubbard-Modell in der vorliegenden Arbeit Anwendung. Dieses Modell beinhaltet sowohl die Sauerstoff p_x - und p_y -Orbitale als auch die Kupfer $d_{x^2-y^2}$ -Orbitale der CuO_2 -Ebenen in den Hochtemperatur-Supraleitern und stellt somit einen realistischen Ansatz zur Beschreibung dieser Materialien dar. In zweiter Quantisierung läßt sich der Hamiltonoperator dieses Modells im Lochbild folgendermaßen schreiben [43, 44]:

$$\begin{aligned}
 H_{3B} = & - \sum_{ij,\sigma} \left(t_{ij}^{pd} d_{i\sigma}^\dagger p_{j\sigma} + h.c. \right) + U_d \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d \\
 & - \sum_{jj',\sigma} \left(t_{jj'}^{pp} p_{j\sigma}^\dagger p_{j'\sigma} + h.c. \right) \\
 & + \varepsilon_d \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^d + \varepsilon_p \sum_{j,\sigma} n_{j\sigma}^p.
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

Dabei zählt i jeweils die Kupfer- und j die Sauerstoffplätze. Enthalten ist die Hybridisierung t_{ij}^{pd} der d -Orbitale mit den p -Orbitalen, wobei die entsprechenden Phasenfaktoren mitgenommen werden; d.h. $t_{ij}^{pd} = t_{pd}$ für die Überlappung zweier Orbitale mit dem gleichen Vorzeichen, bzw. $t_{ij}^{pd} = -t_{pd}$ für Orbitale mit entgegengesetztem Vorzeichen. Analog kontrolliert der Parameter $t_{jj'}^{pp}$ ein direktes Sauerstoff-Sauerstoff Hüpfen. Ferner beschreibt U_d die lokale Coulomb-Wechselwirkung zweier Löcher an einem Kupferplatz,

während $\Delta = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ den Unterschied der lokalen Energieniveaus an den Kupfer- und Sauerstoffplätzen angibt.

In einer Reihe von Arbeiten von G. Dopf et al. [23–26] konnte gezeigt werden, daß sich durch dieses Modell mit Hilfe eines universellen Parametersatzes ($U_d/t_{pd} = 6$, $\Delta/t_{pd} = 4$ und $t_{pp}/t_{pd} = 0$) ein breites Spektrum von Normalzustandseigenschaften in zum Teil quantitativer Übereinstimmung mit dem Experiment reproduzieren läßt. Darüber hinaus zeigt sich eine attraktive Paarwechselwirkung im erweiterten s^* -Kanal, die das im Experiment beobachtete Dotierungsverhalten besitzt [25].

Eine neuere Veröffentlichung von K. Kuroki und H. Aoki [28] untersucht das Drei-Band-Modell mit Hilfe des Projektor-QMC-Algorithmus auf langreichweitige, supraleitende Ordnung. Die Autoren verwenden dabei einen Parametersatz von $\Delta/t_{pd} = 2.7$ und $U_d/t_{pd} = 3.2$, der eine Simulation ohne schwerwiegendes Vorzeichenproblem ermöglicht. Hier zeigt sich bei Systemgrößen bis zu 8×8 Einheitszellen ein Hinweis auf mögliche d -Wellen-Paarung. Jedoch ist nicht klar, inwiefern diese Parameterwerte in der Lage sind, die physikalischen Eigenschaften der HTSL im Normalzustand wiederzugeben. Das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Verfahren der optimierten Testwellenfunktion ermöglicht es jedoch, der Frage nach supraleitender Ordnung im universellen Parametersatz ($U_d/t_{pd} = 6$, $\Delta/t_{pd} = 4$) direkt im Grundzustand nachzugehen, um so die Ergebnisse von G. Dopf et al. [23–26] zu vervollständigen.

Kapitel 2

Numerische Methoden

In der vorliegenden Arbeit wird neben verschiedenen Näherungsverfahren, wie z.B. der Spin-Dichte-Welle-Theorie bzw. der lokalen Singulett-Näherung (Kapitel 3) und der sogenannten *Random-Phase-Approximation* (Kapitel 4), hauptsächlich die numerische Quanten-Monte-Carlo-Methode (QMC) zur Analyse des Hubbard-Modells angewandt. Dieses Verfahren ist zum einen in der Lage, bis auf statistische Fehler exakte Ergebnisse zu liefern, und zum anderen erlaubt es die Analyse von Systemen mit bis zu 300 Gitterplätzen. Ferner können durch weiteres Aufbereiten der QMC-Daten zusätzlich dynamische Eigenschaften des Hubbard-Modells untersucht werden.

Im folgenden soll zunächst das Prinzip des QMC-Verfahrens für ein kanonisches und großkanonisches Ensemble vorgestellt werden. Anschließend wird auf die Schwierigkeiten, wie z.B. Stabilisierungstechniken und das Vorzeichenproblem, eingegangen, die bei der numerischen Implementation entstehen. In Kapitel 2.3 soll schließlich die Methode der maximalen Entropie erläutert werden, die zur Gewinnung von dynamischen Eigenschaften aus den „rohen“ QMC-Daten verwendet wird.

2.1 Das Quanten-Monte-Carlo-Verfahren

Die Quanten-Monte-Carlo-Methode ermöglicht es, den Erwartungswert einer beliebigen Observable A sowohl im Grundzustand (Projektor-QMC) des Hamiltonoperators H (siehe Gl. 1.1) als auch bei endlicher Temperatur (großkanonisches QMC) numerisch exakt zu berechnen. Im $T = 0$ -Formalismus wird die Grundzustandswellenfunktion

$|\Psi_0\rangle$ durch Anwendung des von Sugiyama und Koonin [45] vorgeschlagenen Operators $e^{-\beta H/2}$ auf eine sogenannte Testwellenfunktion $|\Psi_T\rangle$ im Limes $\beta \rightarrow \infty$ herausgefiltert:

$$\langle A \rangle_0 = \frac{\langle \Psi_0 | A | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\langle \Psi_T | e^{-\beta H/2} A e^{-\beta H/2} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | e^{-\beta H} | \Psi_T \rangle}. \quad (2.1)$$

Entscheidend für die Tauglichkeit dieses Verfahrens ist die Wahl der Testwellenfunktion $|\Psi_T\rangle$, auf die in Kapitel 2.2.5 noch näher eingegangen wird. Bei endlichen Temperaturen ist der Erwartungswert von A gegeben durch

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr } e^{-\beta(H-\mu\hat{N})} A}{\text{Tr } e^{-\beta(H-\mu\hat{N})}}, \quad (2.2)$$

wobei die mittlere Teilchenzahl $\langle n \rangle = \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle$ durch das chemische Potential μ kontrolliert wird ($\hat{N} = \sum_i n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ steht für den Teilchenzahloperator). Der Parameter β entspricht jetzt der inversen Temperatur $\beta = 1/k_B T$.

2.1.1 Abbildung auf ein klassisches Ising-Feld

In beiden Fällen, kanonisch und großkanonisch, muß der Propagator $e^{-\beta H}$ numerisch berechnet werden. Bei einem für QMC-Methoden gut zugänglichen System von $N = 50$ Plätzen besitzt der Hamiltonoperator H bereits eine Basis mit $4^N \approx 10^{30}$ Eigenvektoren. In Matrixdarstellung besteht $e^{-\beta H}$ also aus insgesamt $\approx 10^{60}$ Elementen, so daß eine direkte Diagonalisierung unmöglich ist. Der zugrundeliegende Hamiltonoperator (Gl. 1.1) läßt sich jedoch in einen kinetischen Anteil, der das Teilchenhüpfen zwischen den Gitterplätzen enthält, und einem potentiellen Anteil, der die Coulomb-Wechselwirkung beinhaltet, zerlegen, die beide leicht diagonalisiert werden können:

$$H = H_{kin} + H_{pot} \quad (2.3)$$

mit

$$H_{kin} = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \quad \text{und} \quad (2.4)$$

$$H_{pot} = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (2.5)$$

Völlig analog wird der Drei-Band-Hamiltonoperator (Gl. 1.3) aufgespalten. Aus Gründen der Übersicht soll im folgenden ohne Beschränkung der Allgemeinheit das Quanten-Monte-Carlo-Verfahren nur am Ein-Band-Hubbard-Hamiltonoperator erläutert werden. Mit Hilfe der Trotter-Suzuki-Formel [46],

$$e^{-\Delta\tau(A+B)} = e^{-\Delta\tau A} e^{-\Delta\tau B} - \frac{\Delta\tau^2}{2} [A, B] + \mathcal{O}(\Delta\tau^3), \quad (2.6)$$

kann $e^{-\beta H}$ schließlich folgendermaßen geschrieben werden:

$$e^{-\beta H} = \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau(H_{kin}+H_{pot})} \approx \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_{kin}} e^{-\Delta\tau H_{pot}}. \quad (2.7)$$

Der Parameter $L = \beta/\Delta\tau$ steht dabei für die Anzahl der sogenannten Zeitscheiben (*Time-slices*). Es läßt sich zeigen, daß der Gesamtfehler, der durch die Trotter-Suzuki-Aufspaltung in Kauf genommen wird, von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta\tau^2)$ ist. Die Ergebnisse einer QMC-Simulation müssen somit stets auf den Wert $\Delta\tau^2 \rightarrow 0$ extrapoliert werden (siehe Abschnitt 2.2.2). In der Praxis wird meist ein Wert von $\Delta\tau$ verwendet, der klein genug ist, damit der durch $\Delta\tau$ induzierte Fehler im Bereich der noch zusätzlich auftretenden statistischen Fluktuationen liegt.

Der kinetische Anteil H_{kin} ist bilinear in den Fermionenoperatoren und somit leicht diagonalisierbar. Problematisch ist lediglich der Anteil H_{pot} , der die Wechselwirkung $Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$ enthält. Dieser kann mit Hilfe einer Hubbard-Stratonovich-Transformation weiter umgeformt werden [47]:

$$e^{-\Delta\tau U \sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}} = \prod_i e^{-\Delta\tau U n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}} = \frac{1}{2^N} \sum_{\{\alpha_i\}} \prod_i e^{\lambda\alpha_i(n_{i\uparrow}-n_{i\downarrow})-\Delta\tau U(n_{i\uparrow}+n_{i\downarrow})/2} \quad (2.8)$$

mit $\lambda = 2\arctanh\sqrt{\tanh(\Delta\tau U/4)}$. Dabei wurde ein zusätzliches, diskretes Ising-Feld $\alpha_i = \pm 1$ eingeführt, wobei $\sum_{\{\alpha_i\}}$ für die Summe über alle 2^N Ising-Konfigurationen steht. Der Ausdruck auf der rechten Seite von Gl. 2.8 ist jetzt ebenfalls bilinear in den Fermionenoperatoren und somit leicht berechenbar. Die Wechselwirkung in H_{pot} wurde also durch die Summe über das Ising-Feld ersetzt. Der gesamte Propagator $e^{-\beta H}$ ergibt sich schließlich durch Spurbildung über alle $2^{N \cdot L}$ Ising-Konfigurationen $\{\alpha_i(l)\}$ auf N Plätzen und L Zeitscheiben.

Die noch zusätzlich notwendige Spurbildung über die Exponentialfunktionen der fermionischen, bilinearen Operatoren läßt sich mit Hilfe einer Determinante ausdrücken. Allgemein gilt:

$$\text{Tr} e^{-c_i^\dagger B_{ij}^L c_j} \dots e^{-c_i^\dagger B_{ij}^2 c_j} e^{-c_i^\dagger B_{ij}^1 c_j} = \det(\mathbf{1} + e^{-\mathbf{B}^1} e^{-\mathbf{B}^2} \dots e^{-\mathbf{B}^L}). \quad (2.9)$$

Ein ausführlicher Beweis dieser Identität findet sich im Anhang einer Veröffentlichung von J.E. Hirsch [48]. Für die großkanonische Zustandssumme Z folgt somit:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(H-\mu\hat{N})} = \frac{1}{2^{L \cdot N}} \sum_{\{\alpha_i(l)\}} \prod_{\sigma} \det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{2\sigma} \mathbf{B}^{1\sigma}) \quad (2.10)$$

mit den Matrizen

$$\mathbf{B}^{l\sigma} = e^{\mathbf{V}^\sigma(l)} e^{-\Delta\tau\mathbf{K}}, \quad (2.11)$$

$$K_{ij} = -t_{ij} \quad \text{und} \quad (2.12)$$

$$V_{ij}^\sigma(l) = \delta_{ij} (\lambda\sigma\alpha_i(l) + \Delta\tau(\mu - U/2)). \quad (2.13)$$

Die beiden Spin-Anteile $\sigma = \uparrow, \downarrow$ sind nach der Hubbard-Stratonovich-Transformation völlig unabhängig und können getrennt behandelt werden.

Im Fall des $T = 0$ Projektor-QMC-Formalismus (siehe Gl. 2.1) ist für Testwellenfunktionen, die durch eine Slaterdeterminante dargestellt werden können, eine ebenso kompakte Schreibweise möglich:

$$\begin{aligned} |\Psi_T\rangle &= |\Psi_T^\uparrow\rangle \otimes |\Psi_T^\downarrow\rangle \\ &= \prod_\sigma c_{\mu_1\sigma}^\dagger c_{\mu_2\sigma}^\dagger \cdots c_{\mu_{N_\sigma}\sigma}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.14)$$

N_σ bezeichnet dabei die Anzahl der Teilchen im System mit Spin σ . Die Fermionenoperatoren $c_{\mu\sigma}$ bzw. $c_{\mu\sigma}^\dagger$ sind durch eine unitäre Transformation \mathbf{P}^σ mit den ursprünglichen Erzeugern und Vernichtern des Hamiltonoperators verknüpft:

$$c_{\mu\sigma}^\dagger = \sum_i P_{\mu i}^\sigma c_{i\sigma}^\dagger. \quad (2.15)$$

Durch eine analoge Umformung wie im Fall des großkanonischen Algorithmus ergibt sich schließlich für den $T = 0$ Formalismus [49] (siehe Gl. 2.10):

$$\langle \Psi_T | e^{-\beta H} | \Psi_T \rangle = \frac{1}{2^{L \cdot N}} \sum_{\{\alpha_i(l)\}} \prod_\sigma \det(\mathbf{P}_L^\sigma \mathbf{B}^{L\sigma} \cdots \mathbf{B}^{2\sigma} \mathbf{B}^{1\sigma} \mathbf{P}_R^\sigma). \quad (2.16)$$

$(\mathbf{P}_L^\sigma)_{\mu i} = (P_{\mu i}^\sigma)^*$ bzw. $(\mathbf{P}_R^\sigma)_{i\mu} = P_{\mu i}^\sigma$ sind dabei Matrizen der Dimension $N^\sigma \times N$ bzw. $N \times N^\sigma$ und repräsentieren die Testwellenfunktion. Es erweist sich als nützlich, noch zusätzlich folgende Abkürzungen einzuführen:

$$\mathbf{L}^\sigma(\tau_l) = \mathbf{P}_L^\sigma \mathbf{B}^{L\sigma} \cdots \mathbf{B}^{l+1\sigma} \quad \text{und} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{R}^\sigma(\tau_l) = \mathbf{B}^{l\sigma} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma} \mathbf{P}_R^\sigma \quad (2.18)$$

mit $\tau_l = l \cdot \Delta\tau$. Somit folgt:

$$Z_0 := \langle \Psi_T | e^{-\beta H} | \Psi_T \rangle = \frac{1}{2^{L \cdot N}} \sum_{\{\alpha_i(l)\}} \prod_\sigma \det(\mathbf{L}^\sigma(\tau_l) \mathbf{R}^\sigma(\tau_l)). \quad (2.19)$$

2.1.2 Die Greensche Funktion

Im eigentlichen QMC-Algorithmus werden nur Greensche Funktionen berechnet. Die gleichzeitige (*Equal-time*) Greensche Funktion ist dabei definiert als [24, 50]

$$\mathcal{G}_{ij}^\sigma(\tau, \tau) := \langle c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(\tau) \rangle, \quad (2.20)$$

wobei $\langle \dots \rangle$ entweder für die großkanonische Mittelwertbildung oder für den Erwartungswert bezüglich der $T = 0$ Grundzustandswellenfunktion steht. Im folgenden soll die Greensche Funktion ebenfalls durch die Matrizen $\mathbf{B}^{1\sigma}, \mathbf{B}^{2\sigma}, \dots, \mathbf{B}^{L\sigma}$ ausgedrückt werden. Der Operator $c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ läßt sich schreiben als [49]

$$c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} = \left. \frac{\partial}{\partial h} e^{hc_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}} \right|_{h=0} = \left. \frac{\partial}{\partial h} e^{hc_{k\sigma'}^\dagger O_{kn}^{\sigma'} c_{n\sigma'}} \right|_{h=0}, \quad (2.21)$$

wobei $O_{ji}^\sigma = 1$ das einzige von Null verschiedene Element der Matrix $\mathbf{O}^{\sigma'}$ ist. Im großkanonischen Formalismus folgt somit

$$\begin{aligned} \delta_{ij} - \mathcal{G}_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m) &= \left. \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial h} \text{Tr} e^{-(\beta - \tau_m)(H - \mu \hat{N})} e^{hc_{k\sigma'}^\dagger O_{kn}^{\sigma'} c_{n\sigma'}} e^{-\tau_m(H - \mu \hat{N})} \right|_{h=0} \\ &= \frac{1}{2^{LN} Z} \frac{\partial}{\partial h} \sum_{\{\alpha_i(l)\}} \prod_{\sigma'} \det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma'} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma'} e^{h\mathbf{O}^{\sigma'}} \mathbf{B}^{m\sigma'} \dots \mathbf{B}^{1\sigma'}) \Big|_{h=0} \\ &= \sum_{\{\alpha_i(l)\}} p_{\{\alpha_i(l)\}} (\delta_{ij} - G_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m)), \end{aligned} \quad (2.22)$$

mit

$$p_{\{\alpha_i(l)\}} = \frac{1}{2^{LN} Z} \prod_{\sigma} \det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma}) \quad (2.23)$$

und der Greenschen Funktion $G_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m)$ für eine spezielle Konfiguration der Ising-Spins $\{\alpha_i(l)\}$:

$$\delta_{ij} - G_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m) = \left. \frac{\partial}{\partial h} \frac{\det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} e^{h\mathbf{O}^\sigma} \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma})}{\det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma})} \right|_{h=0}. \quad (2.24)$$

Diese Ausdruck für $G_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m)$ läßt sich mit Hilfe der allgemeingültigen Beziehung¹

$$\ln \det \mathbf{A} = \text{Tr} \ln \mathbf{A} \quad (2.25)$$

¹Für eine diagonalisierbare Matrix $\mathbf{A} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{S} \mathbf{U}$ läßt sich Gl. 2.25 leicht einsehen:

$$\begin{aligned} \ln \det \mathbf{A} &= \ln \det \mathbf{U}^\dagger \mathbf{S} \mathbf{U} = \ln \det \mathbf{S} = \ln \prod_i S_i = \sum_i \ln S_i \\ &= \text{Tr} \ln \mathbf{S} = \text{Tr} \mathbf{U}^\dagger (\ln \mathbf{S}) \mathbf{U} = \text{Tr} \ln \mathbf{A}. \end{aligned}$$

noch erheblich vereinfachen:

$$\begin{aligned}
\delta_{ij} - G_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m) &= \frac{\partial}{\partial h} \ln \det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} e^{h\mathbf{O}^\sigma} \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma}) \Big|_{h=0} \\
&= \frac{\partial}{\partial h} \text{Tr} \ln(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} e^{h\mathbf{O}^\sigma} \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma}) \Big|_{h=0} \\
&= \text{Tr} \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right)^{-1} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} \mathbf{O}^\sigma \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \\
&= \left[\mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} (\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma})^{-1} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} \right]_{ij} \\
&= \left[\mathbf{1} + (\mathbf{B}^{m+1\sigma})^{-1} \dots (\mathbf{B}^{L\sigma})^{-1} (\mathbf{B}^{1\sigma})^{-1} \dots (\mathbf{B}^{m\sigma})^{-1} \right]_{ij}^{-1}. \quad (2.26)
\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich für die Greensche Funktion in Matrixschreibweise folgende einfache Beziehung [48, 49]:

$$\boxed{\mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m) = \left[\mathbf{1} + \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} \right]^{-1}}. \quad (2.27)$$

(Großkanonisches QMC)

Auf analoge Weise läßt sich mit Hilfe der Definitionen aus Gl. 2.17 und Gl. 2.18 die Greensche Funktion im Projektor-Formalismus schreiben:

$$\mathcal{G}_{0,ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m) = \sum_{\{\alpha_i(l)\}} p_{\{\alpha_i(l)\}}^0 G_{0,ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m) \quad (2.28)$$

mit

$$p_{\{\alpha_i(l)\}}^0 = \frac{1}{2^{LN} Z_0} \prod_{\sigma} \det(\mathbf{L}^\sigma(\tau_m) \mathbf{R}^\sigma(\tau_m)). \quad (2.29)$$

Die Greensche Funktion für eine Ising-Konfiguration lautet schließlich [49]:

$$\boxed{\mathbf{G}_0^\sigma(\tau_m, \tau_m) = \mathbf{1} - \mathbf{R}^\sigma(\tau_m) [\mathbf{L}^\sigma(\tau_m) \mathbf{R}^\sigma(\tau_m)]^{-1} \mathbf{L}^\sigma(\tau_m)}. \quad (2.30)$$

(Projektor QMC)

Entscheidend ist, daß sich in beiden Fällen das System für jede einzelne Konfiguration der Ising-Spins wie ein System aus freien Teilchen verhält. Somit ist das Wicksche Theorem anwendbar und kann zur Berechnung jedes beliebigen Operators aus den Greenschen Funktionen in Gl. 2.27 bzw. Gl. 2.30 benutzt werden. Den Vielteilcheneigenschaften wird also erst durch die Summation über alle Ising-Konfigurationen Rechnung getragen. Ist beispielsweise $A_{\{\alpha_i(l)\}}$ der Erwartungswert des Operators A gebildet aus den Greenschen Funktionen für eine Ising-Konfiguration $\{\alpha_i(l)\}$, so ergibt sich der tatsächliche Erwartungswert $\langle A \rangle$ als

$$\langle A \rangle = \sum_{\{\alpha_i(l)\}} P_{\{\alpha_i(l)\}} A_{\{\alpha_i(l)\}}, \quad (2.31)$$

wobei $P_{\{\alpha_i(l)\}}$ für die in Gl. 2.23 bzw. Gl. 2.29 definierten Gewichte $p_{\{\alpha_i(l)\}}$ bzw. $p_{\{\alpha_i(l)\}}^0$ steht. Die Berechnung von $A_{\{\alpha_i(l)\}}$ kann im großkanonischen Fall durch eine Mittelung über alle Zeitscheiben erfolgen, während im Projektor-Formalismus ein Operator A , der nicht mit H vertauscht, lediglich auf der mittleren Zeitscheibe $m = L/2$ gemessen werden darf. Die Summe in Gl. 2.31 muß, wie bereits erwähnt, über $2^{L \cdot N}$ Ising-Konfigurationen ausgeführt werden. An dieser Stelle kommt der eigentliche Monte-Carlo-Algorithmus ins Spiel, der entsprechend den Gewichten $P_{\{\alpha_i(l)\}}$ nur diejenigen Konfigurationen auswählt, die einen wichtigen Beitrag zur Berechnung von $\langle A \rangle$ liefern.

2.1.3 Importance Sampling – Die Markov-Kette

Entsprechend den Gewichten $P_{\{\alpha_i(l)\}}$ wird somit eine sogenannte *Markov-Kette* von K speziellen Ising-Konfigurationen $\{\alpha_i(l)\}_1, \{\alpha_i(l)\}_2 \dots \{\alpha_i(l)\}_K$ erzeugt. Für jede Konfiguration $k = 1 \dots K$ wird der Erwartungswert A_k des Operators K gemessen, so daß sich ein Schätzwert von $\langle A \rangle$ angeben läßt:

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K A_k. \quad (2.32)$$

Diese Näherung ist um so besser, je mehr Ising-Konfigurationen K für die Mittelung benutzt werden. In Abschnitt 2.2.4 wird zusätzlich darauf eingegangen, wie aus den Meßwerten A_k der Fehler von \bar{A} abgeschätzt werden kann.

Die Erzeugung der Markov-Kette wurde in dieser Arbeit hauptsächlich mit einem sogenannten *single Spin-flip* Algorithmus durchgeführt. In diesem Fall wird, ausgehend von einer festen Konfiguration $\{\alpha_i(l)\}$, für jeden Ising-Spin $\alpha_j(m)$ am Ort j der Zeitscheibe m die Wahrscheinlichkeit R ermittelt, diesen Spin umzudrehen (d.h. $\alpha_j(m) \rightarrow \alpha_j(m)' = -\alpha_j(m)$). R wird dabei aus dem Verhältnis der Gewichte $P_{\{\alpha_i(l)\}}$ vor und nach dem Spin-flip berechnet:

$$R = \frac{P_{\{\alpha_i(l)\}'}}{P_{\{\alpha_i(l)\}}}, \quad (2.33)$$

wobei sich $\{\alpha_i(l)\}$ und $\{\alpha_i(l)\}'$ lediglich durch den Ising-Spin am Ort j der Zeitscheibe m unterscheiden. Durch Einführung der Matrix $\Delta_j^\sigma(m)$ mit nur einem von Null verschiedenen Element,

$$\left(\Delta_j^\sigma(m) \right)_{jj} = e^{\mp 2\lambda \alpha(m)} - 1, \quad (2.34)$$

läßt sich dieser Spin-flip einfach darstellen:

$$\alpha_j(m) \longrightarrow \alpha_j(m)' = -\alpha_j(m). \quad (2.35)$$

$$V_{jj}^\sigma(m) \longrightarrow V_{jj}^\sigma(m)' = V_{jj}^\sigma(m) \mp 2\lambda\alpha_j(m). \quad (2.36)$$

$$\mathbf{B}^{m\sigma} \longrightarrow (\mathbf{B}^{m\sigma})' = (\mathbf{1} + \Delta_j^\sigma(m)) \mathbf{B}^{m\sigma}. \quad (2.37)$$

Im Fall des Projektor-QMC Formalismus ergibt sich durch Einsetzen des Gewichtes $p_{\{\alpha_i(l)\}}^0$ (Gl. 2.29) in Gl. 2.33:

$$\begin{aligned} R &= R^\dagger R^\downarrow \quad \text{mit} \\ R^\sigma &= \frac{\det(\mathbf{L}^\sigma (\mathbf{1} + \Delta_i^\sigma) \mathbf{R}^\sigma)}{\det(\mathbf{L}^\sigma \mathbf{R}^\sigma)} \\ &= \det(\mathbf{1} + (\mathbf{L}^\sigma \mathbf{R}^\sigma)^{-1} \mathbf{L}^\sigma \Delta_i^\sigma \mathbf{R}^\sigma). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Die Determinante in der letzten Gleichung wird dabei über eine $N^\sigma \times N^\sigma$ Matrix berechnet. Mit Hilfe der allgemeingültigen Beziehung für beliebige, nicht-quadratische Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{B} der Dimension $N \times M$ bzw. $M \times N$ (siehe z.B. [49]),

$$\det(\mathbf{1}_N + \mathbf{A}\mathbf{B}) = \det(\mathbf{1}_M + \mathbf{B}\mathbf{A}), \quad (2.39)$$

kann Gl. 2.38 noch weiter vereinfacht werden:

$$R^\sigma = \det(\mathbf{1} + \mathbf{R}^\sigma (\mathbf{L}^\sigma \mathbf{R}^\sigma)^{-1} \mathbf{L}^\sigma \Delta_j^\sigma(m)) = \det(\mathbf{1} + (\mathbf{1} - \mathbf{G}_0^\sigma) \Delta_j^\sigma(m)). \quad (2.40)$$

Analog ergibt sich die Flipwahrscheinlichkeit $R = R^\dagger R^\downarrow$ für den großkanonischen Algorithmus durch Einsetzen von $p_{\{\alpha_i(l)\}}$ aus Gl. 2.23 in Gl. 2.33:

$$\begin{aligned} R^\sigma &= \frac{\det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} (\mathbf{1} + \Delta_j^\sigma(m)) \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma})}{\det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma})} \\ &= \det\left(\mathbf{1} + (\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma})^{-1} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} \Delta_j^\sigma(m) \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma}\right) \\ &= \dots = \det(\mathbf{1} + (\mathbf{1} - \mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m)) \Delta_j^\sigma(m)). \end{aligned} \quad (2.41)$$

Dieses Ergebnis ist völlig identisch zur Flipwahrscheinlichkeit des Projektor-QMC-Algorithmus (Gl. 2.40). Da die Matrix $\Delta_j^\sigma(m)$ nur ein von Null verschiedenes Element besitzt, läßt sich die Determinante in der letzten Gleichung entwickeln. Somit ergibt sich schließlich die Wahrscheinlichkeit R , den Spin am Ort j zur imaginären Zeit m zu drehen, zu

$$R = R^\dagger R^\downarrow = \prod_\sigma \left[1 + (1 - G_{jj}^\sigma(\tau_m, \tau_m)) (\Delta_j^\sigma(m))_{jj} \right]. \quad (2.42)$$

(Großkanonisch und Projektor)

Für die tatsächliche Wahrscheinlichkeit P , einen Ising-Spin umzudrehen, wurde in dieser Arbeit der sog. „*Heat-bath*“ Algorithmus verwendet:

$$P[\alpha_j(m) \longrightarrow -\alpha_j(m)] = \frac{R}{1+R}. \quad (2.43)$$

Wenn der Wert von P größer ist als eine Zufallszahl im Intervall $[0, 1]$, dann wird der Spin-flip akzeptiert, ansonsten bleibt das Ising-Gitter unverändert. Wird der Ising-Spin $\alpha_j(m)$ schließlich umgedreht, so folgt für die großkanonische Greensche Funktion (die Abhängigkeit von der imaginären Zeit τ_m wurde der Übersichtlichkeit halber weggelassen):

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^\sigma \rightarrow (\mathbf{G}^\sigma)' &= [\mathbf{1} + (\mathbf{1} + \Delta_j^\sigma) \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma}]^{-1} \\ &= \mathbf{G}^\sigma [\mathbf{1} + \Delta_j^\sigma (\mathbf{G}^{\sigma-1} - \mathbf{1}) \mathbf{G}^\sigma]^{-1} \\ &= \mathbf{G}^\sigma [\mathbf{1} + \Delta_j^\sigma (\mathbf{1} - \mathbf{G}^\sigma)]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Da die Matrix $\Delta_j^\sigma (\mathbf{1} - \mathbf{G}^\sigma)$ nur dünn besiedelt ist, läßt sich mit Hilfe der Sherman-Morrison-Formel [51]

$$(\mathbf{A} + \mathbf{u} \otimes \mathbf{v})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{(\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{u}) \otimes (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}^{-1})}{1 + \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{u}} \quad (2.45)$$

die neue Greensche Funktion $(\mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m))'$ numerisch effektiv berechnen. \mathbf{A} steht dabei für eine invertierbare Matrix, \mathbf{u} , \mathbf{v} sind Vektoren und $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$ mit $(\mathbf{u} \otimes \mathbf{v})_{ij} = u_i v_j$ das äußere Produkt. Analog kann die Greensche Funktion für den Projektor-QMC-Algorithmus bestimmt werden. Somit folgt sowohl für den großkanonischen QMC als auch für den Projektor-QMC-Formalismus [49, 52]:

$$\boxed{(\mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m))' = \mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m) - \frac{1}{R^\sigma} \mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m) \Delta_j^\sigma(m) (\mathbf{1} - \mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m))}. \quad (2.46)$$

(Großkanonisch und Projektor)

Da die Matrix $\Delta_j^\sigma(m)$ (siehe Gl. 2.34) nur ein von Null verschiedenes Element enthält, erfordert diese in der Literatur als „*Updating*“ bezeichnete Neuberechnung der Green-schen Funktion lediglich einen Rechenaufwand von der Ordnung $\mathcal{O}(N^2)$, während die direkte Berechnung durch Gl. 2.27 bzw. Gl. 2.30 vom Aufwand $\mathcal{O}(N^3)$ ist.

2.2 Numerische Realisierung der QMC-Methode

Im Abschnitt 2.1 wurden sämtliche elementaren Gleichungen explizit hergeleitet, die zur numerischen Simulation von Hubbard-Modellen notwendig sind. Der Ablauf des

gesamten QMC-Algorithmus läßt sich dabei folgendermaßen verstehen:

Zuerst wird das Ising-Feld aufgebaut, d.h. die Ising-Variablen $\alpha_i(l)$ werden zufällig mit den Werten $+1$ oder -1 belegt. Mit Hilfe von Gl. 2.27 bzw. Gl. 2.30 läßt sich anschließend die Greensche Funktion für die erste Zeitscheibe ($m = 1$) berechnen. Nun kann der erste Monte-Carlo-Sweep durchgeführt werden. Hierzu wird für jede Zeitscheibe m und für jeden Gitterplatz j die Wahrscheinlichkeit R , den Ising-Spin $\alpha_i(m)$ umzudrehen, nach Gl. 2.43 berechnet und der Spin eventuell abgeändert. Mit Gl. 2.46 kann die Greensche Funktion schnell für die neue Ising-Konfiguration bestimmt werden. Um von einer Zeitscheibe zur nächsten zu gelangen (*Wrapping*), genügt²

$$\mathbf{G}^\sigma(\tau_{m+1}, \tau_{m+1}) = \mathbf{B}^{m+1\sigma} \mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m) (\mathbf{B}^{m+1\sigma})^{-1} \quad \text{bzw.} \quad (2.47)$$

$$\mathbf{G}^\sigma(\tau_{m-1}, \tau_{m-1}) = (\mathbf{B}^{m\sigma})^{-1} \mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m) \mathbf{B}^{m\sigma}. \quad (2.48)$$

Somit läßt sich das gesamte Ising-Feld durchfahren. Bevor die eigentliche Messung, d.h. die Berechnung von Observablen aus den Greenschen Funktionen, beginnen kann, ist eine bestimmte Anzahl von Temperierungsschritten (*Warm-ups*) notwendig. Bei tiefen Temperaturen (hohen Werten von β) empfiehlt es sich zusätzlich, während des *Warm-ups* die inverse Temperatur β schrittweise langsam zu erhöhen.

Im folgenden Kapitel soll auf die zusätzlichen numerischen Probleme und deren Lösung, die bei der programmtechnischen Realisierung des eben beschriebenen Algorithmus auftreten, eingegangen werden. Dies sind die aufgrund der endlichen Rechengenauigkeit notwendige Stabilisierung (Abschnitt 2.2.1), das Speichern der Matrizen im Computer, die *Checkerboard*-Zerlegung zur Minimierung der Rechenzeit (Abschnitt 2.2.2), das Vorzeichen bzw. Phasenproblem (Abschnitt 2.2.3), sowie die Bestimmung des Standardfehlers der QMC-Daten (Abschnitt 2.2.4). Schließlich soll noch zusätzlich die geeignete Wahl einer Testwellenfunktion für den Projektor-QMC-Algorithmus diskutiert werden (Abschnitt 2.2.5).

2.2.1 Stabilisierung

Um die Greensche Funktion mit Gl. 2.27 bzw. Gl. 2.30 zu berechnen, müssen vor allem bei großen Werten von β zahlreiche Matrizen $\mathbf{B}^{l\sigma}$ aufmultipliziert werden. Da

²Gl. 2.47 läßt sich durch Multiplikation von Gl. 2.27 bzw. Gl. 2.30 mit $\mathbf{B}^{l\sigma}$ und $(\mathbf{B}^{l\sigma})^{-1}$ leicht beweisen (der Term $[\mathbf{L}^\sigma(\tau_m)\mathbf{R}^\sigma(\tau_m)]^{-1}$ in Gl. 2.30 ist unabhängig von m).

im Extremfall die Matrixelemente dieses Produkts zwischen 10^{-100} und 10^{+100} liegen können, ist die direkte Multiplikation numerisch sehr schlecht konditioniert. Durch eine geschickte Darstellung der Matrizen im Computer lassen sich diese Skalen jedoch besser kontrollieren. Hierzu wird das Produkt von M Matrizen, wobei M klein genug sein soll, um stabil eine direkte Multiplikation durchführen zu können, in drei Matrizen \mathbf{U} , \mathbf{D} und \mathbf{V} zerlegt [45, 49] (der Spin-Index wurde aus Gründen der Übersichtlichkeit weggelassen):

$$\mathbf{B}^M \mathbf{B}^{M-1} \dots \mathbf{B}^1 = \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}. \quad (2.49)$$

Dabei ist \mathbf{U} eine orthonormale, \mathbf{D} eine diagonale und \mathbf{V} eine obere Dreiecksmatrix. Lediglich die Matrix \mathbf{D} enthält jetzt Elemente über einen großen Skalenbereich. Da diese Matrix diagonal ist, kann die Multiplikation mit \mathbf{D} im nächsten Stabilisierungsschritt trotzdem stabil erfolgen. Das Ergebnis wird anschließend wieder in drei Matrizen $\tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{V}}$ zerlegt:

$$\mathbf{B}^{2M} \dots \mathbf{B}^1 = \underbrace{\mathbf{B}^{2M} \dots \mathbf{B}^{M+1} \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}}_{\tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{V}}} = \tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{D}} (\tilde{\mathbf{V}} \mathbf{V}) = \tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{V}}. \quad (2.50)$$

Auf diese Weise läßt sich das Produkt $\mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma}$ zur Berechnung der großkanonischen Greenschen Funktion (siehe Gl. 2.27) numerisch stabil bestimmen und als Matrixprodukt $\mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}$ darstellen. Für die gesamte Greensche Funktion folgt schließlich:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m) &= [\mathbf{1} + \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}]^{-1} = \mathbf{V}^{-1} [\mathbf{U}^{-1} \mathbf{V}^{-1} + \mathbf{D}]^{-1} \mathbf{U}^{-1} \\ &= \mathbf{V}^{-1} [\tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{D}} \tilde{\mathbf{V}}]^{-1} \mathbf{U}^{-1} = [\tilde{\mathbf{V}} \mathbf{V}]^{-1} \tilde{\mathbf{D}}^{-1} [\mathbf{U} \tilde{\mathbf{U}}]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Einfacher sieht das Ergebnis im Projektor-Algorithmus aus. Zuerst werden die Matrizen $\mathbf{L}^\sigma = \mathbf{V}_L \mathbf{D}_L \mathbf{U}_L$ und $\mathbf{R}^\sigma = \mathbf{U}_L \mathbf{D}_L \mathbf{V}_L$ (siehe Gl. 2.30) nach obiger Vorschrift zerlegt. Für die Greensche Funktion ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_0^\sigma(\tau_m, \tau_m) &= \mathbf{1} - \mathbf{U}_R \mathbf{D}_R \mathbf{V}_R [\mathbf{V}_L \mathbf{D}_L \mathbf{U}_L \mathbf{U}_R \mathbf{D}_R \mathbf{V}_R]^{-1} \mathbf{V}_L \mathbf{D}_L \mathbf{U}_L \\ &= \mathbf{1} - \mathbf{U}_R \mathbf{D}_R \mathbf{V}_R \mathbf{V}_R^{-1} \mathbf{D}_R^{-1} [\mathbf{U}_L \mathbf{U}_R]^{-1} \mathbf{D}_L^{-1} \mathbf{V}_L^{-1} \mathbf{V}_L \mathbf{D}_L \mathbf{U}_L \\ &= \mathbf{1} - \mathbf{U}_R [\mathbf{U}_L \mathbf{U}_R]^{-1} \mathbf{U}_L. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Dabei sind \mathbf{D}_L , \mathbf{D}_R , \mathbf{V}_L und \mathbf{V}_R quadratische Matrizen der Dimension $N^\sigma \times N^\sigma$, während die Matrizen \mathbf{U}_L und \mathbf{U}_R die Dimensionen $N^\sigma \times N$ bzw. $N \times N^\sigma$ besitzen. Im Projektor-Formalismus hat diese $\mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{V}$ -Zerlegung also zusätzlich den Vorteil, daß die Matrizen \mathbf{D} und \mathbf{V} und somit die problematischen Skalen in \mathbf{D} nicht zur Berechnung

der Greenschen Funktion beitragen. Ferner läßt sich eine zu Gl. 2.46 entsprechende Beziehung herleiten, die nur das *Updating* von $[\mathbf{U}_L \mathbf{U}_R]^{-1}$ beschreibt. Der hierfür notwendige numerische Aufwand ist somit von der Ordnung $\mathcal{O}((N^\sigma)^2)$ anstelle von $\mathcal{O}(N^2)$. Dies ist vor allem bei der Simulation des Drei-Band-Modells (Gl. 1.3) von Vorteil, bei dem die Anzahl der Teilchen im System typischerweise um den Faktor 3 kleiner ist als die Zahl der Gitterplätze.

Für die konkrete Realisierung genügt im Projektor-Algorithmus somit die Orthonormierung des Produktes aus $\mathbf{B}^{l\sigma}$ -Matrizen, beispielsweise mit Hilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens [53]. Für den großkanonischen Algorithmus wurde die aufwendigere *Householder*-Transformation [51] verwendet, die selbst bei tiefen Temperaturen eine stabile Berechnung der Greenschen Funktion erlaubt.

2.2.2 Minimierung der Rechenzeit

Die direkte Implementierung des bisher vorgestellten Algorithmus ist enorm rechenzeitaufwendig: Pro QMC-*Sweep* wird das Gitter für alle L Zeitscheiben auf allen N Gitterplätzen durchfahren. Wird ein Spinflip akzeptiert, so ist ein *Updating* der Greenschen Funktion nach Gl. 2.46 von der Ordnung $\mathcal{O}(N^2)$ notwendig. Da trotz der Stabilisierung sich die numerische Fehler beim *Updating* sowie beim *Wrapping* akkumulieren, ist eine völlige Neuberechnung der Greenschen Funktion nach Gl. 2.27 bzw. Gl. 2.30 während eines *Sweeps* alle vier bis acht Zeitscheiben notwendig. Dies führt insgesamt zu einem Rechenaufwand von der Ordnung $\mathcal{O}(L^2 N^3)$ für das großkanonische QMC-Verfahren ($\mathcal{O}(L^2 N (N^\sigma)^2)$ für den Projektor-Formalismus).

Durch geschicktes Speichern der Zwischenprodukte bei der Neuberechnung der Greenschen Funktion ist jedoch eine erhebliche Reduzierung der Rechenzeit möglich: Die Greensche Funktion soll beispielsweise alle vier Zeitscheiben neu berechnet werden. Hat die letzte Neuberechnung zur „Zeit“ m_1 stattgefunden, dann wird die Greensche Funktion nach dem Durchfahren von sämtlichen Gitterplätzen auf allen vier Zeitscheiben folglich zur Zeit $m_2 = m_1 + 4$ neu bestimmt:

$$\mathbf{G}^\sigma(\tau_{m_2}, \tau_{m_2}) = [\mathbf{1} + \underbrace{\mathbf{B}^{m_2\sigma} \dots \mathbf{B}^{m_1\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m_2+1\sigma}}_{\text{unverändert}}]^{-1}. \quad (2.53)$$

Die Matrizen $\mathbf{B}^{m_1\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m_2+1\sigma}$ blieben während der Zeitentwicklung von m_1 nach m_2 unverändert, d.h. durch geschicktes Abspeichern der Zwischenprodukte bei der

Neuberechnung der Greenschen Funktion kann der Rechenaufwand auf 4 Matrixmultiplikationen reduziert werden. Die Gesamtrechnenzeit ist somit von der Ordnung $\mathcal{O}(LN^3)$ ($\mathcal{O}(LN(N^\sigma)^2)$ für den Projektor-Formalismus).

Eine zusätzliche Reduzierung des Rechenaufwandes kann bei der Multiplikation mit den Matrizen $\mathbf{B}^{l\sigma}$ (Gl. 2.11) erreicht werden. Diese Multiplikation wird sowohl bei der Neuberechnung der Greenschen Funktion als auch bei der Propagation der Greenschen Funktion auf die nächste Zeitscheibe (*Wrapping*) benötigt. Die direkte Berechnung des kinetischen Anteils $e^{-\Delta\tau\mathbf{K}}$ führt zu einer dicht besiedelten Matrix und somit zu einem Aufwand von $\mathcal{O}(N^3)$ bei der Multiplikation. Durch erneutes Anwenden der Trotter-Suzuki-Zerlegung läßt sich dieser kinetische Beitrag jedoch weiter vereinfachen:

$$e^{-\Delta\tau\mathbf{K}} = e^{\Delta\tau \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{t}_{ij})} \approx \prod_{\langle ij \rangle} e^{\Delta\tau(\mathbf{t}_{ij})}, \quad (2.54)$$

wobei $\sum_{\langle ij \rangle}$ die Summe über alle Paare von Gitterplätzen bezeichnet, die durch Hüpf-elemente $t_{ij} \neq 0$ miteinander verbunden sind. Ferner steht (\mathbf{t}_{ij}) für eine $N \times N$ -Matrix mit lediglich zwei von Null verschiedenen Elementen t_{ij} und $t_{ji} = t_{ij}^*$. Somit folgt:

$$e^{-\Delta\tau\mathbf{K}} \approx \prod_{\langle ij \rangle} \exp \Delta\tau \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & t_{ij} & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & t_{ij}^* & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \prod_{\langle ij \rangle} \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & \cosh(\Delta\tau|t_{ij}|) & \cdots & \frac{t_{ij}}{|t_{ij}|} \sinh(\Delta\tau|t_{ij}|) & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & \frac{t_{ij}^*}{|t_{ij}|} \sinh(\Delta\tau|t_{ij}|) & \cdots & \cosh(\Delta\tau|t_{ij}|) & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Auf diese Weise erfordert die Multiplikation mit dem kinetischen Anteil $e^{-\Delta\tau\mathbf{K}}$ einen Rechenaufwand der Ordnung $\mathcal{O}(N^2)$ anstelle von $\mathcal{O}(N^3)$. Diese Art der Matrixbehandlung wird in der Literatur als *Checkerboard-breakup* bezeichnet. Abb. 2.1 zeigt die

Gesamtenergie $E(\Delta\tau)$ eines 2×12 -Systems in Abhängigkeit von $\Delta\tau^2$, sowohl für ein reelles ($\Phi/\Phi_0 = 0$) als auch für ein komplexes Hüpfmatrixelement t_{ij} ($\Phi/\Phi_0 = 0.25$). Auf die Bedeutung von komplexen Hüpfmatrixelementen bzw. der Phase Φ wird in Abschnitt 4.3 näher eingegangen. Aus der Abbildung wird ersichtlich, daß der zusätzliche Fehler, der durch die *Checkerboard-breakups* erzeugt wird, von untergeordneter Bedeutung ist gegenüber dem systematischen Fehler, der durch die Aufspaltung von kinetischen und potentiellen Anteil des Hamiltonoperators (siehe Gl. 2.7) entsteht. Abb. 2.1 zeigt zudem, daß die Differenz $E(\Phi/\Phi_0 = 0.25) - E(\Phi/\Phi_0 = 0)$ für die betrachteten Werte von $\Delta\tau$ nicht von $\Delta\tau$ abhängt. D.h. für die Berechnung der Größe $E(\Phi/\Phi_0 = 0.25) - E(\Phi/\Phi_0 = 0)$, die mit der superfluiden Dichte identifiziert werden kann (siehe Abschnitt 4.3), ist keine Extrapolation der QMC-Daten auf $\Delta\tau = 0$ notwendig.

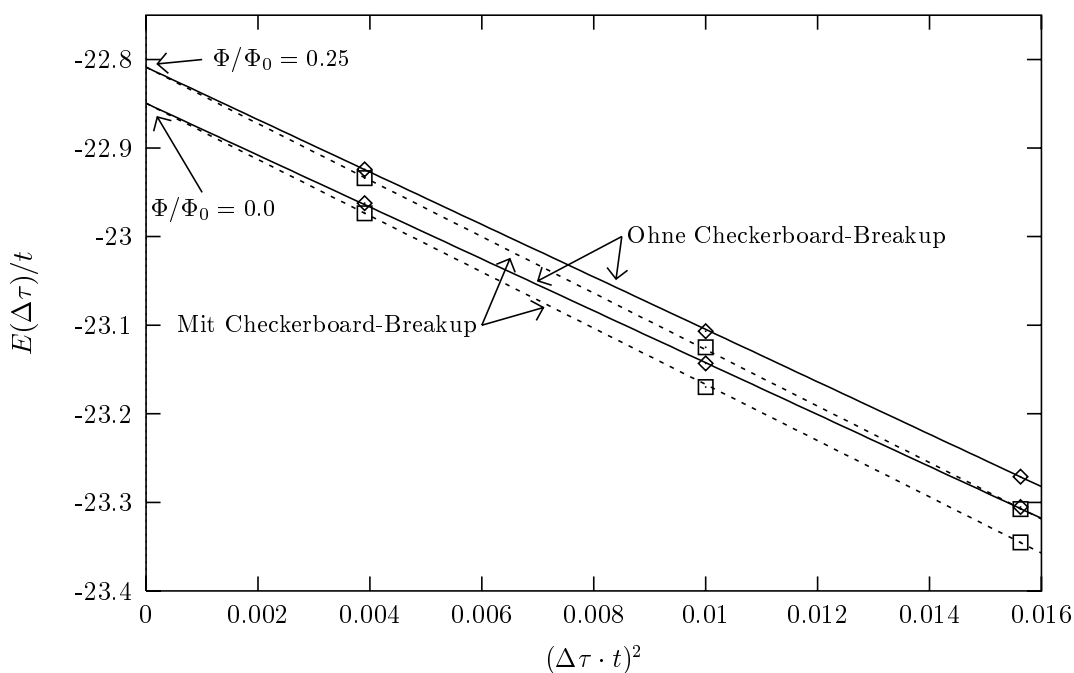


Abb. 2.1: Gesamtenergie eines 2×12 -Systems in Abhängigkeit des Parameters $\Delta\tau^2$ mit $t_{\perp} = t$, $U/t = 4$ und $\beta t = 8$ bei einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.75$. Gezeigt wird das Ergebnis bei direkter Berechnung der Matrix $e^{-\Delta\tau\mathbf{K}}$ (\diamond) und bei Verwendung des Checkerboard-breakups (\square), jeweils mit ($\Phi/\Phi_0 = 0.25$) und ohne ($\Phi/\Phi_0 = 0$) angelegtem magnetischen Fluß.

2.2.3 Das Vorzeichen- bzw. Phasenproblem

Eines der ungelösten Probleme der Quanten-Monte-Carlo-Simulation von Fermionen ist das sog. Vorzeichen- oder *Minus-sign*-Problem. Die Fermionendeterminante, die in Gl. 2.23 bzw. Gl. 2.29 definiert wird, ist nicht notwendigerweise stets positiv. D.h. die Gewichte $P_{\{\alpha_i(l)\}}$ (Gl. 2.31) können negativ, im Fall eines komplexen Hamiltonoperators sogar komplex werden. Dies ist vor allem in dotierten Systemen und bei tiefen Simulationstemperaturen der Fall. Formal läßt sich diesem Vorzeichen- bzw. Phasenproblem durch Betragsbildung Rechnung tragen. Im reellen Fall gilt:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{\{\alpha_i(l)\}} |P_{\{\alpha_i(l)\}}| \text{Sign}_{\{\alpha_i(l)\}} A_{\{\alpha_i(l)\}}}{\sum_{\{\alpha_i(l)\}} |P_{\{\alpha_i(l)\}}| \text{Sign}_{\{\alpha_i(l)\}}} \approx \frac{\sum_{k=1}^K A_k \text{Sign}_k}{\sum_{k=1}^K \text{Sign}_k}, \quad (2.55)$$

wobei $\text{Sign}_{\{\alpha_i(l)\}} = P_{\{\alpha_i(l)\}} / |P_{\{\alpha_i(l)\}}|$ das Vorzeichen des Gewichtes $P_{\{\alpha_i(l)\}}$ ist. Zur Erzeugung der K Ising-Konfigurationen wird somit $|P_{\{\alpha_i(l)\}}|$ verwendet, d.h. die Flipwahrscheinlichkeit R ist gegeben durch (siehe Gl. 2.33):

$$R = \left| \frac{P_{\{\alpha_i(l)\}'}}{P_{\{\alpha_i(l)\}}} \right|. \quad (2.56)$$

Analog läßt sich in Falle eines komplexen QMC-Verfahrens der Erwartungswert der Observable A berechnen:

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{k=1}^K A_k \text{Phase}_k}{\sum_{k=1}^K \text{Phase}_k}, \quad (2.57)$$

mit der komplexen Phase $P_{\{\alpha_i(l)\}} / |P_{\{\alpha_i(l)\}}|$. Das mittlere Vorzeichen $\langle \text{Sign} \rangle$ bzw. die mittlere Phase $\langle \text{Phase} \rangle$ ist dabei stets reell und positiv, verhält sich jedoch wie $e^{-\beta N}$ bei tiefen Temperaturen und einer großen Anzahl von Gitterplätzen [24, 54]. Wird dieses mittlere Vorzeichen zu klein, kann aufgrund der starken Fluktuationen von $A_k \text{Sign}_k$ bzw. $A_k \text{Phase}_k$ nur noch mit enormen CPU-Zeitaufwand simuliert werden. Mit den zur Zeit vorhandenen Algorithmen und Supercomputern sind Simulationen bei mittleren Vorzeichen von bis zu ≈ 0.1 möglich.

Da sich im Falle eines komplexen QMC-Algorithmus die Phase mit jedem Spin-flip ändert, ist es zusätzlich notwendig, die $\text{Phase}_{\{\alpha_i(l)\}} = P_{\{\alpha_i(l)\}} / |P_{\{\alpha_i(l)\}}|$ nach einigen

Zeitscheiben völlig neu zu berechnen, um numerische Fehler zu vermeiden. Aus Gl. 2.23 bzw. Gl. 2.29 folgt für die Phase der Ising-Konfiguration $\{\alpha_i(l)\}$:

$$\text{Phase}_{\{\alpha_i(l)\}}^{\text{Großkanonisches QMC}} = \prod_{\sigma} \frac{\det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma})}{|\det(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma})|}, \quad (2.58)$$

$$\text{Phase}_{\{\alpha_i(l)\}}^{\text{Projektor QMC}} = \prod_{\sigma} \frac{\det(\mathbf{L}^{\sigma}(\tau_m)\mathbf{R}^{\sigma}(\tau_m))}{|\det(\mathbf{L}^{\sigma}(\tau_m)\mathbf{R}^{\sigma}(\tau_m))|}, \quad (2.59)$$

wobei die Determinanten sich jeweils direkt numerisch entwickeln lassen.

2.2.4 Die „Jackknife“-Methode in QMC

Bei einer QMC-Simulation werden K Daten A_k und entsprechend viele Werte des Vorzeichens bzw. der Phase erzeugt, die im folgenden mit s_k ($k = 1 \dots K$) bezeichnet werden sollen. Der Mittelwert \bar{A} der Simulation ergibt sich dann nach Gl. 2.55 bzw. Gl. 2.57 zu

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{\sum_{k=1}^K x_k}{\sum_{k=1}^K s_k}, \quad (2.60)$$

mit $x_k = A_k s_k$. Diese direkte Berechnung von $\langle A \rangle$ ermöglicht allerdings nicht die Bestimmung des statistischen Fehlers der Messung. Um dennoch eine Fehlerrechnung durchführen zu können, werden die K Messungen überlicherweise zu N_G Gruppen (*Bins*) mit jeweils $K_G = K/N_G$ Meßwerten zusammengefaßt. Auf diese Weise läßt sich ein Schätzwert $\langle A \rangle_{\text{biased}}$ von \bar{A} und dessen Varianz σ_{biased}^2 ermitteln:

$$\langle A \rangle_{\text{biased}} = \frac{1}{N_G} \sum_{i=1}^{N_G} f_i, \quad (2.61)$$

$$\sigma_{\text{biased}}^2 = \frac{1}{N_G - 1} \sum_{i=1}^{N_G} (f_i - \langle A \rangle_{\text{biased}})^2 \quad \text{mit} \quad (2.62)$$

$$f_i = \frac{x_i^G}{s_i^G}, \quad (2.63)$$

$$x_i^G = \frac{1}{K_G} \sum_{k=(i-1)K_G+1}^{iK_G} x_k \quad \text{und} \quad (2.64)$$

$$s_i^G = \frac{1}{K_G} \sum_{k=(i-1)K_G+1}^{iK_G} s_k. \quad (2.65)$$

Der Vorfaktor $1/(N_G - 1)$ der Varianz σ_{biased}^2 wurde dabei so gewählt, daß der Erwartungswert $\langle \sigma_{\text{biased}}^2 \rangle$ mit der tatsächlichen Varianz $\langle (f_i - \langle f_i \rangle)^2 \rangle$ der Daten f_i übereinstimmt. Bei dieser Bestimmung der Observablen A ist folgendes zu beachten: Zum einen muß die Zahl der Messungen K_G pro Gruppe so gewählt werden, daß die Daten f_i in guter Näherung statistisch voneinander unabhängig sind, d.h. die Autokorrelationsfunktion $A(l) = \overline{f_i f_{i+l}} - \bar{f}_i^2$ muß hinreichend klein sein. Das zweite, größere Problem bei der Berechnung von $\langle A \rangle_{\text{biased}}$ nach Gl. 2.61 ist der zusätzlich auftretende systematische Fehler: Da im allgemeinen $\langle f \rangle / \langle g \rangle \neq \langle f/g \rangle$ ist, stimmt selbst im Limes $N_G \rightarrow \infty$ der Erwartungswert von $\langle A \rangle_{\text{biased}}$ nicht mit dem exakten Ergebnis $\langle A \rangle$ überein. Dieser zusätzliche Fehler, der besonders bei kleinen Werten des mittleren Vorzeichens bzw. der mittleren Phase von entscheidender Bedeutung ist, kann z.B. durch eine Vergrößerung der Messungen pro Gruppe K_G systematisch verringert werden. Wesentlich eleganter läßt sich dieser Fehler jedoch durch Anwendung des sog. „Jackknife“-Verfahrens vermeiden. Dabei werden jeweils $N_G - 1$ Gruppen zu einer neuen Gruppe zusammengefaßt:

$$f_i^J = \frac{\sum_{i' \neq i} x_i^{G'}}{\sum_{i' \neq i} s_i^{G'}}. \quad (2.66)$$

Aus diesen Werten f_i^J mit $i = 1 \dots N_G$ läßt sich nun der sog. *Jackknife-Estimator* $\langle A \rangle_{\text{jack}}$ der Observablen A berechnen und dessen Varianz σ_{jack}^2 angeben [55, 56]:

$$\langle A \rangle_{\text{jack}} = \frac{1}{N_G} \sum_{i=1}^{N_G} f_i^J \quad \text{und} \quad (2.67)$$

$$\sigma_{\text{jack}}^2 = (N_G - 1) \sum_{i=1}^{N_G} (f_i^J - \langle A \rangle_{\text{jack}})^2. \quad (2.68)$$

Der Vorfaktor $(N_G - 1)$ in der letzten Gleichung berücksichtigt zusätzlich die statistische Abhängigkeit der Messungen f_i^J . Bei Verwendung dieser *Jackknife*-Methode ist der systematische Fehler $\langle \langle A \rangle_{\text{jack}} \rangle - \langle A \rangle$ von der Ordnung $\mathcal{O}(1/N_G)$ und kann im allgemeinen gegenüber dem statistischen Fehler der QMC-Simulation vernachlässigt werden.

2.2.5 Die Wahl der Testwellenfunktion

In diesem Abschnitt soll näher auf die Wahl der Testwellenfunktion $|\Psi_T\rangle$ für das $T = 0$ Projektor-QMC Verfahren eingegangen werden. Entsprechend Gl. 2.1 wird der Grund-

zustand $|\Psi_0\rangle$ durch Anwendung des Projektionsoperators $e^{-\beta H/2}$ auf $|\Psi_T\rangle$ herausgefiltert. Dies läßt sich durch eine Entwicklung von $|\Psi_T\rangle$ nach Eigenzuständen von H besser verstehen:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{\beta}{2}H}|\Psi_T\rangle &= e^{-\frac{\beta}{2}H} \sum_n \langle\Psi_n|\Psi_T\rangle |\Psi_n\rangle \\ &= e^{-\frac{\beta}{2}E_0} \left(\langle\Psi_0|\Psi_T\rangle |\Psi_0\rangle + \sum_{n>0} e^{-\frac{\beta}{2}(E_n-E_0)} \langle\Psi_n|\Psi_T\rangle |\Psi_n\rangle \right), \quad (2.69) \end{aligned}$$

wobei $|\Psi_n\rangle$ die Eigenzustände mit den entsprechenden Eigenenergien E_n des Hamiltonoperators H sind. Die Energiedifferenz $E_n - E_0$ ist stets positiv, d.h. im Limes $\beta \rightarrow \infty$ verschwindet der letzte Term in Gl. 2.69. In der Praxis wird der obige Ausdruck für einen endlichen Wert von β berechnet, für den die Meßwerte innerhalb der Fehlerbalken bereits auskonvergiert sind. Das Ziel ist also, eine Testwellenfunktion zu finden, bei der diese Konvergenz bereits bei einem Wert von β erreicht wird, bei dem aufgrund des Vorzeichenproblems noch simuliert werden kann.

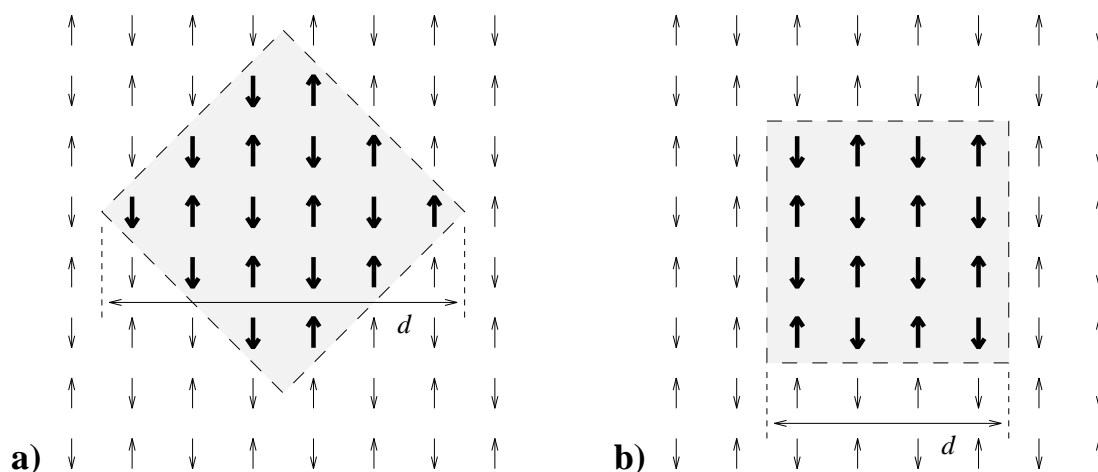


Abb. 2.2: Verschiedene Startkonfigurationen im Spinraum zur Berechnung einer optimierten Testwellenfunktion. Zugrunde liegt jeweils eine antiferromagnetische Spinordnung, wobei die einzelnen Spins innerhalb eines Karos (◇, Teil (a)) der Kantenlänge d bzw. innerhalb eines Quadrates (□, Teil (b)) der Kantenlänge d nochmals „gefippt“ sind.

Überlicherweise wird als Testwellenfunktion die Lösung des wechselwirkungsfreien Hamiltonoperators ($U = 0$) verwendet. Dies ist besonders sinnvoll bei Dotierungen, die einer geschlossenen Schale im \vec{k} -Raum (*Closed-shell* Konfiguration) entsprechen. In diesem Fall ist gewährleistet, daß die Testwellenfunktion bereits die richtige Symmetrie des Grundzustandes aufweist (z.B. ist der Gesamtspin dieser wechselwirkungsfreien

Testwellenfunktion stets $\langle \vec{S}^2 \rangle = 0$). Somit ist die Überlappung zwischen der Testwellenfunktion und den niedrigsten Anregungszuständen, die im allgemeinen eine andere Symmetrie als der Grundzustand aufweisen, exakt Null. Da der niedrigste Eigenzustand $|\Psi_{n'}\rangle$, der eine nichtverschwindende Überlappung mit der Testwellenfunktion besitzt, bereits eine relativ große Energiedifferenz $E_{n'} - E_0$ zum Grundzustand aufweist, konvergiert eine derartige Testwellenfunktion äußerst gut.

Größe	Anzahl $N_\uparrow + N_\downarrow$	Teilchen- dichte $\langle n \rangle$	◇/□	Hinter- grund F/AF	d
4×4	16	1.00000		AF	0
	18	1.12500	□	AF	2
	20	1.25000	□	AF	2
	22	1.37500	□	AF	2
	24	1.50000	□	AF	2
6×6	36	1.00000		AF	0
	38	1.05556	◇	AF	2
	40	1.11111	◇	AF	4
	42	1.16667	◇	AF	5
	44	1.22222	□	AF	4
	48	1.33333	□	AF	2
	50	1.38889	◇	F	4
	52	1.44444	◇	F	5
	54	1.50000	◇	F	6
	8×8	64	1.00000		AF
66		1.03125	◇	AF	2
68		1.06250	◇	AF	4
70		1.09375	◇	AF	4
72		1.12500	◇	AF	6
74		1.15625	◇	AF	6
76		1.18750	◇	AF	6
78		1.21875	◇	AF	8
80		1.25000	◇	AF	7
82		1.28125	◇	AF	7
84		1.31250	□	AF	2
88		1.37500	◇	AF	2
90		1.40625	◇	AF	5
92		1.43750	◇	AF	5
94	1.46875	□	AF	2	
96	1.50000	◇	AF	5	

Tabelle 2.1: Startkonfigurationen zur Erzeugung von optimierten Testwellenfunktionen im Drei-Band-Hubbard-Modell mit $U_d/t_{pd} = 6$ und $\Delta/t_{pd} = 4$. In sämtlichen Fällen wurde $U_d^{\text{init}}/t_{pd} = 0.5$ gewählt. Angegeben ist die Geometrie im Spinraum (Karo ◇ oder Quadrat □), deren Breite d und der Spinbackground (ferromagnetisch (F) oder antiferromagnetisch (AF)).

Eine zweite Möglichkeit zur Erzeugung einer Testwellenfunktion ist ein von N. Furukawa und M. Imada [57, 58] vorgeschlagenes Verfahren. Verwendet wird hier eine selbstkonsistente Lösung des uneingeschränkten Hartree-Fock-Hamiltonoperators („*unrestricted Hartree-Fock*“, UHF). Im Fall des Ein-Band-Modells läßt sich dieser effektive Hamiltonoperator folgendermaßen schreiben (siehe hierzu auch Abschnitt 3.1.2):

$$H_{UHF} = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. + U^{\text{init}} \sum_i \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow} + \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle. \quad (2.70)$$

Im Gegensatz zu der in Abschnitt 3.1.2 vorgestellten antiferromagnetischen Hartree-Fock-Näherung sind in diesem Fall die Werte von $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ und $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ völlig unabhängig voneinander. In einem 8×8 -Gitter müssen so beispielsweise insgesamt 128 Variablen

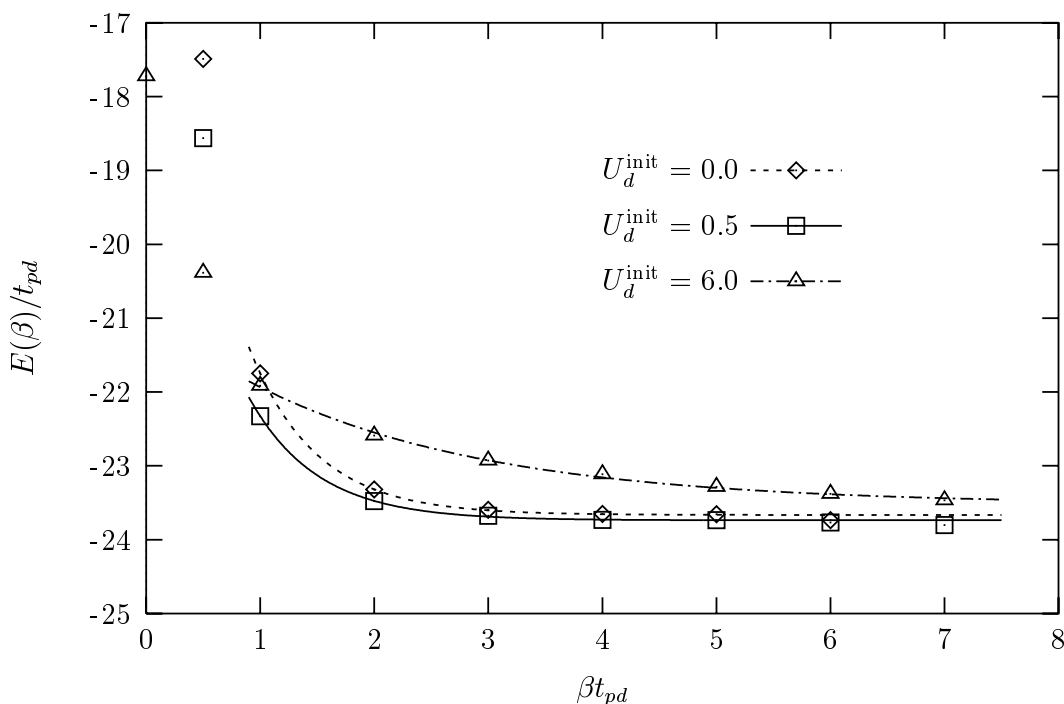


Abb. 2.3: Gesamtenergie $E(\beta)$ in Abhängigkeit vom Projektionsparameter β für $U_d/t_{pd} = 6$ und $\Delta/t_{pd} = 4$ in einem 6×6 -System bei einer Lochdotierung von $\langle n \rangle = 1.167$. Gezeigt ist das Ergebnis einer freien Testwellenfunktion ($U_d^{\text{init}}/t_{pd} = 0.0$), einer optimierten Testwellenfunktion ($U_d^{\text{init}}/t_{pd} = 0.5$) und einer Testwellenfunktion mit optimierter Geometrie, jedoch mit $U_d^{\text{init}}/t_{pd} = 6.0$.

selbstkonsistent bestimmt werden. Dabei ist der Wert von U^{init} nicht notwendigerweise identisch zu dem eigentlichen Wert von U der QMC-Simulation.

Entscheidend für die Qualität der Testwellenfunktion sind die Anfangswerte von $\langle n_{i\uparrow} \rangle$ und $\langle n_{i\downarrow} \rangle$, von denen die selbstkonsistente Iteration gestartet wird. Wird beispielsweise mit einer paramagnetischen Belegung $\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle \neq f(i)$ begonnen, so führt die selbstkonsistente Berechnung zu einer paramagnetischen Testwellenfunktion, die keine bessere Konvergenz zum Grundzustand aufweist als die wechselwirkungsfreie Lösung des Hamiltonoperators. Als Startkonfiguration wurde in dieser Arbeit eine homogene Verteilungen im Ladungsraum ($\langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle = \text{const.}$) gewählt. Die verschiedenen möglichen Anfangskonfigurationen im Spinraum sind in Abb. 2.2 dargestellt. Ausgehend von einer antiferromagnetischen Spinanordnung wird dabei jeder Spin auf der Geometrie eines Karos (Abb. 2.2(a)) bzw. eines Quadrates (Abb. 2.2(b)) zusätzlich gedreht. Führt eine derartige Konfiguration zu einer stabilen Lösung der UHF-Gleichungen, so ergibt

sich im allgemeinen eine „gute“ Testwellenfunktion.

Tabelle 2.1 zeigt für verschiedene Gittergrößen und Dotierungen die Anfangskonfigurationen im Spinraum, die zu einer optimierten Testwellenfunktion im Drei-Band-Hubbard-Modell führen. Die angegebenen Werte sind für den von G. Dopf bestimmten Parametersatz für den Hochtemperatur-Supraleiter $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($U_d/t_{pd} = 6$ und $\Delta/t_{pd} = 4$) getestet [23, 25]. In allen Fällen wurde innerhalb der UHF-Berechnung eine Wechselwirkung von $U_d^{\text{init}}/t_{pd} = 0.5$ verwendet, die zu einer besseren Konvergenz der Testwellenfunktion führt als $U_d^{\text{init}} = U_d$.

In Abb. 2.3 ist die Energie $E(\beta)$ in Abhängigkeit vom Projektionsparameter β für verschiedene Testwellenfunktionen dargestellt. Während bereits die wechselwirkungsfreie Testwellenfunktion deutlich schneller konvergiert als die Lösung der *unrestricted* Hartree-Fock-Gleichungen mit $U_d^{\text{init}}/t_{pd} = 6.0$, liefert die optimierte Testwellenfunktion mit $U_d^{\text{init}}/t_{pd} = 0.5$ das beste Ergebnis. Die Qualität der optimierten Wellenfunktion wird bei Betrachtung des mittleren Vorzeichens noch deutlicher (Abb. 2.4). Hier zeigt sich ein größeres Vorzeichen gegenüber der wechselwirkungsfreien Testwellenfunktion, so daß Simulationen bei höheren Werten von β durchgeführt werden können. Das mittlere Vorzeichen ist zwar für $U_d^{\text{init}}/t_{pd} = 6.0$ am vielversprechendsten, jedoch ist hier der Wert von β , der zum Erreichen von Konvergenz bei der Messung von Observablen (siehe z.B. Abb. 2.3) notwendig ist, aufgrund des Vorzeichenproblems nicht mehr simulierbar. Somit ist es nur durch das Verfahren der optimierten Testwellenfunktion möglich, jede Dotierung für einen relevanten Parametersatz im Drei-Band-Hubbard-Modell in Systemen mit bis zu 8×8 Einheitszellen zu berechnen.

2.3 Die analytische Fortsetzung

Zusätzlich zur Berechnung von statischen Observablen erlaubt die großkanonische QMC Methode die Berechnung von zeitabhängigen Greenschen Funktionen, die zur Bestimmung von dynamischen Größen notwendig sind. Nach der Durchführung der Hubbard-Stratonovich-Transformation liegt ein wechselwirkungsfreies System vor, und somit läßt sich der Operator $c_{i\sigma}(\tau_l)$ an der Zeitscheibe l mit Hilfe der oben definierten Matrizen $\mathbf{B}^{l\sigma}$ schreiben:

$$c_{i\sigma}(\tau_l) = e^{i\Delta\tau(\tilde{H}_l - \mu\hat{N})} c_{i\sigma}(\tau_{l-1}) e^{-i\Delta\tau(\tilde{H}_l - \mu\hat{N})} = \sum_{i'} (\mathbf{B}^{l\sigma})_{ii'} c_{i'\sigma}(\tau_{l-1}). \quad (2.71)$$

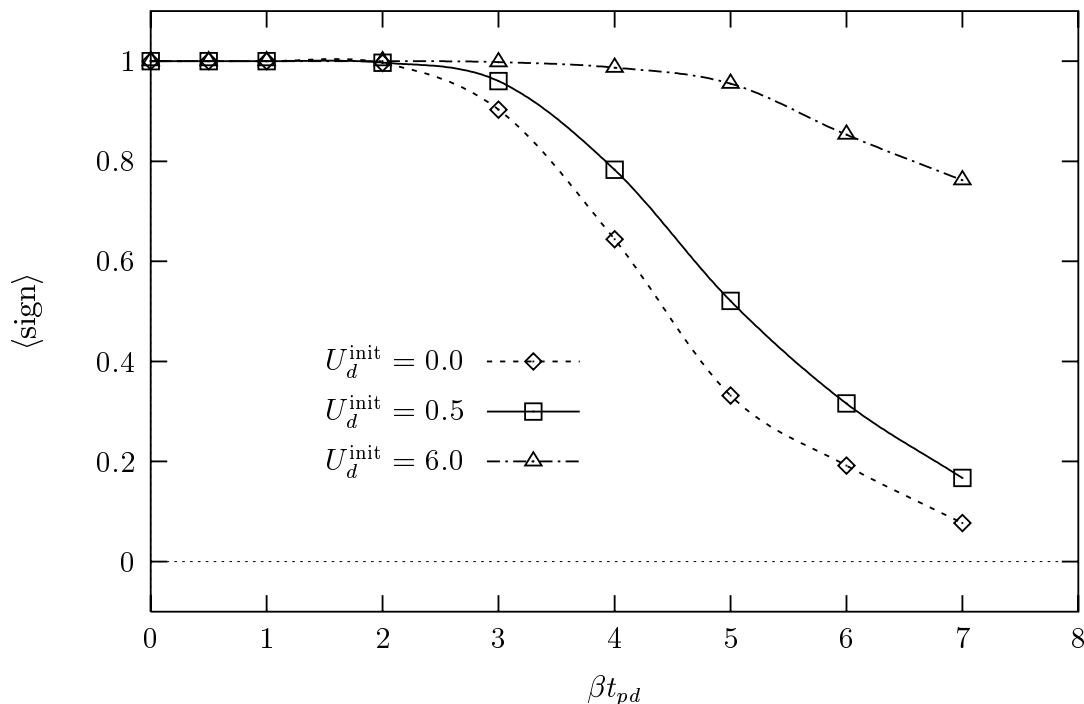


Abb. 2.4: Mittleres Vorzeichen in Abhängigkeit vom Projektionsparameter β für verschiedene Testwellenfunktionen. Die Parameterwerte sind identisch zu Abb. 2.3.

Hier ist \tilde{H}_l der wechselwirkungsfreie Hamiltonoperator am *Time-slice* l . Durch Einsetzen in die Definition der zeitabhängigen Greenschen Funktion folgt:

$$\langle c_{i\sigma}(\tau_l) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle = \sum_{i'} \left(\mathbf{B}^{l\sigma} \mathbf{B}^{(l-1)\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right)_{ii'} \langle c_{i'\sigma}(0) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle. \quad (2.72)$$

Zusammen mit Gl. 2.27 ergibt sich die zeitabhängige Greensche Funktion zu [48]

$$\langle c_{i\sigma}(\tau_l) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle = \left(\mathbf{B}^{l\sigma} \mathbf{B}^{(l-1)\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \left[\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \mathbf{B}^{(L-1)\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right]^{-1} \right)_{ij}. \quad (2.73)$$

Analog gilt:

$$\langle c_{i\sigma}^\dagger(\tau_l) c_{j\sigma}(0) \rangle = \left(\left[\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \mathbf{B}^{(L-1)\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right]^{-1} \mathbf{B}^{L\sigma} \mathbf{B}^{(L-2)\sigma} \dots \mathbf{B}^{(l+1)\sigma} \right)_{ji}. \quad (2.74)$$

Mit Hilfe dieser beiden Matsubara-Greenschen-Funktionen, der statischen Greenschen Funktion (Gl. 2.27) und des Wickschen Theorems können alle dynamischen Größen dargestellt und somit in imaginärer Zeit berechnet werden. Um mit dem Experiment vergleichen zu können, sind jedoch die spektralen Funktionen in Abhängigkeit von der reellen Frequenz ω notwendig. Diese lassen sich durch analytische Fortsetzung der QMC-Daten auf die reelle Frequenzachse mit Hilfe des Spektraltheorems berechnen.

Für die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$, die experimentell durch Photoemission bzw. inverse Photoemission gemessen werden kann, gilt beispielsweise (siehe [59–61]):

$$G_{\vec{k}\sigma}(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} A(\vec{k}, \omega) d\omega. \quad (2.75)$$

Hier ist $G_{\vec{k}\sigma}(\tau) = \langle c_{\vec{k}\sigma}(\tau) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger(0) \rangle$ die impulsabhängige Greensche Funktion, die sich durch Fourier-Transformation aus $\langle c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle$ (Gl. 2.73) bestimmen läßt. Gl. 2.75 ist formal eine Laplacetransformation, deren Invertierung aufgrund des exponentiellen Kerns $e^{-\tau\omega}/(1 + e^{-\beta\omega})$ numerisch äußerst schlecht konditioniert ist. Dies wird durch die endliche Zahl der Zeitscheiben bei einer QMC-Simulation und die dabei auftretenden statistischen Fehler noch weiter erschwert.

In dieser Arbeit wurde die Invertierung des Spektraltheorems mit Hilfe des Verfahrens der maximalen Entropie (MaxEnt) durchgeführt: Bei einer gegebenen Greenschen Funktion $G(\tau)$ für einen speziellen Wert von \vec{k} läßt sich die wahrscheinlichste spektrale Dichte $A(\omega_i)$ für diskrete Werte ω_i durch Maximierung von

$$P[A(\omega)/G(\tau)] \propto e^{\alpha S - \chi^2/2} \quad (2.76)$$

gewinnen [59, 60, 62, 63]. Hierbei ist χ^2 gegeben durch

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{\sum_i K_{li} A(\omega_i) - G(\tau)}{\sigma(\tau)} \right)^2, \quad (2.77)$$

mit dem diskretisierten Kernel

$$K_{li} = \frac{e^{-\tau\omega_i}}{1 + e^{-\beta\omega_i}} \Delta\omega \quad (2.78)$$

und den QMC-Fehlern $\sigma(\tau)$ der Greenschen Funktion. Die sog. Shannon-Jaynes-Entropie S ist ferner definiert durch

$$S = \sum_i \left(A(\omega_i) - m_i - A(\omega_i) \ln \frac{A(\omega_i)}{m_i} \right) \Delta\omega, \quad (2.79)$$

wobei m_i das Startmodell (*Default-Modell*) für die spektrale Dichte $A(\omega_i)$ ist. α ist schließlich ein statistischer Regularisierungsparameter. Begonnen wird mit einem großen Wert von α und somit mit dem Startmodell. Anschließend wird α schrittweise verkleinert, wodurch sich die Daten dem korrekten $A(\omega)$ nähern.

In der vorliegenden Arbeit wurde die Maximierung von Gl. 2.76 mit Hilfe eines von W. von der Linden und R. Preuss entwickelten und optimierten Programmes [60, 62] durchgeführt. Dieses erlaubt außerdem das Einbringen von zusätzlicher Information („Vorwissen“) über die berechnete Spektralfunktion. So fand zum einen die sog. Momentenmethode Verwendung, die dem MaxEnt-Code weitere Information über die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ zur Verfügung stellen kann [61]. Die Momente μ_m sind dabei folgendermaßen definiert:

$$\mu_m = \int_{-\infty}^{\infty} A(\vec{k}, \omega) \omega^m d\omega. \quad (2.80)$$

Die ersten drei Momente μ_0 , μ_1 und μ_2 können analytisch exakt berechnet werden. Im Fall des Ein-Band-Hubbard-Modells mit rein lokaler Wechselwirkung U gilt [61]:

$$\mu_0 = 1, \quad (2.81)$$

$$\mu_1 = \varepsilon(\vec{k}) - \mu + \frac{1}{2} U \langle n \rangle \quad \text{und} \quad (2.82)$$

$$\mu_2 = (\varepsilon(\vec{k}) - \mu)^2 + U(\varepsilon(\vec{k}) - \mu) \langle n \rangle + \frac{1}{2} U^2 \langle n \rangle, \quad (2.83)$$

wobei $\langle n \rangle$ die mittlere Teilchendichte, μ das chemische Potential und $\varepsilon(\vec{k})$ die wechselwirkungsfreie Bandstruktur ist.

Um zusätzlich der statistischen Abhängigkeit der rohen QMC-Daten auf verschiedenen Zeitscheiben Rechnung zu tragen, wurde zum zweiten die sogenannte Fehler-Kovarianzmatrix und deren Fehler im QMC-Algorithmus gemessen und im Maximum-Entropie-Code berücksichtigt [64].

Kapitel 3

Gekoppelte Hubbard-Ketten bei Halbfüllung

Im folgenden Kapitel sollen die dynamischen Eigenschaften von gekoppelten Hubbard-Ketten bei Halbfüllung mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Methoden untersucht und durch einfache physikalische Bilder erklärt werden. Dies sind zum einen die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$, die mit den experimentellen Daten der Photoemission und der inversen Photoemission verglichen werden kann, und zum anderen dynamische Suszeptibilitäten zur Berechnung der elementaren Spin- und Ladungsanregungen. Für kleine Werte von $t_{\perp} \lesssim t$ entsprechen die dynamischen Einteilchen- und Zweiteilchen-Spektren qualitativ dem Bild einer Spin-Dichte-Welle (siehe Abschnitt 3.1.2), während bei großen Werten von $t_{\perp} \gtrsim t$ eine lokale Singulett-Näherung in zum Teil quantitativer Übereinstimmung die Physik der Systeme beschreiben kann (siehe Abschnitt 3.1.3).

3.1 Die Einteilchen-Spektraldichte

3.1.1 Ergebnisse der QMC-Rechnung

Die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ bei Halbfüllung wurde für drei verschiedene Werte von t_{\perp} ($t_{\perp}/t = 0.5$, $t_{\perp}/t = 1.0$ und $t_{\perp}/t = 2.0$) mit Hilfe des QMC-Verfahrens und der Methode der maximalen Entropie berechnet. Die Ergebnisse für ein 2×16 -System mit $U/t = 8$ und $\beta t = 10$ sind für alle Werte von $\vec{k} = (k, k_{\perp})$ in Abb. 3.1 ($t_{\perp}/t = 0.5$),

in Abb. 3.2 ($t_{\perp}/t = 1.0$) und in Abb. 3.3 ($t_{\perp}/t = 2.0$) dargestellt. Dabei entspricht der isotrope Fall $t_{\perp} = t$ der physikalisch relevanten Kopplung ($J_{\perp} \approx J$) in den experimentell realisierbaren Verbindungen wie z.B. $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ oder $\text{LaCuO}_{2.5}$. Teil (a) und (b) der Abbildungen sind jeweils dreidimensionale Darstellungen in der ω - k Ebene für $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \pi$. Teil (c) zeigt für den $k_{\perp} = 0$ Kanal die Bandstruktur $\omega(k)$, wobei die schattierten Flächen die Verteilung des spektralen Gewichtes wiedergeben. Die Maxima der Gewichtsverteilung sind zusätzlich durch Karos (\diamond) mit Fehlerbalken gekennzeichnet. Ferner gibt die durchgezogene Linie die Dispersion in der SDW-Näherung (siehe Abschnitt 3.1.2) an. Durch die beiden gestrichelten Linien in Abb. 3.3 ist außerdem die Bandstruktur in der lokalen Singulett-Näherung (LRA1 und LRA2, siehe Abschnitt 3.1.3) dargestellt.

In allen drei Abbildungen läßt sich bis auf statistische Fehler die Teilchen-Loch-Symmetrie erkennen: Die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ für $k_{\perp} = \pi$ kann durch Spiegelung von k an $\pi/2$ ($k \rightarrow \pi - k$) und ω an 0 ($\omega \rightarrow -\omega$) aus dem Ergebnis für $k_{\perp} = 0$ abgeleitet werden, d.h. $A(k, \pi, \omega) = A(\pi - k, 0, -\omega)$. Da diese Symmetrie nicht im Maximum-Entropy-Verfahren erzwungen wird, ist sie nicht exakt in den Daten zu erkennen und gibt somit Aufschluß über die Genauigkeit der analytischen Fortsetzung.

Im Fall $t_{\perp}/t = 2.0$ (Abb. 3.3) ist im $k_{\perp} = 0$ -Kanal das gesamte spektrale Gewicht fast vollständig in einem kohärenten Band der Breite $\approx 3t$ im Photoemissionsbereich ($\omega < 0$) des Spektrums konzentriert, während im inversen Photoemissionsbereich ($\omega > 0$) nahezu kein spektrales Gewicht vorhanden ist. Dies ist (aufgrund der Teilchen-Loch-Symmetrie) im $k_{\perp} = \pi$ -Kanal umgekehrt, so daß von einem Zwei-Band-Isolator gesprochen werden kann. Die Bänder sind jeweils $\approx 2t$ von der Fermikante entfernt, und somit ist eine Energielücke von etwa $4t$ vorhanden. Im Gegensatz dazu ist das spektrale Gewicht für $t_{\perp}/t = 1.0$ (Abb. 3.2) als auch für $t_{\perp}/t = 0.5$ (Abb. 3.1) auf vier Bänder verteilt, und zwar in beiden k_{\perp} -Kanälen auf jeweils ein Band im Photoemissions- ($\omega < 0$) und inversen Photoemissionsbereich ($\omega > 0$). Das System kann somit als Vier-Band-Isolator bezeichnet werden. Für $t_{\perp}/t = 0.5$ (Abb. 3.1) ist für beide Werte von k_{\perp} das spektrale Gewicht zwischen $k = 0$ und $k = \pi/2$ im Photoemissionsbereich und zwischen $k = \pi/2$ und $k = \pi$ im inversen Photoemissionsbereich konzentriert. Im isotropen Fall ($t_{\perp}/t = 1.0$, Abb. 3.2) wird ein Teil dieses spektralen Gewichtes für $k_{\perp} = 0$ zum Photoemissionsbereich und für $k_{\perp} = \pi$ zum inversen Photoemissionsbereich transferiert.

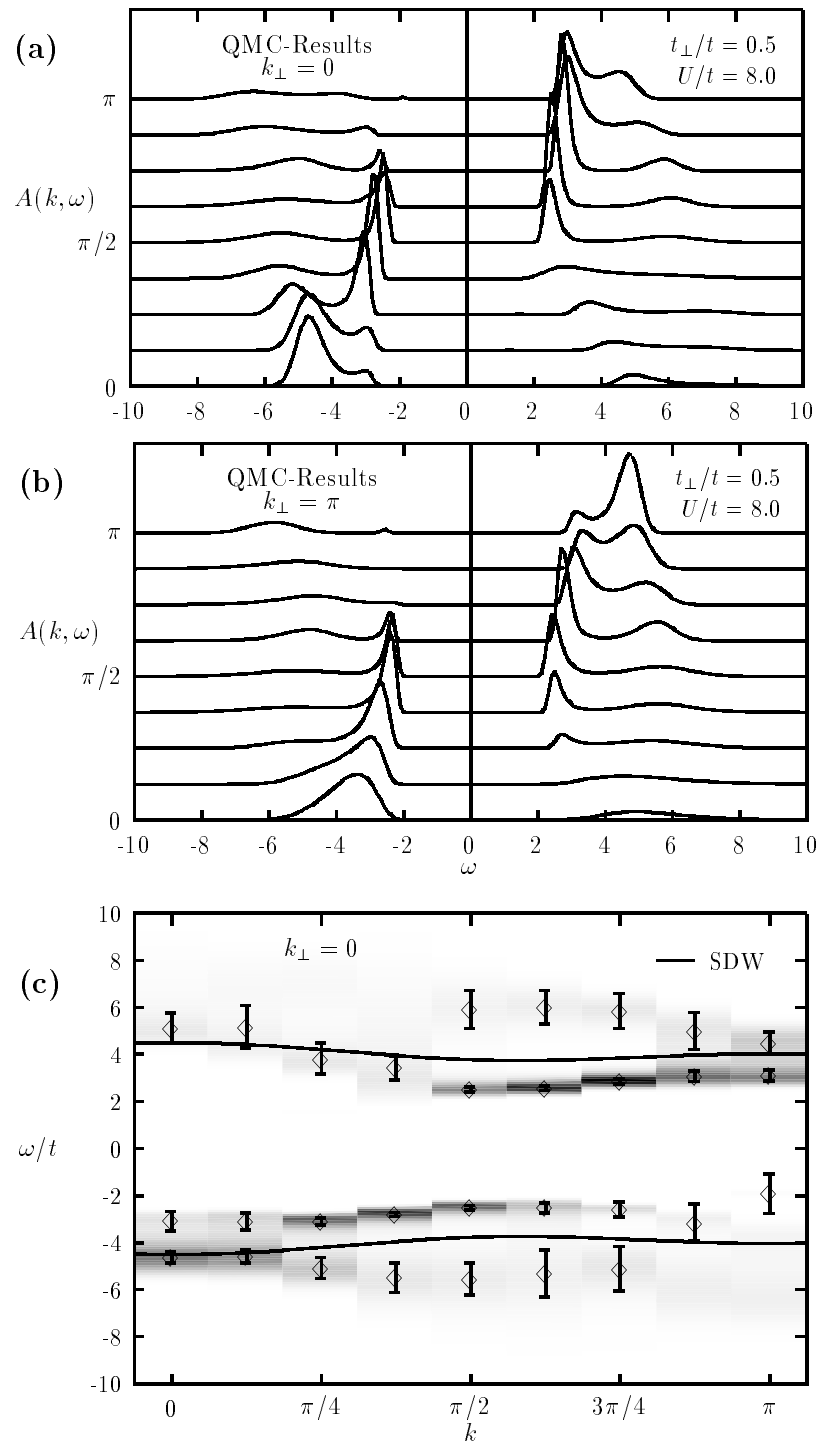


Abb. 3.1: QMC-Berechnung der spektralen Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ für alle Werte von $\vec{k} = (k, k_{\perp})$ mit $t_{\perp}/t = 0.5$, $U/t = 8$ und $\beta t = 10$ in einem 2×16 -System.

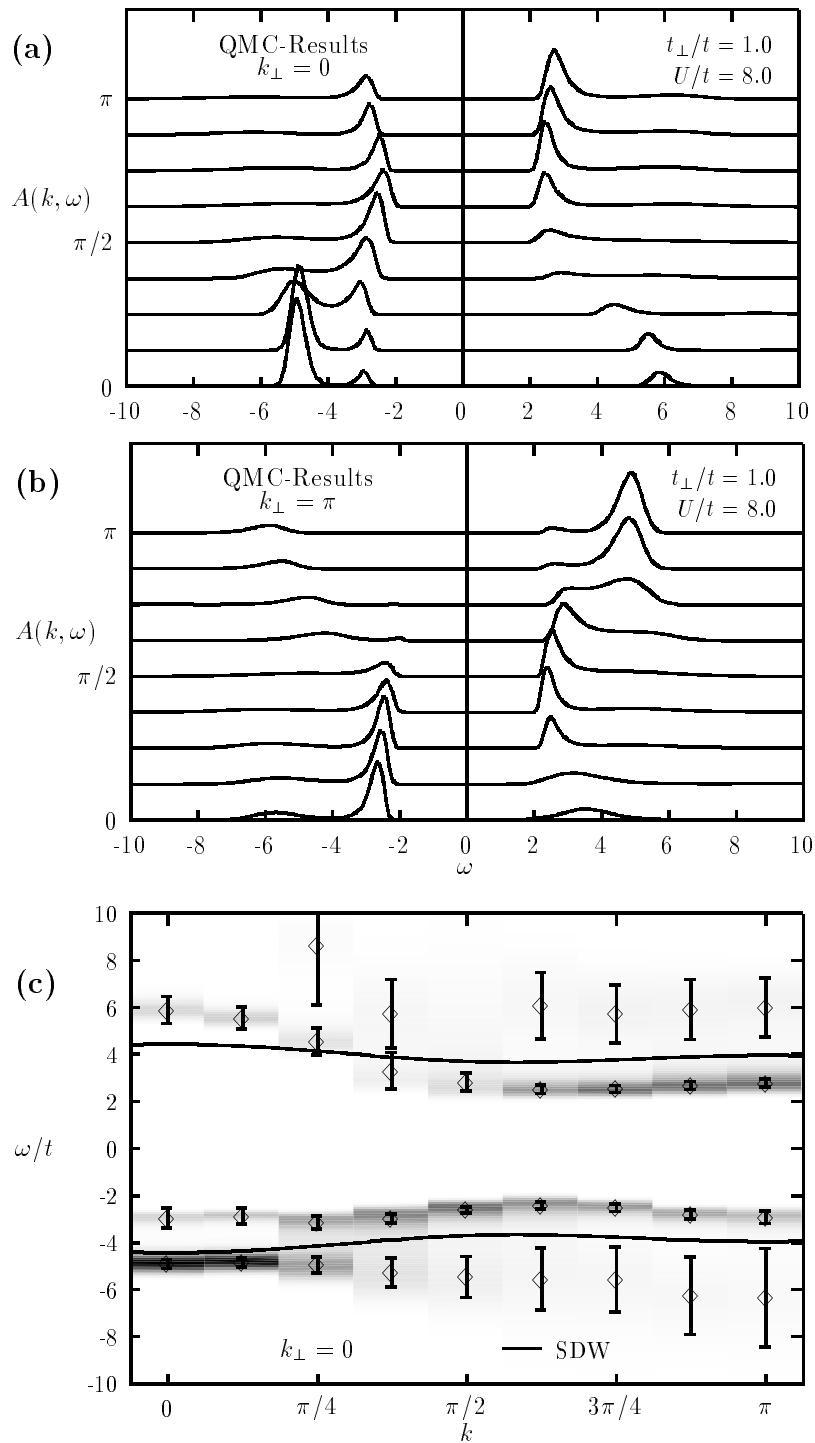


Abb. 3.2: QMC-Berechnung der spektralen Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ für alle Werte von $\vec{k} = (k, k_{\perp})$ mit $t_{\perp}/t = 1.0$, $U/t = 8$ und $\beta t = 10$ in einem 2×16 -System.

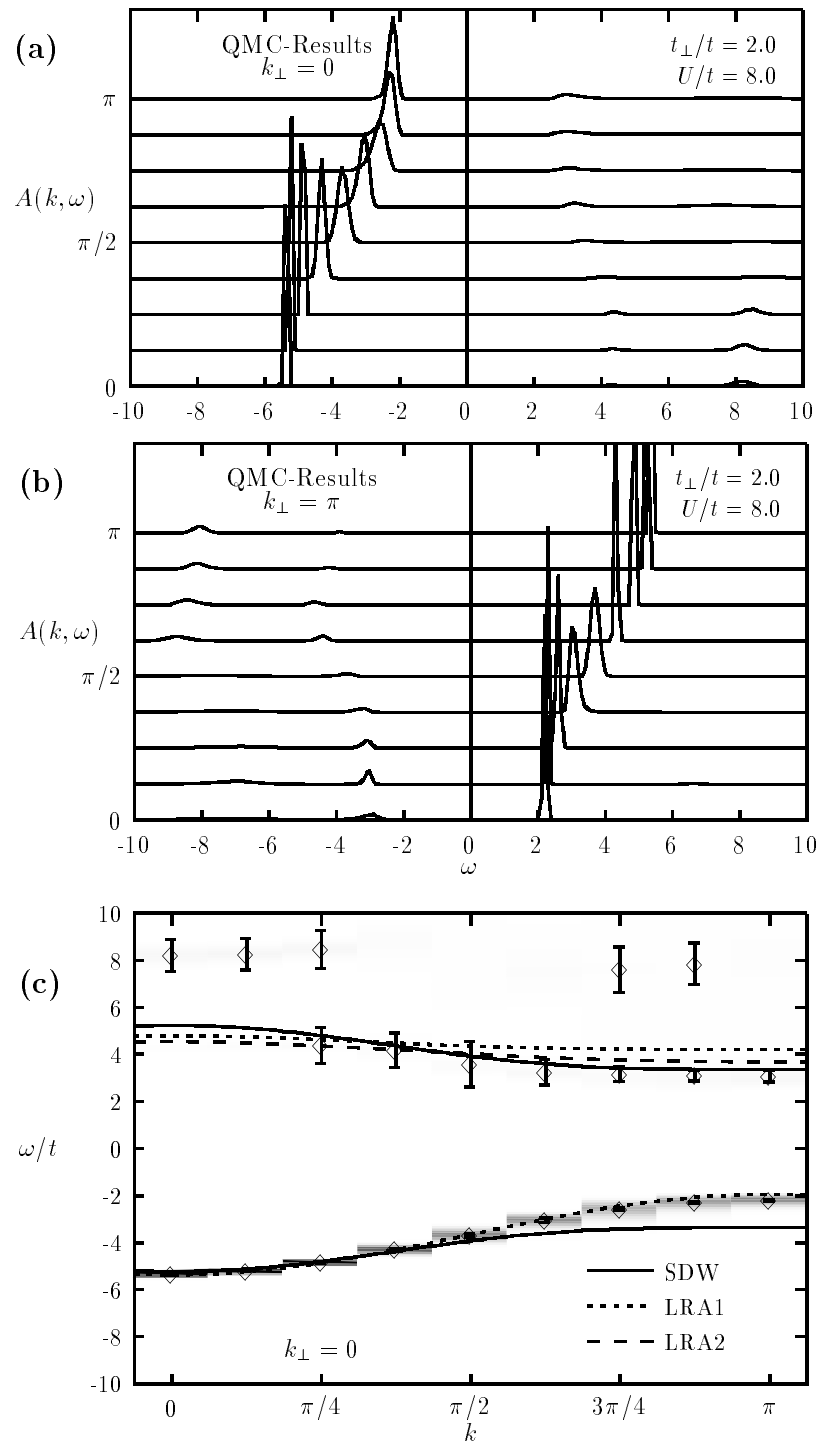


Abb. 3.3: QMC-Berechnung der spektralen Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ für alle Werte von $\vec{k} = (k, k_{\perp})$ mit $t_{\perp}/t = 2.0$, $U/t = 8$ und $\beta t = 10$ in einem 2×16 -System.

Die Maxima der Photoemissionsbänder, d.h. der k -Wert, an dem die minimale Ladungslücke auftritt, liegt für $t_{\perp}/t = 2.0$ bei $k^* = \pi$, für $t_{\perp}/t = 1.0$ bei $k^* \approx 0.7\pi$ und für $t_{\perp}/t = 0.5$ bei $k^* = \pi/2$. Somit würde man im Experiment erwarten, ein Maximum im Photoemissionsband bei $k^* \approx 0.7\pi$ zu sehen.

Im Fall $t_{\perp}/t = 0.5$, sowie im isotropen Fall $t_{\perp}/t = 1.0$, lassen sich zwei zusätzliche Eigenschaften erkennen, die bereits mit Hilfe der hochauflösenden Maximum-Entropie-Technik in einer [60, 62] und zwei [60, 65] Dimensionen beobachtet wurden. Zum einen zeigt $A(\vec{k}, \omega)$ sowohl im besetzten als auch im unbesetzten Teil des Spektrums einen nahezu dispersionslosen „inkohärenten Hintergrund“, der sich über eine Breite von mehreren t erstreckt. Zum zweiten ist bei niedrigen Energien ein schmales Band, dessen Breite von der Größenordnung der effektiven Austauschwechselwirkung $J = 4t^2/U$ ist, zu erkennen. Letzteres Band konnte in früheren Ein- und Zweidimensionalen-QMC-Simulationen nicht einzeln aufgelöst werden [66–68]. Für größere Werte von U ($U/t \approx 12$) ist dieses kohärente Band klar vom höherenergetischen Hintergrund getrennt [65].

In den folgenden Abschnitten wird gezeigt, wie sowohl die Dispersion als auch die Verteilung des spektralen Gewichtes der kohärenten Anteile von einfachen Bilder ausgehend verstanden werden können. Dies ist zum einen die Spin-Dichte-Welle-Näherung (Abschnitt 3.1.2) für kleine Werte von t_{\perp} und zum anderen die lokale Singulett Näherung (Abschnitt 3.1.3) für große Werte von t_{\perp} .

3.1.2 Schwache Kopplung: Die Spin-Dichte-Welle-Näherung

Eine entscheidende Größe, die die unterschiedlichen Kopplungsbereiche charakterisiert, ist der magnetische Strukturfaktor:

$$S(r) = (-1)^r \langle S_{0,\lambda}^z S_{r,\lambda}^z \rangle \quad (3.1)$$

mit $S_{r,\lambda}^z = (n_{r,\lambda,\uparrow} - n_{r,\lambda,\downarrow})$. Diese Größe gibt die Reichweite der antiferromagnetischen Ordnung der Spins zwischen den Sprossen an. In Abb. 3.4 ist $S(r)$ für eine lokale Coulomb-Wechselwirkung von $U/t = 8$ für verschiedene Werte von t_{\perp} aufgetragen. Die Daten wurden mit dem Verfahren der Dichte-Matrix-Renormierungsgruppe (DMRG) für offene Randbedingungen in Richtung der Ketten von R. Noack erzeugt [69]. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktion zeigt exponentielles Verhalten $A \exp(-r/\xi)$, wobei sich die Korrelationslänge ξ für $t_{\perp}/t = 2.0$ zu $\xi = 0.83$, für $t_{\perp}/t = 1.0$ zu $\xi = 4.3$ und für

$t_{\perp}/t = 0.5$ zu $\xi = 9.5$ bestimmen läßt. Deutlich ist die Abhängigkeit der Spin-Spin-Korrelationsfunktion von der Kopplungsstärke zu erkennen. Bei schwacher Kopplung $t_{\perp} \lesssim t$ überwiegt das Hüpfmatrixelement t zwischen den einzelnen Sprossen und führt somit zu einer starken, längerreichweitigen antiferromagnetischen Ordnung innerhalb der Ketten. Mit wachsenden Werten von t_{\perp} nimmt diese antiferromagnetische Ordnung ab und die Spins zwischen den Sprossen verhalten sich zunehmend unkorreliert. Der Limes schwacher Kopplung t_{\perp} sollte sich somit durch eine Spin-Dichte-Welle (SDW) approximativ beschreiben lassen, bei der von einer antiferromagnetischen Ordnung der Spins ausgegangen wird. Bei starker Kopplung bricht dieses SDW-Bild zusammen und das System läßt sich mit Hilfe einer lokalen Näherung (siehe Abschnitt 3.1.3) verstehen.

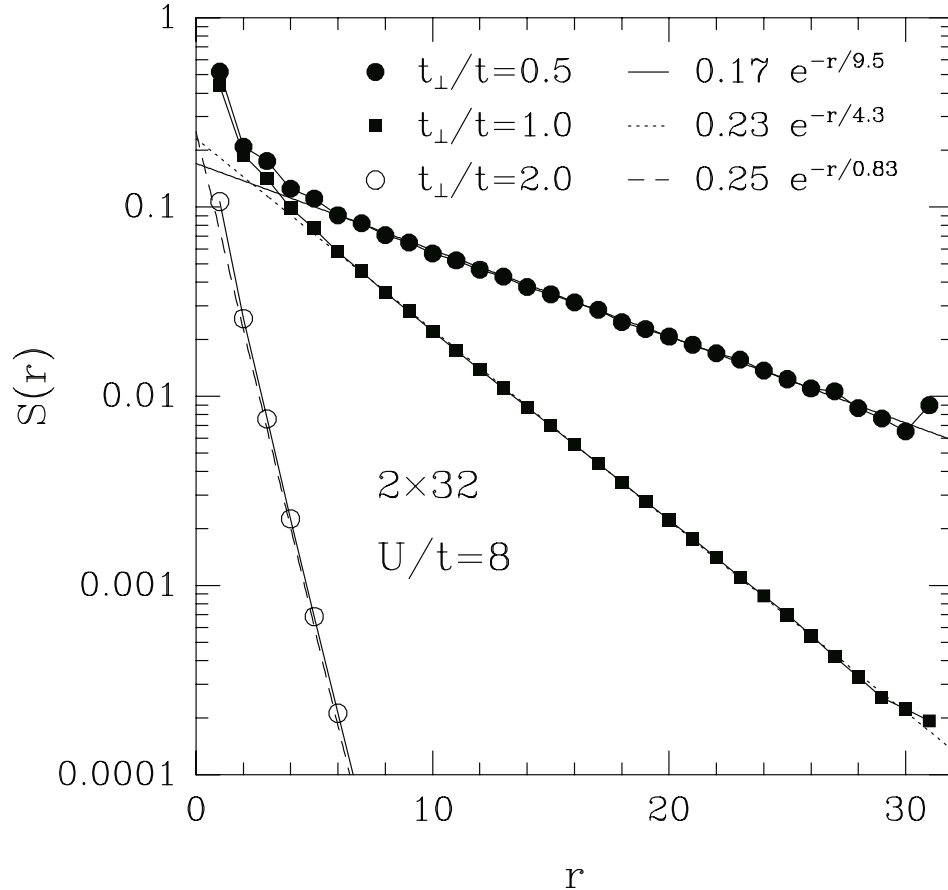


Abb. 3.4: Spin-Spin-Korrelationsfunktion $S(r)$ für $U/t = 8$ in einem 2×32 -System bei verschiedenen Werten von t_{\perp} .

Im folgenden sollen die theoretischen Grundlagen der SDW-Näherung behandelt werden. Zugrunde gelegt wird eine antiferromagnetische Spin-Anordnung [70, 71],

$$(-1)^i \langle S_z^i \rangle = \frac{1}{2} (-1)^i \langle n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} \rangle = S, \quad (3.2)$$

wobei für zwei gekoppelte Ketten $(-1)^i$ durch $(-1)^{i+\lambda}$ zu ersetzen ist. Somit ist S die Größe des antiferromagnetischen Ordnungsparameters. Um den Hamiltonoperator mit dieser Annahme lösen zu können, müssen zusätzlich Dichtefluktuationen vernachlässigt werden:

$$(n_{i\uparrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle)(n_{i\downarrow} - \langle n_{i\downarrow} \rangle) \approx 0. \quad (3.3)$$

Das Einsetzen dieser Approximation in Gl. 1.1 ergibt zusammen mit Gl. 3.2 den wechselwirkungsfreien Hamiltonoperator der antiferromagnetischen Hartree-Fock-Näherung (AFHF):

$$H_{AFHF} = - \sum_{ij,\sigma} (t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow} + \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \quad (3.4)$$

Durch Transformation in den \vec{k} -Raum ($c_{\vec{k}\sigma} = \sum_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} c_{i\sigma} / \sqrt{N}$) folgt bei Halbfüllung ($\langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle = 1$):

$$\sum_i \langle n_{i\downarrow} \rangle n_{i\uparrow} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} - S c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{Q}\uparrow}, \quad (3.5)$$

$$\sum_i \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} + S c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{Q}\downarrow}, \quad (3.6)$$

$$\sum_i \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle = N \left(\frac{1}{4} - S^2 \right), \quad (3.7)$$

wobei \vec{Q} für den antiferromagnetischen *Nesting*-Vektor steht (in zwei Dimensionen sowie im Fall gekoppelter Ketten ist $\vec{Q} = (\pi, \pi)$). Der Hartree-Fock-Hamiltonoperator läßt sich im \vec{k} -Raum somit schreiben als

$$H_{AFHF} = \sum_{\vec{k}\sigma}' \begin{pmatrix} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger & c_{\vec{k}+\vec{Q}\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon(\vec{k}) & -\sigma U S \\ -\sigma U S & \varepsilon(\vec{k} + \vec{Q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}\sigma} \\ c_{\vec{k}+\vec{Q}\sigma} \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

wobei $\varepsilon(\vec{k}) = -2t \cos(k) - 2t_\perp \cos(k_\perp)$ die wechselwirkungsfreie Bandstruktur ist. Die Summe $\sum_{\vec{k}\sigma}'$ läuft hierbei nur über die magnetische Brillouin-Zone, die entsprechend Abb. 3.5 festgelegt ist. Innerhalb dieser Zone läßt sich der Hamiltonoperator H_{AFHF} mit Hilfe der unitären Transformation

$$\alpha_{\vec{k}\sigma} = u_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma} + \sigma v_{\vec{k}} c_{\vec{k}+\vec{Q}\sigma}, \quad (3.9)$$

$$\beta_{\vec{k}\sigma} = v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma} - \sigma u_{\vec{k}} c_{\vec{k}+\vec{Q}\sigma}, \quad (3.10)$$

schließlich diagonalisieren:

$$H_{AFHF} = \sum'_{\vec{k}\sigma} E_{\vec{k}} \left(\alpha_{\vec{k}\sigma}^\dagger \alpha_{\vec{k}\sigma} - \beta_{\vec{k}\sigma}^\dagger \beta_{\vec{k}\sigma} \right). \quad (3.11)$$

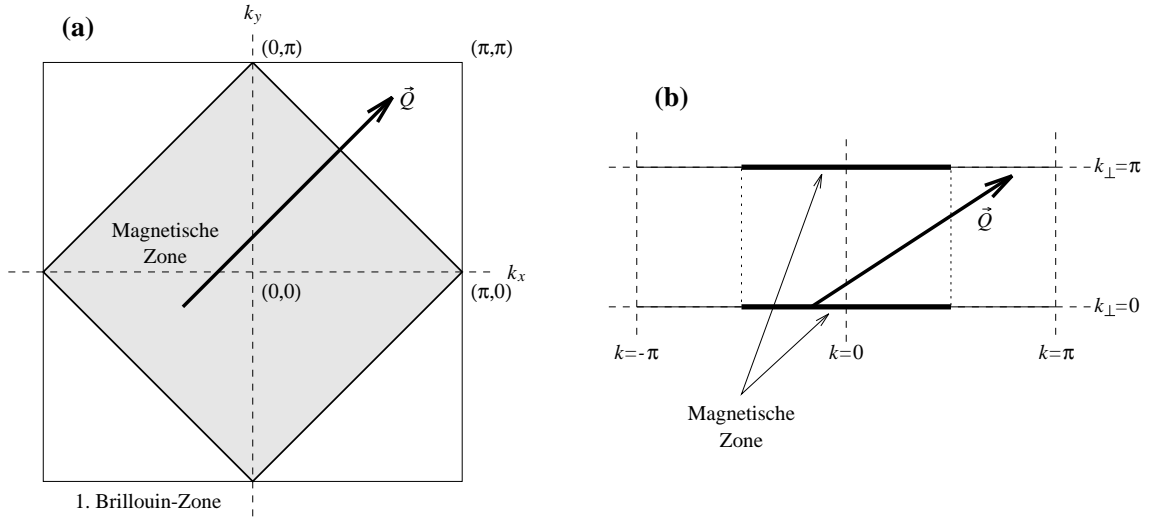


Abb. 3.5: Magnetische Brillouin-Zone für ein zweidimensionales quadratisches Gitter (a) und für zwei gekoppelte Ketten (b) im Vergleich mit der gewöhnlichen ersten Brillouin-Zone.

Die Amplituden dieser Transformation sind

$$u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \varepsilon(\vec{k})/E_{\vec{k}} \right)} \quad \text{und} \quad (3.12)$$

$$v_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \varepsilon(\vec{k})/E_{\vec{k}} \right)} \quad (3.13)$$

mit der Energiedispersion $E_{\vec{k}} = \sqrt{\varepsilon(\vec{k})^2 + \Delta^2}$ und dem SDW-Gap $\Delta = US$. Das ursprüngliche Band $\varepsilon(\vec{k})$ innerhalb der ersten Brillouin-Zone wurde innerhalb dieser antiferromagnetischen Näherung auf zwei Bänder $E_{\vec{k}}$ und $-E_{\vec{k}}$ in der magnetischen Brillouin-Zone abgebildet. Im halbgefüllten Fall ist im Grundzustand $|\Omega\rangle$ das untere Band $-E_{\vec{k}}$ (Valenzband) vollständig besetzt, d.h.

$$|\Omega\rangle = \prod'_{\vec{k}\sigma} \beta_{\vec{k}\sigma}^\dagger |vac\rangle. \quad (3.14)$$

Mit Hilfe dieses Zustandes und Gl. 3.2 läßt sich nun das SDW-Gap Δ selbstkonsistent bestimmen [70]. Es folgt:

$$\Delta = \frac{U}{N} \sum'_{\vec{k}} \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon(\vec{k})^2 + \Delta^2}}. \quad (3.15)$$

(SDW-Gapgleichung)

Für große Werte von $U \gg t, t_\perp$ ist $\Delta \approx U/2$, d.h. die Energielücke im Einteilchen-Spektrum beträgt erwartungsgemäß $\approx U$. In Abb. 3.6 ist das SDW-Gap Δ für verschiedene Werte von U in Abhängigkeit der Kopplungsstärke t_\perp zwischen zwei Hubbard-Ketten aufgetragen. Bereits in dieser Näherung läßt sich ein Übergang zwischen einem Band-Isolator und einem Mott-Hubbard-Isolator erkennen: Ohne Wechselwirkung ($U = 0$) beschreibt das System bei kleinen Werten von t_\perp einen Leiter und bei großen Werten $t_\perp/t > 2$ einen Zwei-Band-Isolator. Im letzten Fall sind das bindende und antibindende Band energetisch voneinander getrennt, so daß bei Halbfüllung das bindende ($k_\perp = 0$) Band vollständig besetzt und das antibindende ($k_\perp = \pi$) Band vollständig leer ist. Durch das Einschalten von U öffnet sich im Rahmen der SDW-Näherung für kleine t_\perp ein Hubbard-Gap, welches für große Werte von U proportional zur Wechselwirkung U ist. Insgesamt liegen im Fall $t_\perp/t \lesssim 2$ also vier Bänder ($\pm E_{k, k_\perp=0}$ und $\pm E_{k, k_\perp=\pi}$) vor. Bei großen t_\perp verschwindet das SDW-Gap (siehe Abb. 3.6) und die Bandstruktur wird dem wechselwirkungsfreien Fall identisch. Somit ist das System bei eingeschalteter Wechselwirkung U für alle Werte von t_\perp isolierend, jedoch tritt bei $t_\perp/t \approx 2$ (abhängig von U) ein Übergang von einem Vier-Band-Isolator zu einem Zwei-Band-Isolator auf.

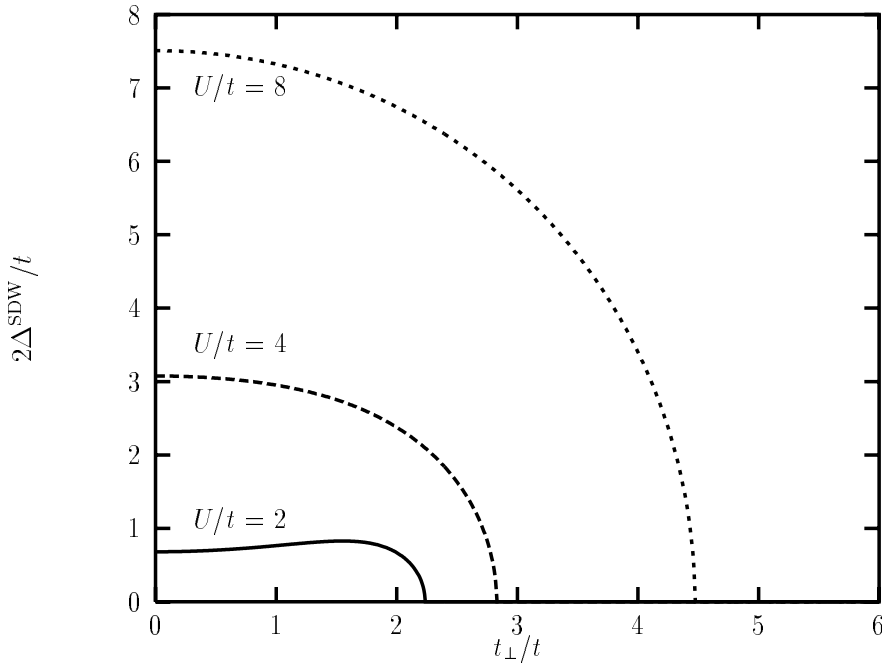


Abb. 3.6: Spin-Dichte-Welle-Energielücke 2Δ , berechnet durch die antiferromagnetische Hartree-Fock-Näherung auf einem 2×100 -Gitter für verschiedene Werte von U in Abhängigkeit von t_\perp .

Im folgenden soll die spektrale Dichte für diesen AFHF-Grundzustand abgeleitet werden. Für $T = 0$ ist die spektrale Dichte allgemein als

$$A(\vec{k}, \omega) = \Theta(\omega)A^>(\vec{k}, \omega) + \Theta(-\omega)A^<(\vec{k}, \omega), \quad (3.16)$$

mit

$$\begin{aligned} A^>(\vec{k}, \omega) &= \sum_l |\langle \Omega | c_{\vec{k}, \uparrow} | l \rangle|^2 \cdot \delta(\omega - (\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_0)) \quad \text{und} \\ A^<(\vec{k}, \omega) &= \sum_l |\langle l | c_{\vec{k}, \uparrow} | \Omega \rangle|^2 \cdot \delta(\omega - (\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_l)). \end{aligned}$$

gegeben. Die Summe \sum_l läuft dabei über alle Eigenzustände $|l\rangle$ des Hamiltonoperators (Gl. 3.11) mit den entsprechenden Eigenenergien \mathcal{E}_l . Durch Auflösen von Gl. 3.9 und Gl. 3.10 nach $c_{\vec{k}\sigma}$ und Einsetzen in die Definition der spektralen Dichte folgt:

$$\begin{aligned} A^>(\vec{k}, \omega) &= \sum_l \langle \Omega | u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}\uparrow} + v_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}\uparrow} | l \rangle \langle l | u_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger + v_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}\uparrow}^\dagger | \Omega \rangle \cdot \delta(\omega - (\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_0)) \\ &= \sum_l u_{\vec{k}}^2 |\langle \Omega | \alpha_{\vec{k}\uparrow} | l \rangle|^2 \cdot \delta(\omega - (\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_0)). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Der einzige Eigenzustand $|l\rangle$ von \bar{H}_{AFHF} , der nach Vernichten eines Teilchens $\alpha_{\vec{k}\uparrow}$ eine endliche Überlappung mit dem Grundzustand $|\Omega\rangle$ besitzt, ist $|\tilde{l}\rangle = \alpha_{\vec{k}\uparrow}^\dagger |\Omega\rangle$. Hierfür ist $\langle \Omega | \alpha_{\vec{k}\uparrow} | \tilde{l} \rangle = 1$ und $\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_0 = E_{\vec{k}}$, d.h.

$$A^>(\vec{k}, \omega) = u_{\vec{k}}^2 \cdot \delta(\omega - E_{\vec{k}}). \quad (3.18)$$

Analog folgt

$$A^<(\vec{k}, \omega) = v_{\vec{k}}^2 \cdot \delta(\omega + E_{\vec{k}}), \quad (3.19)$$

und somit

$$\boxed{A(\vec{k}, \omega) = u_{\vec{k}}^2 \cdot \delta(\omega - E_{\vec{k}}) + v_{\vec{k}}^2 \cdot \delta(\omega + E_{\vec{k}})}. \quad (3.20)$$

(Spektrale Dichte im AFHF-Grundzustand)

Die Verteilung des spektralen Gewichtes innerhalb der AFHF-Näherung ist schematisch in Abb. 3.7 für verschiedene Werte von t_\perp dargestellt. Für kleine t_\perp verteilt sich das Gewicht in beiden k_\perp -Kanälen auf beide Bänder $\pm E_{\vec{k}}$ (Vier-Band-Isolator), während bei großen Werten von $t_\perp \gtrsim t$ das gesamte Gewicht analog zum wechselwirkungsfreien Fall verläuft (Zwei-Band-Isolator).

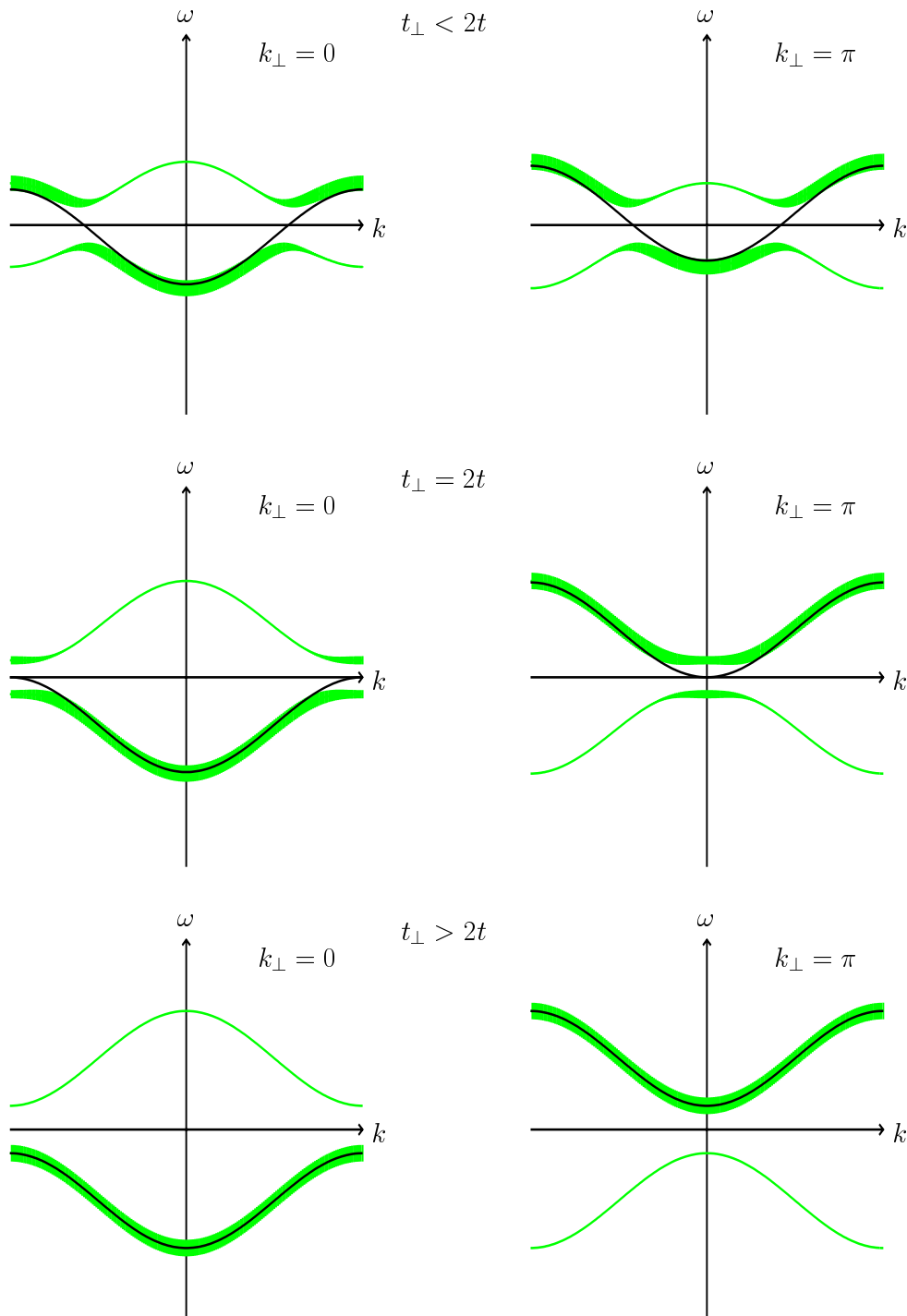


Abb. 3.7: AFHF-Bandstruktur für verschiedene Werte von t_{\perp} . Die Breite der einzelnen Bänder veranschaulicht die Verteilung des spektralen Gewichtes entsprechend Gl. 3.20. Die wechselwirkungsfreie Dispersion ($U = 0$) ist zusätzlich durch die durchgezogene dünne Kurve gekennzeichnet.

Um das Ergebnis der SDW-Näherung mit den exakten QMC-Daten vergleichen zu können, ist die SDW-Bandstruktur jeweils als durchgezogene Linie in den Abbildungen 3.1-3.3 eingezeichnet. Aufgrund der vernachlässigten Fluktuationen (siehe Gl. 3.3) wird dabei in allen drei Fällen die Energielücke deutlich zu groß wiedergegeben. Die Bandstruktur ist näherungsweise identisch mit der QMC-Bandstruktur, jedoch ist die Bandbreite im Fall $t_{\perp}/t = 2.0$ (Abb. 3.3) um den Faktor ≈ 2 zu klein, während für kleine t_{\perp} (siehe Abb. 3.1) die Bandbreite annähernd korrekt wiedergegeben wird. Die Maxima der Photoemissionsbänder im $k_{\perp} = 0$ -Kanal liegen innerhalb der SDW-Näherung für $t_{\perp} \leq 2t$ bei $\cos k^* = -t_{\perp}/2t$, d.h. für $t_{\perp}/t = 0.5$ bei $k^* \approx 0.58\pi$, für $t_{\perp}/t = 1.0$ bei $k^* = 2\pi/3$ und für $t_{\perp}/t = 2.0$ bei $k^* = \pi$. Diese stimmen jeweils mit den QMC-Daten überein (siehe Abbildungen 3.1-3.3). Eine zusätzliche Berechnung der Bandstruktur mit Hilfe der *Slave-Boson-Mean-Field-Methode* [72, 73] für $t_{\perp}/t = 0.5$ ergab eine um etwa 15% verkleinerte Energielücke und eine um 3% reduzierte Bandbreite, aber ansonsten keine qualitative Änderung gegenüber der AFHF-Rechnung.

Interessant ist der Vergleich der Verteilung des spektralen Gewichtes nach Gl. 3.20 mit dem QMC-Ergebnis. Abb. 3.8 zeigt das spektrale Gewicht innerhalb der AFHF-Näherung für $t_{\perp}/t = 2.0$ (Teil (a)) und $t_{\perp}/t = 0.5$ (Teil (b)) in einer dreidimensionalen Darstellung für $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \pi$. Das spektrale Gewicht ist für beide Werte von t_{\perp} etwa gleichverteilt zwischen dem Photoemissionsband und dem inversen Photoemissionsband, sowohl für $k_{\perp} = 0$ als auch für $k_{\perp} = \pi$. Diese Verteilung stimmt für $t_{\perp}/t = 0.5$ (und auch für den nichtgezeigten, isotropen Fall $t_{\perp}/t = 1.0$) gut mit den QMC-Daten überein, während die Verteilung des spektralen Gewichtes für $t_{\perp}/t = 2.0$ durch die AFHF-Näherung völlig falsch wiedergegeben wird: Sowohl für $k_{\perp} = 0$ im oberen Band ($\omega > 0$) als auch für $k_{\perp} = \pi$ im unteren Band ($\omega < 0$) liefert die SDW-Berechnung zuviel spektrales Gewicht, d.h. es wird ein Vier-Band-Isolator beschrieben, während die exakten QMC-Daten einen Zwei-Band-Isolator zeigen.

Zusammenfassend bedeutet dies, daß die AFHF-Näherung in der Lage ist, für kleine und mittlere Werte von t_{\perp} die Photoemissions- und inversen Photoemissionsdaten für gekoppelte Hubbard-Ketten bei Halbfüllung qualitativ zu beschreiben, während für große Werte von t_{\perp} vor allem im Hinblick auf die Verteilung des spektralen Gewichtes ein falsches Bild erzeugt wird.

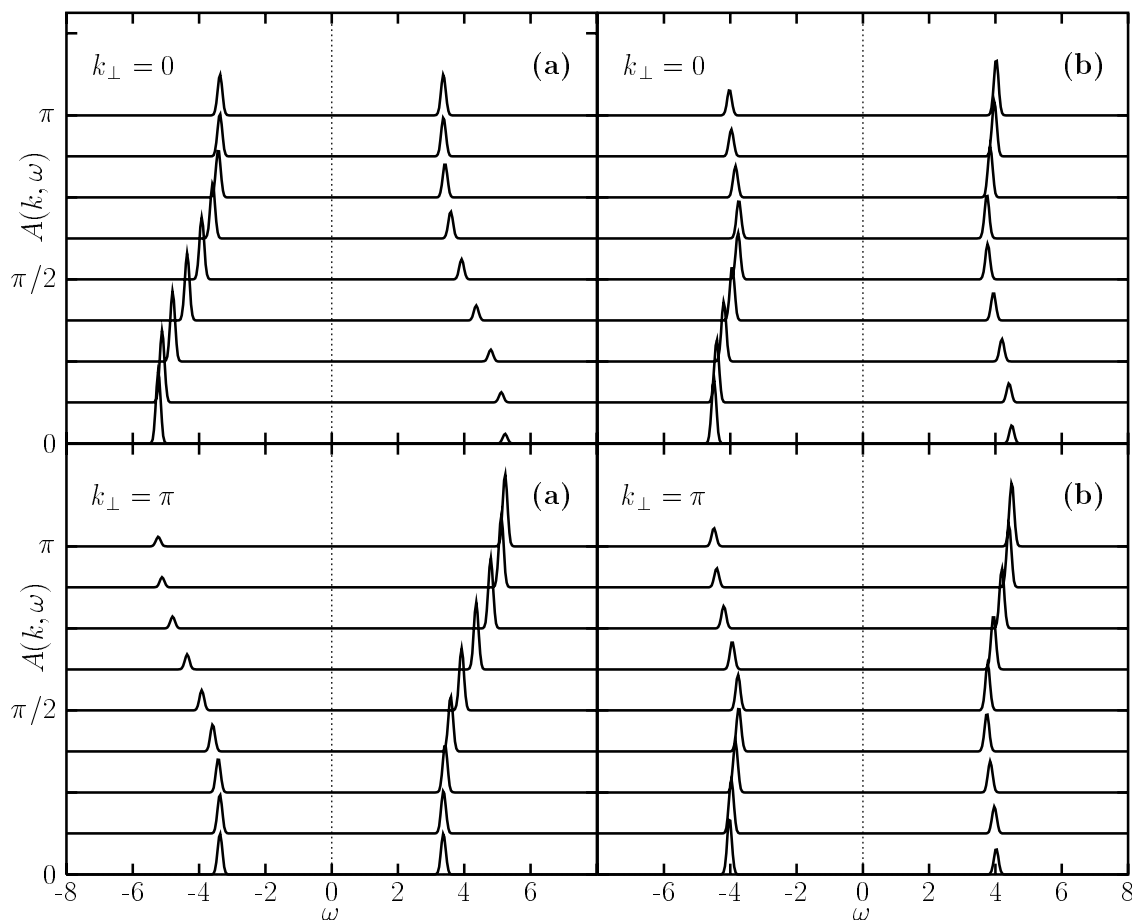


Abb. 3.8: Verteilung des spektralen Gewichtes innerhalb der SDW-Näherung für (a) $t_{\perp}/t = 2.0$ und (b) $t_{\perp}/t = 0.5$ mit $U/t = 8$ in beiden k_{\perp} -Kanälen.

3.1.3 Starke Kopplung: Die lokale Singulett-Näherung

Für große Werte von t_{\perp} läßt sich das System aus gekoppelten Ketten besser durch ein lokales Bild beschreiben: Die einzelnen Sprossen der Leiter sind im Limes $t_{\perp} \gg t$ annähernd unabhängig (siehe auch die Spin-Spin-Korrelationsfunktion, Abb. 3.4). Dies legt nahe, das Zwei-Platz-System einer Sprosse exakt zu lösen und anschließend die Kopplung t zwischen den Sprossen als Störung zu behandeln. Eine einzelne Sprosse an der Stelle $i = 1 \dots L$ wird dabei durch folgenden Hamiltonoperator beschrieben:

$$H_i^{\text{Sprosse}} = -t_{\perp} \sum_{\sigma} (c_{i,1\sigma}^{\dagger} c_{i,2\sigma} + h.c.) + U \sum_{\lambda} n_{i,\lambda\uparrow} n_{i,\lambda\downarrow}. \quad (3.21)$$

Die Notation ist dabei identisch zum Hamiltonoperator in Gl. 1.2. Pro Platz sind vier Zustände ($|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ und $|\uparrow\downarrow\rangle$) möglich, so daß der Hamiltonoperator H_i^{Sprosse} insgesamt 16 verschiedene Eigenzustände enthält. Die einzelnen Energien und Eigenzustände sind in Tabelle A.1 im Anhang A aufgeführt. Abb. 3.9 zeigt ein schematisches Diagramm sämtlicher Eigenzustände für $U = 8$ und $t_{\perp} = 2$ bei Halbfüllung. Der niedrigste Energiezustand ist ein Spin-Singulett mit Gesamtimpuls $k_{\perp} = 0$ und der Gesamtenergie $\langle H_i^{\text{Sprosse}} - \mu\hat{N} \rangle = -\frac{1}{2} \left(U + \sqrt{U^2 + 16t_{\perp}^2} \right)$. Die Anregung mit geringster Energie bei gleicher Teilchenzahl ist eine Anregung mit Impulsübertrag $\Delta k_{\perp} = \pi$ zu einem Spin-Triplett-Zustand mit Gesamtenergie $-U$ (siehe Tabelle A.1). Das Zwei-Platz-System besitzt somit eine Spinlücke von

$$\begin{aligned} \Delta E_S^{2\text{site}} &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{U^2 + 16t_{\perp}^2} - U \right) \\ &\approx \frac{4t_{\perp}^2}{U} \quad \text{für } U \gg t_{\perp}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Die letzte Gleichung gibt die effektive Heisenbergkopplung $J_{\perp} = 4t_{\perp}^2/U$ im Limes großer U senkrecht zu den Ketten wieder.

Im Fall der Photoemission wird ein Teilchen mit einem Impuls \vec{k} aus dem System herausgeschlagen. Für eine einzelne Sprosse bedeutet dies einen Übergang von einem Zweiteilchen-Zustand zu einem Einteilchen-Zustand. Entsprechend Abb. 3.9 gibt es insgesamt zwei jeweils zweifach entartete Einteilchen-Energiezustände, wobei der energetisch tiefste einen Gesamtimpuls von $k_{\perp} = 0$ und der Zustand darüber einen Gesamtimpuls von $k_{\perp} = \pi$ besitzt. Im folgenden soll der Übergang vom Grundzustand zum niedrigsten Einteilchen-Zustand, also im $k_{\perp} = 0$ Photoemissionskanal, betrachtet werden:

Für $t = 0$ läßt sich der Grundzustand des halbgefüllten Systems als Produkt der Singulett-Grundzustände der einzelnen Sprossen schreiben:

$$|\psi_0\rangle = |S_1\rangle|S_2\rangle \dots |S_L\rangle. \quad (3.23)$$

Dabei ist $|S_i\rangle$ der Singulett-Grundzustand der Sprosse i (Zustand $|\Psi_{10}\rangle$ in Tabelle A.1). Der Zustand $|\psi_0\rangle$ ist eine gute Näherung für den Grundzustand der gekoppelten Ketten bei großen Werten von t_{\perp} , da bereits bei $t_{\perp}/t = 2.0$ und $U/t = 8$ die Bindungsenergie eines Singuletts senkrecht zu den Ketten etwa um den Faktor vier größer ist als ein entsprechendes Singulett innerhalb der Ketten.

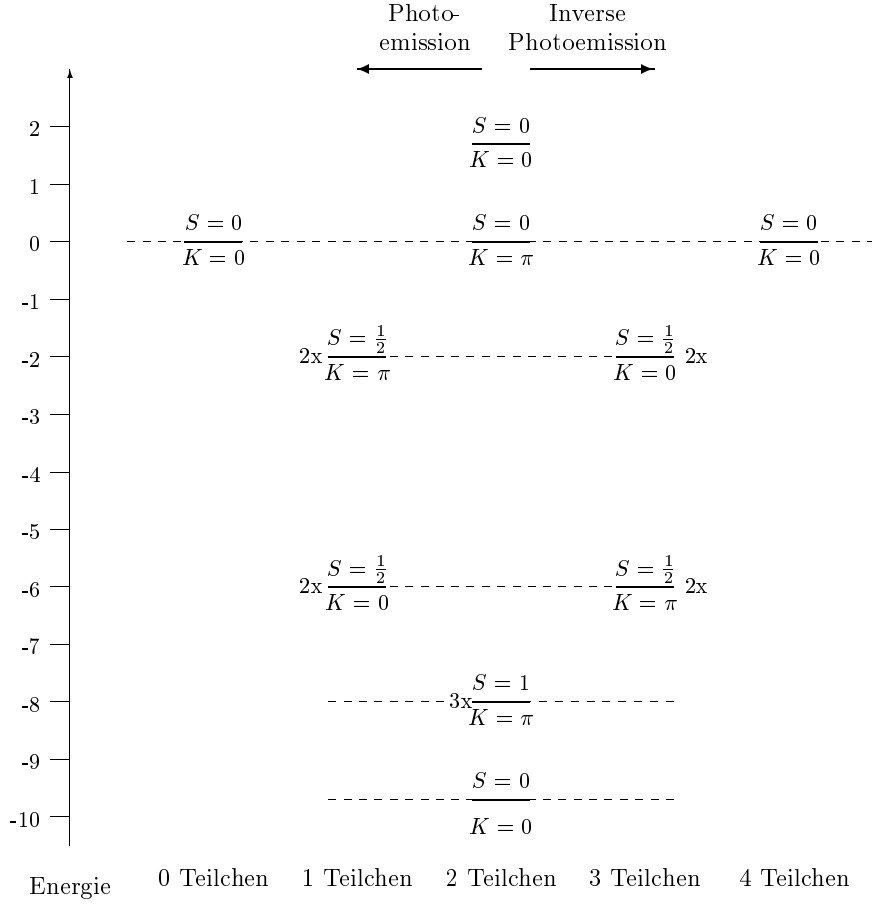


Abb. 3.9: Die Grafik zeigt alle 16 exakten Eigenzustände einer isolierten Sprosse für $U = 8$ und $t_{\perp} = 2$. An der horizontalen Achse ist die Gesamtteilchenzahl der Zustände aufgetragen. Die vertikale Achse gibt die Gesamtenergie $\langle H_i^{\text{Sprosse}} - \mu \hat{N} \rangle$ wieder, wobei das chemische Potential für Halbfüllung durch $\mu = U/2$ gegeben ist.

Zur Berechnung des spektralen Gewichtes werden zusätzlich die Matrixelemente von $c_{\vec{k},\uparrow}$ (siehe Gl. 3.16) benötigt. In einer ersten Näherung muß somit die Überlappung zwischen dem halbgefüllten Zustand Gl. 3.23 und einem Zustand mit einem zusätzlich entfernten Teilchen berechnet werden. Der niedrigste Energiezustand, der sich innerhalb des lokalen Bildes (Abb. 3.9) mit einem Teilchen pro Sprosse erreichen läßt, ist $|\downarrow\rangle = |\Psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \downarrow\rangle + |\downarrow, 0\rangle)$ und besitzt den Gesamtimpuls $k_{\perp} = 0$. (Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wurde ein Teilchen mit Spin-up entfernt.) Insgesamt folgt somit für einen Zustand mit einem entfernten Teilchen an der Sprosse ℓ :

$$|\ell\rangle = |S_1\rangle |S_2\rangle \dots |\downarrow_{\ell}\rangle \dots |S_L\rangle. \quad (3.24)$$

Dieser Zustand $|\ell\rangle$ ist in Abb. 3.10 grafisch veranschaulicht (LRA1, *Local-Rung-Appro-*

imation). Mit Hilfe eines Bloch-ähnlichen Ansatzes läßt er sich zusätzlich delokalisieren [74, 75]:

$$|\psi_1(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\ell=1}^L e^{ik\ell} |\ell\rangle. \quad (3.25)$$

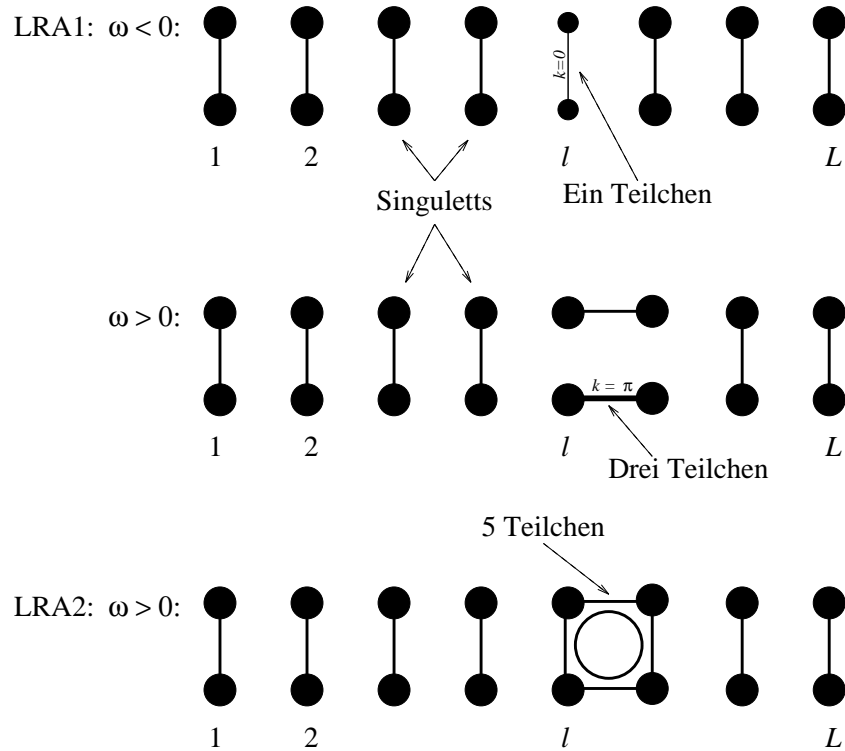


Abb. 3.10: Dargestellt sind die Eigenfunktion von H_0 in Ortsdarstellung, die zur Berechnung der verschiedenen Dispersionen LRA1 und LRA2 (siehe Text) verwendet wurden.

Um das Hüpfen parallel zu den Ketten im Grenzfall $t_{\perp} \gg t$ störungstheoretisch betrachten zu können, ist es sinnvoll, den gesamten Hamiltonoperator von Gl. 1.2 in $H = H_0 + H_I$ zu zerlegen, wobei H_0 die einzelnen Sprossen enthält und H_I die „Wechselwirkung“ der Sprossen untereinander:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_i H_i^{\text{Sprosse}} \\ &= -t_{\perp} \sum_{i,\sigma} (c_{i,1\sigma}^{\dagger} c_{i,2\sigma} + h.c.) + U \sum_{i\lambda} n_{i,\lambda\uparrow} n_{i,\lambda\downarrow}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$H_I = -t \sum_{i,\lambda\sigma} (c_{i,\lambda\sigma}^{\dagger} c_{i+1,\lambda\sigma} + h.c.), \quad (3.27)$$

Der Zustand $|\psi_1(k)\rangle$ (Gl. 3.25) ist trivialerweise ein exakter Eigenzustand von H_0 . In Störungsrechnung 1. Ordnung ist die Energiedispersion $\omega(k)$ von $A(\vec{k}, \omega)$ im $k_\perp = 0$ -Kanal somit gegeben durch

$$\begin{aligned}
\omega(k) &= \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle - \langle \psi_1(k) | H | \psi_1(k) \rangle - \mu \\
&= \underbrace{\langle \psi_0 | H_0 | \psi_0 \rangle}_{= LE_a} + \underbrace{\langle \psi_0 | H_I | \psi_0 \rangle}_{= 0} - \underbrace{\langle \psi_1(k) | H_0 | \psi_1(k) \rangle}_{= (L-1)E_a - t_\perp} - \langle \psi_1(k) | H_I | \psi_1(k) \rangle - \mu \\
&= E_a + t_\perp - \frac{1}{L} \sum_{\ell, \ell'} e^{ik(\ell' - \ell)} \langle \ell | H_I | \ell' \rangle.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Dabei ist $E_a = (U - \sqrt{U^2 + 16t_\perp^2})/2$ die Energie des Grundzustandes einer einzelnen Sprosse mit zwei Teilchen (siehe Anhang A). Der Term $\langle \ell | H_I | \ell' \rangle$ ist nur für $\ell' = \ell \pm 1$ von Null verschieden mit

$$\begin{aligned}
\langle \ell | H_I | \ell + 1 \rangle &= -t \sum_\lambda \langle \ell | c_{\ell+1, \lambda \downarrow}^\dagger c_{\ell, \lambda \downarrow} | \ell + 1 \rangle \\
&= -t \sum_\lambda \langle \uparrow_\ell | \langle S_{\ell+1} | c_{\ell+1, \lambda \downarrow}^\dagger c_{\ell, \lambda \downarrow} | S_\ell \rangle | \uparrow_{\ell+1} \rangle \\
&= +t \sum_\lambda \left| \langle S_\ell | c_{\ell, \lambda \downarrow}^\dagger | \uparrow_\ell \rangle \right|^2.
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Ferner ist

$$\langle S_\ell | c_{\ell, \lambda \downarrow}^\dagger | \uparrow_\ell \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}N_b} \left(-1 - \frac{E_b}{2t_\perp} \right) \tag{3.30}$$

mit $E_b = (U + \sqrt{U^2 + 16t_\perp^2})/2$ und $N_b = \sqrt{2 + E_b^2/2t_\perp^2}$ (siehe Anhang A). Durch Einsetzen in Gl. 3.29 folgt somit

$$\langle \ell | H_I | \ell + 1 \rangle = \frac{t}{N_b^2} \left(1 + \frac{E_b}{2t_\perp} \right)^2. \tag{3.31}$$

Hieraus ergibt sich die Dispersion im $k_\perp = 0$ -Kanal für $\omega < 0$:

$$\boxed{\omega(k) = -\frac{1}{2} \sqrt{U^2 + 16t_\perp^2} + t_\perp - 2tA \cos k,} \tag{3.32}$$

(Dispersion in lokaler Singulett-Näherung)

mit dem Renormierungsfaktor der Bandbreite $A = (1 + E_b/2t_\perp)^2 / (2 + E_b^2/2t_\perp^2)$. Diese Dispersion wurde in Abb. 3.3 zusätzlich eingezeichnet (gestrichelte Linie LRA1 für $\omega < 0$). Obwohl der Wert $t_\perp/t = 2.0$ noch vom eigentlichen Limes $t_\perp \gg t$ entfernt ist, ergibt sich eine hervorragende Übereinstimmung.

Die identische Berechnung der Dispersion $\omega(k)$ für $\omega > 0$ liefert im $k_{\perp} = 0$ -Kanal ein weitaus schlechteres Ergebnis (siehe Abb. 3.3). Für $\omega > 0$ (inverse Photoemission) wurde ein Zustand mit drei Teilchen auf einer Sprosse und Impuls $k_{\perp} = 0$ entsprechend Gl. 3.25 berechnet, der allerdings eine um $2t_{\perp}$ höhere Energie als der entsprechende Zustand im Photoemissionsbereich besitzt (siehe Abb. 3.9). Für $U/t = 8$ und $t_{\perp}/t = 2.0$ ist dieser Zustand energetisch von der gleichen Größenordnung wie ein Dreiteilchen-Zustand mit Impuls π längs einer Kette (siehe LRA1 für $\omega > 0$ in Abb. 3.10). D.h. um den $\omega > 0$ -Bereich korrekt zu beschreiben, müssen derartige Zustände zusätzlich beachtet werden. Dies kann z.B. durch exakte Diagonalisierung von vier Plätzen mit insgesamt fünf Teilchen geschehen (siehe LRA2 in Abb. 3.10). Der entsprechende Zustand analog zu Gl. 3.24 kann im Ortsraum folgendermaßen geschrieben werden:

$$|\ell, \text{LRA2}\rangle = |S_1\rangle|S_2\rangle \dots |5_{\ell}\rangle|S_{\ell+2}\rangle \dots |S_L\rangle. \quad (3.33)$$

Hierbei ist $|5_{\ell}\rangle$ der exakte Eigenzustand mit niedrigster Energie im $k_{\perp} = 0$ -Kanal mit fünf Teilchen auf vier Plätzen an den Sprossen ℓ und $\ell + 1$. Ebenso läßt sich ein entsprechender Zustand im k -Raum definieren:

$$|\psi_{1,\text{LRA2}}(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{A_N}} \sum_{\ell=1}^L e^{ik\ell} |\ell, \text{LRA2}\rangle \quad (3.34)$$

mit der Normierungskonstante $A_N = L(1 + 2\langle\ell|\ell+1\rangle \cos k)$. Somit folgt nach analoger Rechnung wie im Fall LRA1 für die Dispersion $\omega(k)$:

$$\begin{aligned} \omega(k) &= -\mu - \langle\psi_0|H|\psi_0\rangle + \langle\psi_{1,\text{LRA2}}(k)|H|\psi_{1,\text{LRA2}}(k)\rangle \\ &= -\frac{U}{2} - LE_a + \frac{1}{A_N} (\langle\ell|H|\ell\rangle + 2\langle\ell|H|\ell+1\rangle \cos k + 2\langle\ell|H|\ell+2\rangle \cos 2k). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Für den hier betrachteten Fall $U/t = 8$ und $t_{\perp}/t = 2.0$ wurden die notwendigen Matrixelemente durch exakte Diagonalisierung von vier Plätzen numerisch berechnet. Die einzelnen Werte, die zur Bestimmung von $\omega(k)$ benötigt werden, sind in der folgenden Tabelle gegeben:

Matrizelement	Wert
$\langle \ell \ell + 1 \rangle$	-0.058025
$\langle \ell H \ell \rangle$	$8.040610t + LE_a$
$\langle \ell H \ell + 1 \rangle$	$-0.256724t + L\langle \ell \ell + 1 \rangle E_a$
$\langle \ell H \ell + 2 \rangle$	$0.008498t$

Tabelle 3.1: Matrizelemente zur Berechnung der Dispersion $\omega(k)$ für die lokale Singulett-Näherung LRA2.

Das Ergebnis dieser Rechnung (LRA2) ist in Abb. 3.3 im Vergleich mit den QMC-Daten eingezeichnet. Die Übereinstimmung ist bedeutend besser als die der einfacheren LRA1-Berechnung.

Inwiefern das System tatsächlich in guter Näherung von den Zuständen LRA1 und LRA2 beschrieben wird, folgt aus der Betrachtung der Verteilung des spektralen Gewichtes. Zur Berechnung der Gewichtsverteilung in $A(\vec{k}, \omega)$ müssen nach Gl. 3.16 die Matrizelemente $\langle \psi_1(k) | c_{\vec{k}, \uparrow} | \psi_0 \rangle$ und $\langle \psi_0 | c_{\vec{k}, \uparrow} | \psi_{1, \text{LRA2}} \rangle$ bestimmt werden. Im ersten Fall folgt:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_1(k) | c_{\vec{k}, \uparrow} | \psi_0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\ell=1}^L e^{-ik\ell} \langle \ell | \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{\ell'=1}^L e^{ik\ell'} (c_{\ell', 1\uparrow} + c_{\ell', 2\uparrow}) | \psi_0 \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{\ell, \ell'=1}^L e^{ik(\ell'-\ell)} \langle \downarrow_{\ell} | c_{\ell', 1\uparrow} + c_{\ell', 2\uparrow} | S_{\ell} \rangle \\
&= \frac{1}{2N_b} (\langle 0, \downarrow | + \langle \downarrow, 0 | \rangle) \left(|\downarrow, 0\rangle + |0, \downarrow\rangle + \frac{E_b}{2t_{\perp}} (|0, \downarrow\rangle + |\downarrow, 0\rangle) \right) \\
&= \frac{1 + E_b/2t_{\perp}}{\sqrt{2 + E_b^2/2t_{\perp}^2}}. \tag{3.36}
\end{aligned}$$

Das spektrale Gewicht für LRA2 ($|\langle \psi_0 | c_{\vec{k}, \uparrow} | \psi_{1, \text{LRA2}} \rangle|^2$) wurde analog mit Hilfe der exakten Diagonalisierung der vier Plätze berechnet. Abb. 3.11 zeigt die Gewichtsverteilung dieser LRA-Näherung in hervorragender Übereinstimmung mit dem QMC-Ergebnis (siehe Teil (a) der Abb. 3.3). An dieser Stelle sei nochmals darauf hingewiesen, daß das Spektrum in Abb. 3.11 nur mit Hilfe der Systemparameter t , t_{\perp} und U , also ohne Fitparameter, berechnet wurde. Ferner war im Gegensatz zur AFHF-Näherung das Lösen einer selbstkonsistenten Gleichung nicht notwendig.

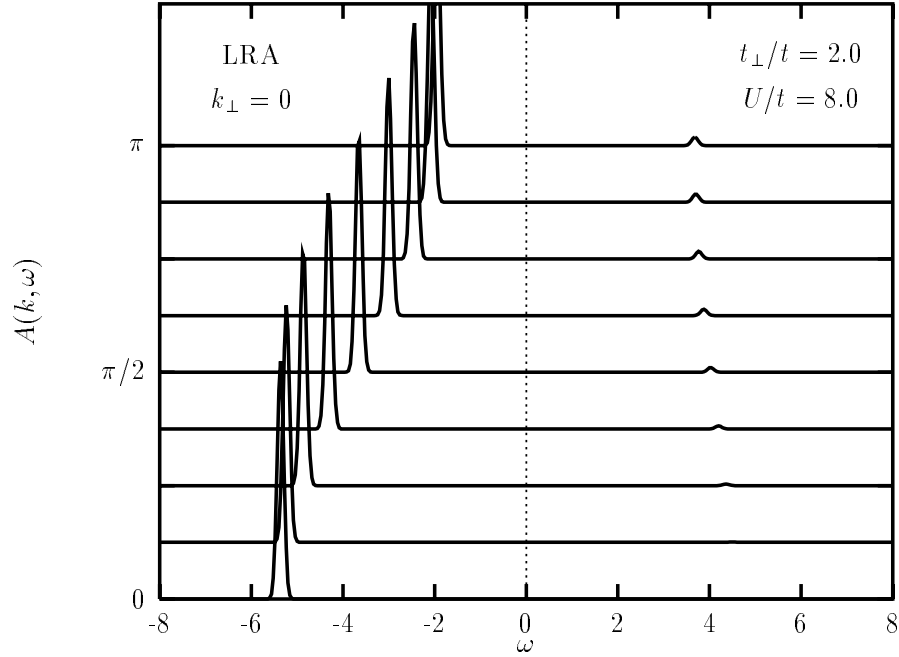


Abb. 3.11: Verteilung des spektralen Gewichtes für $U/t = 8$ und $t_{\perp}/t = 2.0$, berechnet durch die Näherungen LRA1 für $\omega < 0$ und LRA2 für $\omega > 0$ im $k_{\perp} = 0$ -Kanal.

3.2 Spin- und Ladungskorrelationsfunktionen

Um einen Einblick in die Natur der niederenergetischen Anregungen des Systems zu erhalten, sollen im folgenden die Spin- und Ladungssuszeptibilitäten $\chi_{s,c}(\vec{q}, \omega)$ genauer untersucht werden. In der Lehmann-Darstellung sind beide Suszeptibilitäten gegeben als

$$\chi_{s,c}(\vec{q}, \omega) = \frac{i}{Z} \sum_{l,l'} e^{-\beta \mathcal{E}_l} (1 - e^{-\beta \omega}) |\langle l | O_{s,c}(\vec{q}) | l' \rangle|^2 \cdot \delta(\omega - (\mathcal{E}_{l'} - \mathcal{E}_l)), \quad (3.37)$$

mit $O_s(\vec{q}) = S_{\vec{q}}^z = \sum_{\vec{p}} (c_{\vec{p}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger} c_{\vec{p},\uparrow} - c_{\vec{p}+\vec{q},\downarrow}^{\dagger} c_{\vec{p},\downarrow})$ und $O_c(\vec{q}) = \rho_{\vec{q}} = \sum_{\vec{p},\sigma} c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^{\dagger} c_{\vec{p},\sigma}$. Mit Hilfe des Spektraltheorems kann diese Größe aus den „rohen“ QMC-Daten berechnet werden:

$$\langle O_{s,c}(\vec{q}, \tau) O_{s,c}(-\vec{q}, 0) \rangle_{\text{QMC}} = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\tau \omega}}{1 - e^{-\beta \omega}} \chi_{s,c}(\vec{q}, \omega) d\omega. \quad (3.38)$$

Die Invertierung dieser numerisch schlecht konditionierten Gleichung wurde analog zur Berechnung der spektralen Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ mit Hilfe des Verfahrens der maximalen Entropie (siehe Abschnitt 2.3) durchgeführt.

In Abb. 3.12 ist die Spinsuszeptibilität $\chi_s(\vec{q}, \omega)$ dargestellt, und zwar für $t_{\perp}/t = 0.5$ in Teil (a), für $t_{\perp}/t = 1.0$ in Teil (b) und für $t_{\perp}/t = 2.0$ in Teil (c). Die Maxima der

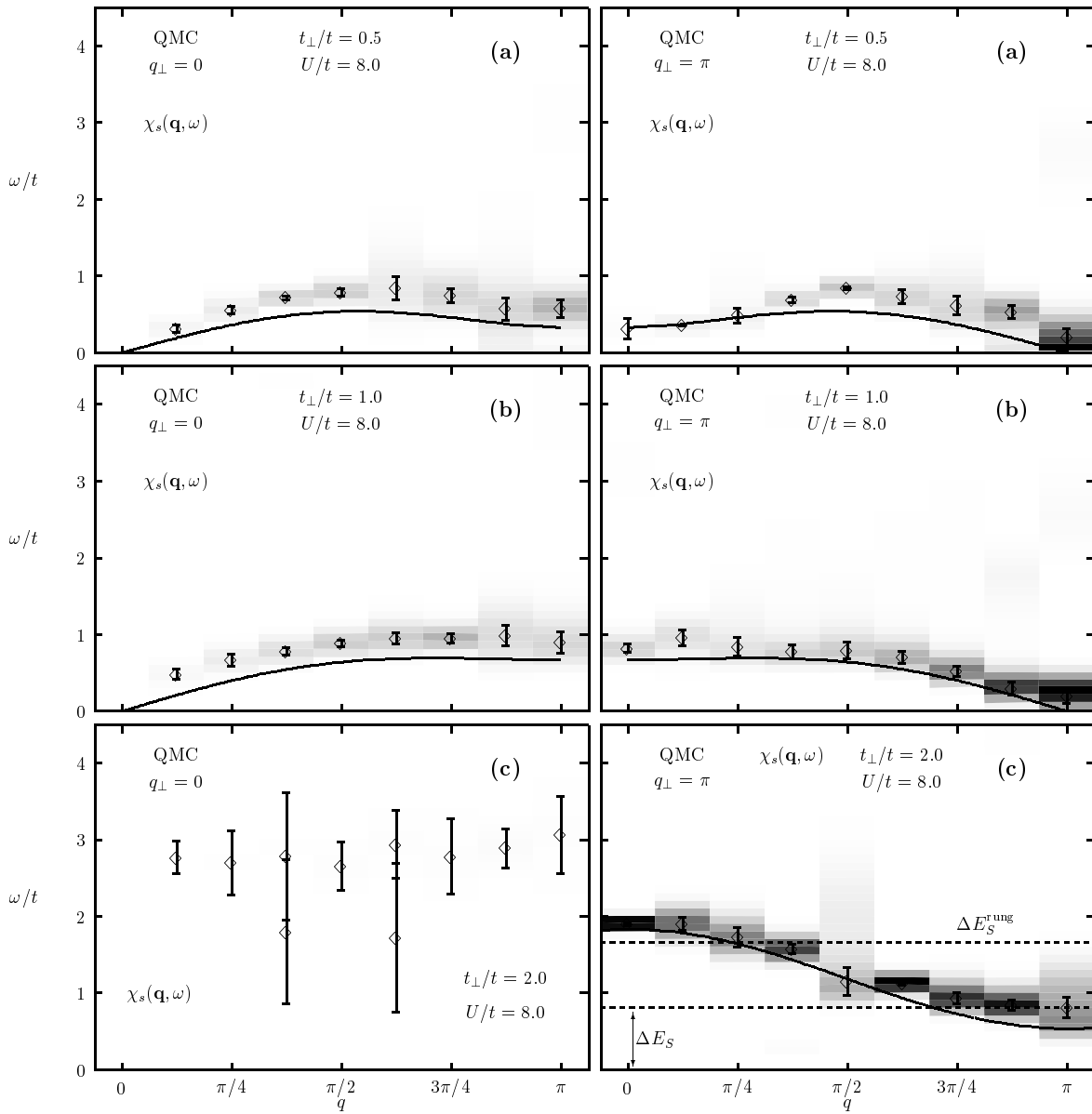


Abb. 3.12: Spinsuszeptibilität $\chi_s(\vec{q}, \omega)$ für $t_\perp/t = 0.5$ (a), $t_\perp/t = 1.0$ (b) und $t_\perp/t = 2.0$ (c) in beiden $q_\perp = 0, \pi$ -Kanälen. Die Berechnungen wurden bei $U/t = 8$ in einem 2×16 -System bei einer inversen Temperatur von $\beta t = 10$ durchgeführt.

Suszeptibilität sind dabei zusätzlich durch Karos (\diamond) mit den entsprechenden Fehlerbalken gekennzeichnet. Die Verteilung des Gewichtes in $\chi_s(\vec{q}, \omega)$ wird durch die Stärke der Grauschattierung angegeben. Hier läßt sich deutlich der Unterschied zwischen dem Limes $t_\perp \lesssim 2t$ (Vier-Band-Isolator) und $t_\perp \gtrsim 2t$ (Zwei-Band-Isolator) erkennen. Im Fall $t_\perp/t = 0.5$ und im isotropen Fall $t_\perp/t = 1.0$ existieren in beiden q_\perp -Kanälen dispersive Bänder, die an der Stelle $\vec{q} = (\pi, \pi)$ das meiste Gewicht besitzen. Die Dispersion geht für $\vec{q} \rightarrow (0, 0)$ und $\vec{q} \rightarrow (\pi, \pi)$ in beiden Fällen scheinbar gegen Null, jedoch liegt auch in diesem Parameterbereich ein endliches *Spingap* vor. Die Größe dieser Spinlücke läßt sich mit Hilfe der Dichte-Matrix-Renormierungsgruppe berechnen [69]. Für $t_\perp/t = 0.5$ ist das *Spingap* $\Delta E_S \approx 0.05t$ und für $t_\perp/t = 1.0$ ist $\Delta E_S \approx 0.12t$. Für das hier betrachtete 2×16 -System wurde die Spinlücke zusätzlich mit dem Projektor-QMC-Formalismus gemessen. Hier ergibt sich in Übereinstimmung mit dem Ergebnis der Renormierungsgruppe $\Delta E_S/t = 0.075 \pm 0.027$ für $t_\perp/t = 0.5$ und $\Delta E_S/t = 0.104 \pm 0.021$ für $t_\perp/t = 1.0$.

Sowohl für $t_\perp/t = 0.5$ als auch für $t_\perp/t = 1.0$ ist die Spinlücke kleiner bzw. von der Größenordnung der Simulationstemperatur $kT/t = 0.1$, so daß sich das System in beiden Fällen mit Hilfe der „gaplosen“ Spin-Dichte-Welle-Theorie beschreiben läßt. Es zeigt sich die Charakteristik eines Antiferromagneten, bei dem aufgrund der gebrochenen Symmetrie gaplose, elementare Anregungen, die sog. *Goldstone-Moden*, auftreten. Diese $\omega = 0$ -Moden lassen sich durch Anwenden der *Random-Phase-Approximation* (RPA) auf den SDW-Grundzustand analytisch beschreiben [70]. Eine ausführlichere Erläuterung der RPA-Näherung für das Hubbard-Modell wird in Abschnitt 4.2.2 gegeben.

Auf dem Hintergrund des SDW-Grundzustandes $|\Omega\rangle$ (siehe Gl. 3.14) sind die Suszeptibilitäten gegeben durch

$$\chi^{00}(\vec{q}, \vec{q}', t) = \frac{i}{2N} \langle \Omega | T \rho_{\vec{q}}(t) \rho_{-\vec{q}'}(0) | \Omega \rangle, \quad (3.39)$$

$$\chi^{ij}(\vec{q}, \vec{q}', t) = \frac{i}{2N} \langle \Omega | T S_{\vec{q}}^i(t) S_{-\vec{q}'}^j(0) | \Omega \rangle, \quad (3.40)$$

wobei $\rho_{\vec{q}} = \sum_{\vec{p}, \sigma} c_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}, \sigma}$, $S_{\vec{q}}^i = \sum_{\vec{p}, \sigma, \sigma'} c_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma}^\dagger \sigma_{\sigma, \sigma'}^i c_{\vec{p}, \sigma'}$, T der Zeitordnungsoperator und σ^i die Paulimatrizen mit $\sigma^\pm = \sigma^x \pm i\sigma^y$ sind. Daraus lassen sich die energieabhängigen Suszeptibilitäten berechnen [70]:

$$\chi^{00}(\vec{q}, \vec{q}', \omega) = \chi^{zz}(\vec{q}, \vec{q}', \omega) = \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \chi_0^{00}(\vec{q}, \omega), \quad (3.41)$$

$$\chi^{+-}(\vec{q}, \vec{q}', \omega) = \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \chi_0^{+-}(\vec{q}, \omega) + \delta_{\vec{q}, \vec{q}' - \vec{Q}} \chi_{\vec{Q}}^{+-}(\vec{q}, \omega), \quad (3.42)$$

wobei

$$\chi_0^{00}(\vec{q}, \omega) = -\frac{1}{2N} \sum_{\vec{p}}' \left(1 - \frac{\varepsilon(\vec{p})\varepsilon(\vec{p} + \vec{q}) + \Delta^2}{E_{\vec{p}}E_{\vec{p}+\vec{q}}} \right) \cdot \left(\frac{1}{\omega - E_{\vec{p}+\vec{q}} - E_{\vec{p}} + i\delta} + \frac{1}{-\omega - E_{\vec{p}+\vec{q}} - E_{\vec{p}} + i\delta} \right), \quad (3.43)$$

$$\chi_0^{+-}(\vec{q}, \omega) = -\frac{1}{2N} \sum_{\vec{p}}' \left(1 - \frac{\varepsilon(\vec{p})\varepsilon(\vec{p} + \vec{q}) - \Delta^2}{E_{\vec{p}}E_{\vec{p}+\vec{q}}} \right) \cdot \left(\frac{1}{\omega - E_{\vec{p}+\vec{q}} - E_{\vec{p}} + i\delta} + \frac{1}{-\omega - E_{\vec{p}+\vec{q}} - E_{\vec{p}} + i\delta} \right), \quad (3.44)$$

$$\chi_{\vec{Q}}^{+-}(\vec{q}, \omega) = +\frac{1}{2N} \sum_{\vec{p}}' \frac{2\Delta}{E_{\vec{p}}} \left(\frac{1}{\omega - E_{\vec{p}+\vec{q}} - E_{\vec{p}} + i\delta} + \frac{1}{-\omega - E_{\vec{p}+\vec{q}} - E_{\vec{p}} + i\delta} \right). \quad (3.45)$$

Durch Einsetzen dieser Response-Funktion in die RPA-Gleichung folgt [70]:

$$\chi_{\text{RPA}}^{00}(\vec{q}, \vec{q}', \omega) = \frac{\chi^{00}(\vec{q}, \vec{q}', \omega)}{1 + U\chi_0^{00}(\vec{q}, \omega)} \quad (3.46)$$

$$\chi_{\text{RPA}}^{zz}(\vec{q}, \vec{q}', \omega) = \frac{\chi^{zz}(\vec{q}, \vec{q}', \omega)}{1 - U\chi_0^{00}(\vec{q}, \omega)} \quad (3.47)$$

$$\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, \vec{q}', \omega) = \sum_{\vec{p}} \chi^{+-}(\vec{q}, \vec{p}, \omega) [1 - U\chi^{+-}(\vec{p}, \vec{q}', \omega)]^{-1}. \quad (3.48)$$

Hier steht $[1 - U\chi^{+-}(\vec{p}, \vec{q}', \omega)]^{-1}$ für die Inversion einer 2×2 -Matrix mit

$$[1 - U\chi^{+-}(\vec{p}, \vec{q}', \omega)]^{-1} = \frac{[1 - U\chi_0^{+-}(\vec{p} + \vec{Q}, \omega)]\delta_{\vec{p}, \vec{q}'} + U\chi_{\vec{Q}}^{+-}(\vec{p}, \omega)\delta_{\vec{p}, \vec{q}' - \vec{Q}}}{[1 - U\chi_0^{+-}(\vec{p}, \omega)][1 - U\chi_0^{+-}(\vec{p} + \vec{Q}, \omega)] - [U\chi_{\vec{Q}}^{+-}(\vec{p}, \omega)]^2}. \quad (3.49)$$

Die aufgrund des *Goldstone*-Theorems zu erwartende, gaplose Mode ist in der Suszeptibilität $\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, \vec{q}', \omega)$ enthalten. Die Dispersionsrelation $\omega_{\text{RPA}}(\vec{q})$ folgt somit aus den Nullstellen des Nenners von Gl. 3.49:

$$[1 - U\chi_0^{+-}(\vec{q}, \omega(\vec{q}))][1 - U\chi_0^{+-}(\vec{q} + \vec{Q}, \omega(\vec{q}))] - [U\chi_{\vec{Q}}^{+-}(\vec{q}, \omega(\vec{q}))]^2 \stackrel{!}{=} 0. \quad (3.50)$$

Die numerische Lösung dieser Gleichung ist für $t_{\perp}/t = 0.5$ und $t_{\perp}/t = 1.0$ für beide Werte von q_{\perp} in Abb. 3.12 eingezeichnet (durchgezogene Linie in Abb. 3.12 (a) und (b)). Es zeigt sich eine hervorragende Übereinstimmung, die darauf schließen läßt, daß

die elementaren Spinanregungen in dem System der gekoppelten Ketten für kleine und mittlere Werte von t_\perp denen eines Antiferromagneten entsprechen.

Für große Werte von t_\perp tritt eine drastische Abweichung vom SDW-Bild auf (siehe Abb. 3.12 (c)). Dies liegt, wie bereits erwähnt, zum einen an der extremen Kurzreichweitigkeit der Spinkorrelation und zum anderen an den relativ großen Wert der Energielücke im Spinanregungsspektrum. Mit Hilfe der Projektor-QMC-Methode wurde für den hier gezeigten Fall von $t_\perp/t = 2.0$ eine Spinlücke von $\Delta E_S/t = 0.814 \pm 0.015$ gemessen, d.h. die mittlere thermische Verbreiterung bei $\beta t = 10$ ist klein gegenüber diesem *Spin-gap*.

Innerhalb der lokalen Singulett-Näherung für große Werte von t_\perp existiert im $q_\perp = 0$ -Kanal kein Übergang vom $S = 0$ -Grundzustand zu einem $S = 1$ -Zustand bei gleicher Teilchenzahl (siehe Abb. 3.9). Somit ist lediglich ein signifikanter Beitrag von spektralem Gewicht für $q_\perp = \pi$ zu erwarten. Dies wird von den QMC-Ergebnissen in Abb. 3.12, Teil (c) bestätigt. Für $q_\perp = \pi$ ist das spektrale Gewicht nahezu vollständig in einem dispersiven Band mit einer Breite von $\approx t$ und einem Minimum bei $q = \pi$ enthalten. Um diese Dispersion in der lokalen Näherung explizit zu ermitteln, ist eine Störungsrechnung in zweiter Ordnung notwendig. Für den relevanten $q_\perp = \pi$ -Kanal folgt (die Berechnung ist ausführlich in Anhang B dargestellt):

$$\omega_{spin}(q) = -E_a - \frac{64t^2(A_1A_2)^2}{2E_a - U} - 16t^2 \sin^2(q/2) \left(\frac{A_1^2}{E_b + 2t_\perp} + \frac{A_2^2}{E_b - 2t_\perp} \right),$$

(Spin-Dispersion der LRA-Näherung)

mit $E_{a,b} = (U \mp \sqrt{U^2 + 16t_\perp^2})/2$ und $A_{1,2} = (1 \mp E_b/2t_\perp)/\sqrt{4 + E_b^2/t_\perp^2}$. Für $t_\perp/t = 2.0$ ergibt sich eine effektive Dispersion von $\omega_{spin}(q) = J_\perp^{eff} + J^{eff} \cos(q)$ mit $J_\perp^{eff}/t = 1.187$ und $J^{eff}/t = 0.646$, die zusätzlich in Abb. 3.12 (c) im $q_\perp = \pi$ -Kanal eingezeichnet ist. Wie bereits im Fall der spektralen Dichte stimmt die LRA-Näherung hervorragend mit dem QMC-Ergebnis überein. Zusätzlich ist die Spinlücke ΔE_S , die mit Hilfe des Projektor-QMC-Verfahrens bestimmt wurde, und das *Spin-gap* ΔE_S^{rung} einer einzelnen Sprosse in die Abb. 3.12 eingezeichnet (gestrichelte Linien).

Das QMC-Ergebnis der Ladungskorrelationsfunktion $\chi_c(\vec{q}, \omega)$ ist in Abb. 3.13 dargestellt. Für $t_\perp/t = 0.5$ und $t_\perp/t = 1.0$ (Abb. 3.13 (a) und (b)) ist das spektrale Gewicht annähernd gleichmäßig auf beide q_\perp -Kanäle verteilt. Für $\vec{q} = (0, 0)$ ist $O_c((0, 0))$ identisch zum Teilchenzahloperator \hat{N} , der mit dem Hamiltonoperator H vertauscht.

Dies führt zu einer Auswahlregel (die Matrixelemente in Gl. 3.37 verschwinden), die Übergänge für $\vec{q} = (0, 0)$ verbietet, d.h. das spektrale Gewicht für $\chi_c((0, 0), \omega)$ ist exakt Null.

In beiden q_\perp -Kanälen ist die Größe der Ladungslücke für $t_\perp/t = 0.5$ ungefähr $5t$ und für $t_\perp/t = 1.0$ ungefähr $4t$. Ferner existiert eine breite Struktur von mehreren t sowohl für $t_\perp/t = 0.5$ als auch für $t_\perp/t = 1.0$. Für $q_\perp = 0$ ist vor allem für $t_\perp/t = 0.5$ die Andeutung eines dispersiven Bandes mit einem Maximum bei $q = \pi$ und einer Bandbreite von etwa $3t$ zu erkennen.

Die breite Struktur in der Ladungssuszeptibilität läßt sich qualitativ mit Hilfe der spektralen Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ (Abb. 3.1 und Abb. 3.2) verstehen. In $A(\vec{k}, \omega)$ existieren jeweils vier disperse Bänder mit einem zusätzlichen breiten, inkohärenten Hintergrund, die zu der beobachteten Struktur sowohl für $q_\perp = 0$ als auch für $q_\perp = \pi$ führen. Hierdurch läßt sich die kleinste Teilchen-Loch-Anregungsenergie abschätzen. Für beide Werte von t_\perp , $t_\perp/t = 0.5$ und $t_\perp/t = 1.0$, ergibt sich eine Lücke von etwa $4t$, die mit den Energielücken in $\chi_c(\vec{q}, \omega)$ übereinstimmt.

Für diese Werte von t_\perp wurde zusätzlich χ_{RPA}^{00} (siehe Gl. 3.46) berechnet, wobei, wie oben beschrieben, ein antiferromagnetischer Spinhintergrund zugrunde gelegt wird. In dieser RPA-Näherung zeigt sich ebenfalls eine breite Struktur in beiden q_\perp -Kanälen oberhalb des *Chargegaps*. Die minimale Anregungsenergie von χ_{RPA}^{00} ist zusätzlich in Abb. 3.13 (a) und (b) eingezeichnet (durchgezogene Linie mit ausgefüllten Punkten). Wie bereits in Abschnitt 3.1.2 erwähnt wird auch hier deutlich, daß die SDW-Näherung die Ladungslücke zu groß wiedergibt.

Im Limes großer Werte von t_\perp läßt sich die Ladungs-Response-Funktion wieder durch das lokale Singulett-Bild verstehen. In diesem LRA-Szenario entsteht ein Ladungsübergang durch Anregung eines Singuletts an einer Sprosse unter Erhaltung der Teilchenzahl und des Gesamtspins. D.h. der niedrigste Übergang entsprechend Abb. 3.9 verläuft zwischen dem $S = 0$ -Grundzustand und dem niedrigsten $S = 0$ -Anregungszustand bei zwei Teilchen pro Sprosse im $q_\perp = \pi$ -Kanal. Der energetisch höhere Übergang im $q_\perp = 0$ -Kanal ist im lokalen Bild verboten, da der entsprechende Operator $O_c(0)$ mit dem Hamiltonoperator einer Sprosse vertauscht.

Das QMC-Ergebnis für $t_\perp/t = 2.0$ (Abb. 3.13 (c)) spiegelt in guter Übereinstimmung dieses lokale Singulett-Bild wieder. Im $q_\perp = 0$ -Kanal ist nahezu kein spektrales Gewicht vorhanden (der verbleibende restliche Gewichtsanteil ist auf die Abweichung vom exak-

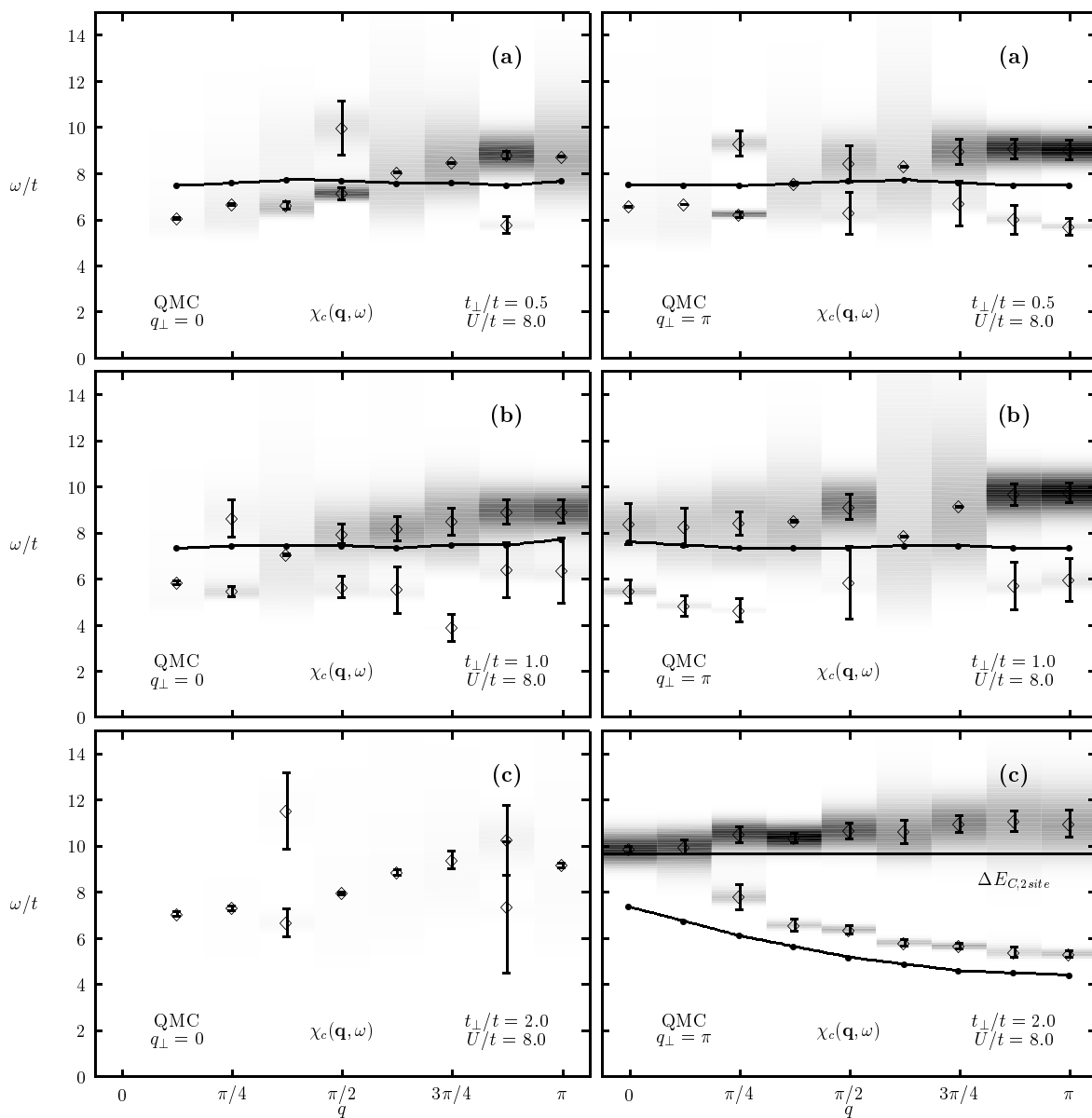


Abb. 3.13: Ladungssuszeptibilität $\chi_c(\vec{q}, \omega)$ für $t_{\perp}/t = 0.5$ (a), $t_{\perp}/t = 1.0$ (b) und $t_{\perp}/t = 2.0$ (c) in beiden $q_{\perp} = 0, \pi$ -Kanälen. Die Berechnungen wurden bei $U/t = 8$ in einem 2×16 -System bei einer inversen Temperatur von $\beta t = 10$ durchgeführt.

ten LRA-Zustand zurückzuführen). Das spektrale Gewicht für $q_{\perp} = \pi$ ist hauptsächlich um $\omega \approx 10$ konzentriert und entspricht der optischen Anregungsenergie $\Delta E_{C,2\text{site}}$ einer Sprosse für $q_{\perp} = \pi$ (durchgezogene Linie).

Um den Ursprung des vom LRA-Bild abweichenden dispersiven Bandes im $q_{\perp} = \pi$ -Kanal in Abb. 3.13 zu verstehen, ist es notwendig, die möglichen Teilchen-Loch-Anregungen in der spektralen Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ (siehe Abb. 3.3) zu betrachten. In der Zweiteilchen-Ladungs-Response-Funktion ist ein signifikanter Gewichtsanteil zu erwarten, wenn ein entsprechender Teilchen-Loch-Übergang für ein bestimmtes $\vec{q} = (q, q_{\perp})$ und ein bestimmtes ω in $A(\vec{k}, \omega)$ existiert. Um beispielsweise den Beitrag in $\chi_c(\vec{q}, \omega)$ zu verstehen, muß über alle möglichen Übergänge zwischen dem Photoemissionsband und dem inversen Photoemissionsband in $A(\vec{k}, \omega)$ (Abb. 3.3) summiert werden, die den Impuls \vec{q} übertragen. Die minimalen Anregungsenergien dieser Konstruktion sind in Abb. 3.13 (c) für $q_{\perp} = \pi$ mit Hilfe der durchgezogene Linie mit den ausgefüllten Punkten eingezeichnet. Die Energien, die auf diese Weise berechnet wurden, sind durchgehend kleiner als die entsprechende Resultate der QMC/MaxEnt-Berechnung. Diese Abweichung ist auf folgende Weise zu verstehen: Wenn die Einteilchen-Bänder zur Berechnung der Ladungs-Response-Funktion herangezogen werden, entspricht dies der Bestimmung der Zweiteilchen-Anregungen in niedrigster Ordnung der diagrammatischen Störungsentwicklung, allerdings mit den exakten Einteilchen-Propagatoren. Hierbei werden alle Teilchen-Loch-Wechselwirkungen vernachlässigt. Diese Teilchen-Loch-Wechselwirkungen führen jedoch zu einer Erhöhung der Ladungs-Anregungsenergien um einen signifikanten Betrag [76], der in dem QMC-Ergebnis für $\chi_c(\vec{q}, \omega)$ beobachtet wird.

Kapitel 4

Dotierte Hubbard-Ketten

In diesem Abschnitt sollen analog zu Kapitel 3 gekoppelte Hubbard-Ketten bei Dotierung untersucht werden. Die Ergebnisse der QMC-Berechnung lassen sich dabei zum Teil wieder durch einfache Modelle beschreiben. Bei kleiner Dotierung und großen Werten von t_{\perp} liefert das lokale Singulett-Bild (LRA) gute Ergebnisse (Abschnitt 4.1). Bei mittlerer Dotierung $\langle n \rangle \approx 0.875$ entspricht der dispersive Anteil der spektralen Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ qualitativ dem Ergebnis einer *Slave-Boson-Mean-Field*-Berechnung (siehe Abschnitt 4.2.1), während die Spin- und Ladungssuszeptibilitäten $\chi_{s,c}(\vec{q}, \omega)$ durch eine *Random-Phase-Approximation* bereits in niedrigster Ordnung angenähert werden können (Abschnitt 4.2.2). Ferner zeigt das Leitersystem für eine isotrope, physikalisch relevante Kopplung keinen Hinweis auf einen Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang bei Temperaturen bis zu $k_B T \approx 0.1t$ (Abschnitt 4.3). In Abschnitt 4.4 wird schließlich die Natur des Einteilchen-Hüpfens zwischen den Ketten auf inkohärentes Verhalten untersucht.

4.1 Die lokale Singulett-Näherung bei kleiner Dotierung

Auch im dotierten Fall ist die Beschreibung von gekoppelten Hubbard-Ketten im lokalen Singulett-Bild für $t_{\perp} \gg t$ möglich. Für verschwindende Dotierung (Übergang von einem Zustand mit einem Loch zu einem Zustand mit zwei Löchern) ist

eine analytische Rechnung für die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ analog zum halbgefüllten Fall durchführbar: Hierzu muß zuerst der Grundzustand des Systems mit einem Loch bestimmt werden. Ein Zustand mit einem Loch mit Impuls k ist allgemein durch $|\psi_1(k)\rangle = \sum_{\ell=1}^L e^{ik\ell} |\ell\rangle / \sqrt{L}$ gegeben (siehe Gl. 3.25). Für die Energie $E_1(k)$ dieses Zustandes in 1. Ordnung Störungsrechnung gilt (siehe auch Gl. 3.28):

$$E_1(k) = \langle \psi_1(k) | H | \psi_1(k) \rangle = (L - 1)E_a - t_{\perp} + 2tA \cos k, \quad (4.1)$$

mit $A = (1 + E_b/2t_{\perp})^2 / (2 + E_b^2/2t_{\perp}^2)$. Der energetisch niedrigste Zustand wird somit für $k = \pi$ erreicht, d.h. für den Grundzustand des Systems mit einem Loch folgt:

$$|\psi_0^{1\text{Loch}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\ell=1}^L (-1)^{\ell} |S_1\rangle |S_2\rangle \dots | \downarrow_{\ell} \rangle \dots |S_L\rangle, \quad (4.2)$$

mit der Energie $E_1^{1\text{Loch}} = (L - 1)E_a - t_{\perp} - 2tA$. Dieser Zustand besteht aus Eigenzuständen von einzelnen Sprossen, die alle einen Impuls senkrecht zu den Ketten von $k_{\perp} = 0$ besitzen. Der entsprechende Gesamtimpuls K_{\perp} des Zustandes $|\psi_0^{1\text{Loch}}\rangle$ beträgt somit Null. Das Herausschlagen eines weiteren Teilchens aus diesem 1-Loch-Grundzustand ist energetisch mit $k_{\perp} = 0$ am günstigsten (siehe Abb. 3.9), weshalb im folgenden nur die Photoemission im $k_{\perp} = 0$ -Kanal im LRA-Bild betrachtet werden soll. Der entsprechende Zustand mit zwei Löchern, der zur Berechnung des Photoemissionsspektrum $A(k, k_{\perp} = 0, \omega)$ notwendig ist, läßt sich somit schreiben als

$$|\psi^2(k)\rangle = \frac{1}{B_N} c_{k, k_{\perp}=0, \downarrow} |\psi_0^{1\text{Loch}}\rangle, \quad (4.3)$$

mit der Normierungskonstante B_N . Die Spinrichtung wurde dabei ohne Beschränkung der Allgemeinheit so gewählt, daß die z -Komponente des Gesamtspins S_z verschwindet. Nach einer aufwendigen Rechnung, die hier nicht wiedergegeben werden soll, folgt für die Dispersion im $k_{\perp} = 0$ -Kanal für $\omega < 0$:

$$\omega^{1\text{Loch}}(k) = -2tA^{1\text{Loch}}(1 + \cos k), \quad (4.4)$$

mit $A^{1\text{Loch}} = (1 + E_b/2t_{\perp})^2 / (2 + E_b^2/2t_{\perp}^2)$. Der Faktor $A^{1\text{Loch}}$ ist exakt identisch zur Renormierung der Bandbreite im halbgefüllten Fall innerhalb der LRA-Näherung. D.h. die effektive Bandbreite hängt zumindest bei großen Werten von t_{\perp} in der Nähe von Halbfüllung in 1. Ordnung nicht von der Dotierung ab.

Analog zu Kapitel 3 wurde zum Vergleich mit der LRA-Berechnung ein 2×16 -System mit $U/t = 8$ und $t_{\perp}/t = 2.0$ herangezogen. In Abb. 4.1 ist das Ergebnis der QMC-Simulation dieses Parametersatzes sowohl für $k_{\perp} = 0$ (Teil (a)) als auch für $k_{\perp} = \pi$

(Teil (b)) dargestellt. Die mittlere Teilchendichte beträgt $\langle n \rangle = 0.96875$ und entspricht somit einer Dotierung von einem Loch. Die inverse Temperatur konnte aufgrund des Vorzeichenproblems maximal $\beta t = 8$ gewählt werden.

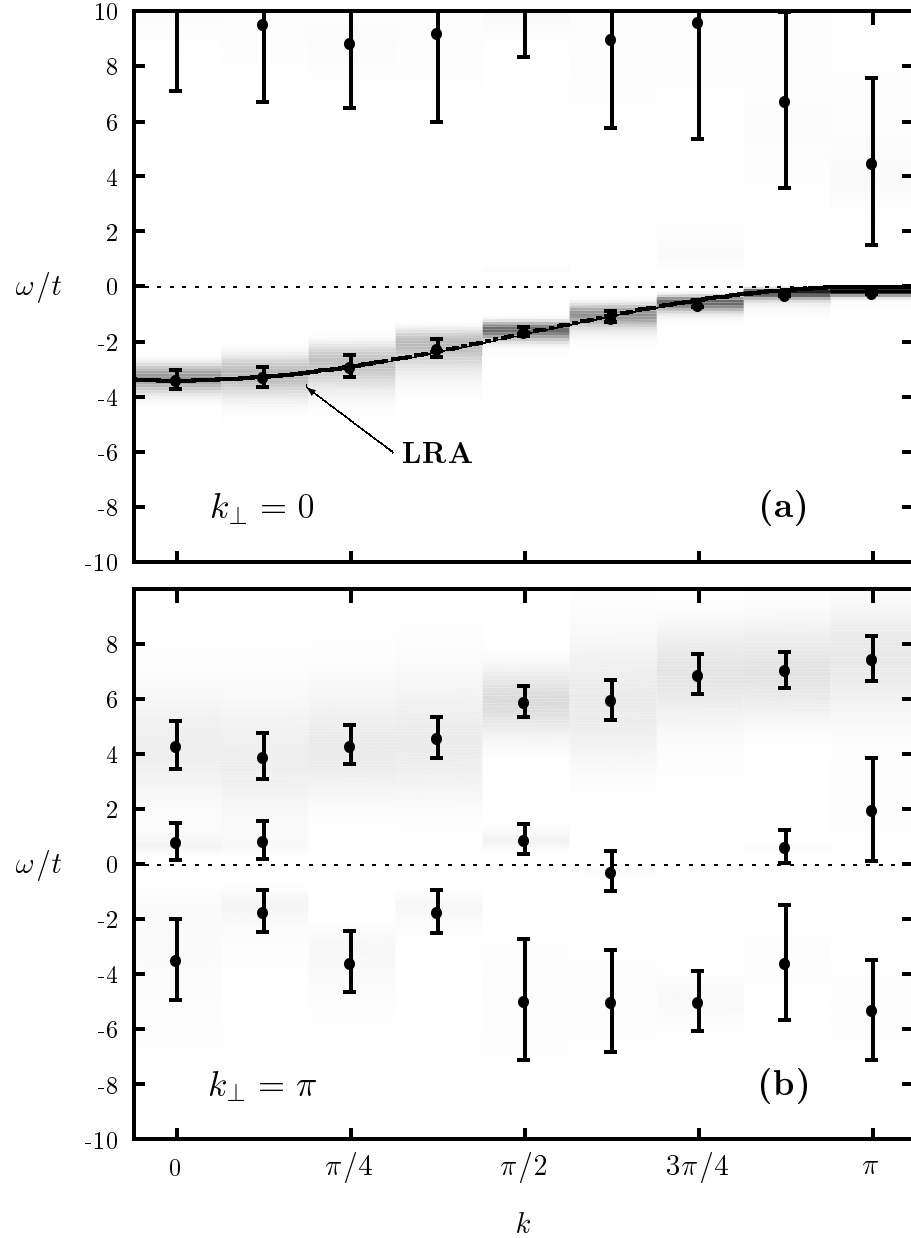


Abb. 4.1: Spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ für $t_{\perp}/t = 2$, $U/t = 8$ und $\beta t = 8$ in einem 2×16 -System mit einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.96875$ (1 Loch). Teil (a) zeigt den $k_{\perp} = 0$ -Kanal und Teil (b) den $k_{\perp} = \pi$ -Kanal.

Die durchgezogene Linie im $k_{\perp} = 0$ -Kanal in Abb. 4.1(a) zeigt das Ergebnis der lokalen Singulett-Näherung (Gl. 4.4). Wie im halbgefüllten Fall ist die Übereinstimmung mit der Dispersion der exakten QMC-Daten hervorragend, obwohl für den Wert $t_{\perp}/t = 2.0$ die Bedingung $t_{\perp} \gg t$ nicht erfüllt ist. Im $k_{\perp} = \pi$ -Kanal ist ein entsprechendes Band zwischen $\omega \approx 4t$ und $\omega \approx 8t$ zu erkennen, dessen Bandbreite innerhalb der Fehlerbalken mit der Bandbreite im $k_{\perp} = 0$ -Kanal identisch ist. Aufgrund der schlechteren Auflösung des MaxEnt-Verfahrens bei großen Werten von ω ist die Dispersion in diesem k_{\perp} -Kanal nicht so deutlich ausgeprägt wie im $k_{\perp} = 0$ -Kanal. Der größte Teil des spektralen Gewichtes ist in diesen dispersiven Bändern enthalten, jedoch sind für beide Werte von k_{\perp} Anzeichen für einen zusätzlichen, inkohärenten Hintergrund zu erkennen, der ebenso bei Halbfüllung beobachtet wird.

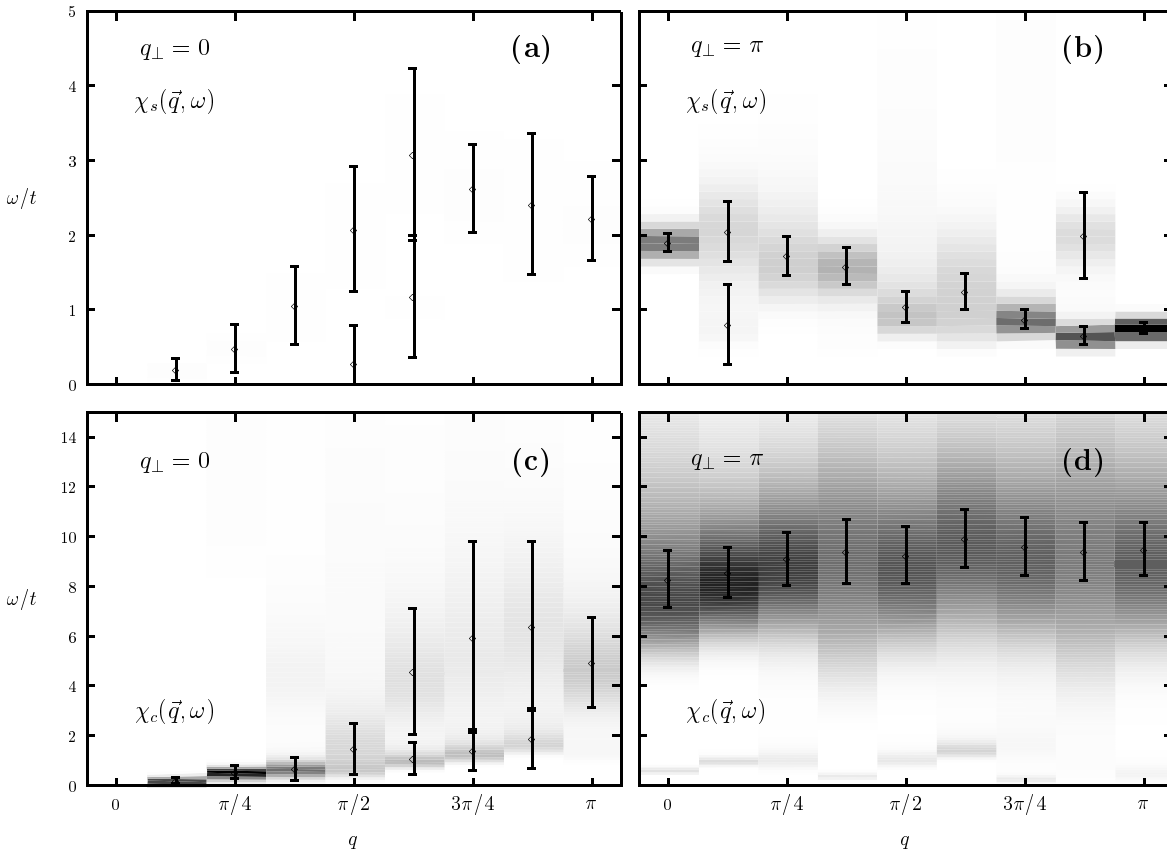


Abb. 4.2: Spin- und Ladungssuszeptibilität ($\chi_s(\vec{q}, \omega)$: Teil (a) und (b), $\chi_c(\vec{q}, \omega)$: Teil (c) und (d)) für $t_{\perp}/t = 2$, $U/t = 8$ und $\beta t = 8$ in einem 2×16 -System mit einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.96875$ (1 Loch). Teil (a) und (c) zeigen jeweils den $q_{\perp} = 0$ -Kanal, Teil (b) und (d) den $q_{\perp} = \pi$ -Kanal.

In Abb. 4.2 sind die Spin- und Ladungssuszeptibilitäten für den gleichen Parametersatz dargestellt. Nahezu das gesamte spektrale Gewicht der Spin-Response-Funktion ist im $q_{\perp} = \pi$ -Kanal enthalten. Dies läßt sich durch Betrachtung von $\chi_s(\vec{q}, \omega)$ in Lehmann-Darstellung (Gl. 3.37) verstehen: Im $q_{\perp} = 0$ -Kanal vertauscht der Operator $O_s(\vec{q})$ mit dem Hamiltonoperator H_0 (Gl. 3.26). Somit sind die Matrixelemente $\langle l | O_s(\vec{q}) | l' \rangle$ diagonal in l und l' und damit die Suszeptibilität $\chi_s(q, q_{\perp} = 0, \omega)$ bei Vernachlässigung von H_I (d.h. für $t_{\perp} \gg t$) exakt Null. Im Gegensatz hierzu enthält der $q_{\perp} = \pi$ -Kanal den größten Teil des spektralen Gewichtes in einer cosinus-ähnlichen Dispersion (Abb. 4.2(b)) zwischen $\omega \approx 1.9t$ und $\omega \approx 0.8t$. Dieses Band ist innerhalb der QMC-Fehlerbalken mit dem Band im halbgefüllten Fall (siehe Abb. 3.12) identisch. Es kann somit mit den Magnon-Anregungen der LRA-Näherung (siehe Kapitel 3.2) identifiziert werden. Die Spinlücke kann aufgrund der endlichen Temperatur $\beta t = 8$ und der begrenzten Auflösung der QMC/MaxEnt-Methode nicht genau genug bestimmt werden, um eine Abweichung vom halbgefüllten Fall zu erkennen ($\Delta E_S^{\text{Halbfüllung}}/t = 0.814 \pm 0.015$). Das *Weak-Coupling*-Phasendiagramm (siehe Abb. 1.5) von L. Balents und M.P.A. Fisher [35] sagt in diesem Parameterbereich eine gaplose Spin- und Ladungsmode (C1S1-Phase), d.h. keine Spinlücke voraus. Ein Hinweis darauf ist auch bei dieser relativ starken Kopplung von $U/t = 8$ im $q_{\perp} = 0$ -Kanal erkennbar (Abb. 4.2(a)), der eine schwach ausgeprägte, gaplose Mode enthält.

Abb. 4.2(c) und (d) zeigen die Ergebnisse der Ladungssuszeptibilität $\chi_c(\vec{q}, \omega)$. Für einen Impulsübertrag von $q_{\perp} = \pi$ tritt eine breite, q -unabhängige Anregung um $\omega \approx 9t$ auf, die der elementaren Ladungsanregung einer Sprosse entspricht und ebenso im halbgefüllten Fall vorhanden ist (Abb. 3.13(c)). Aufgrund des zunehmenden Vorzeichenproblems bei Dotierung ist hier keine entsprechend gute Auflösung wie bei Halbfüllung möglich. Interessant ist das Resultat im $q_{\perp} = 0$ -Kanal: Obwohl innerhalb des LRA-Bildes kein Signal auftreten sollte (analog zu $\chi_s(\vec{q}, \omega)$ vertauscht $O_c(q, q_{\perp} = 0)$ mit dem Hamiltonoperator H_0), ist eine deutlich ausgeprägte $\omega \rightarrow 0$ -Mode für $q \rightarrow 0$ mit einer Anregungsgeschwindigkeit von $v_c/t = 0.59 \pm 0.29$ zu erkennen, die bei Halbfüllung nicht vorhanden ist. Diese Mode spiegelt den Metall-Isolator-Übergang wieder, der bereits bei verschwindend kleiner Dotierung weg von Halbfüllung auftritt.

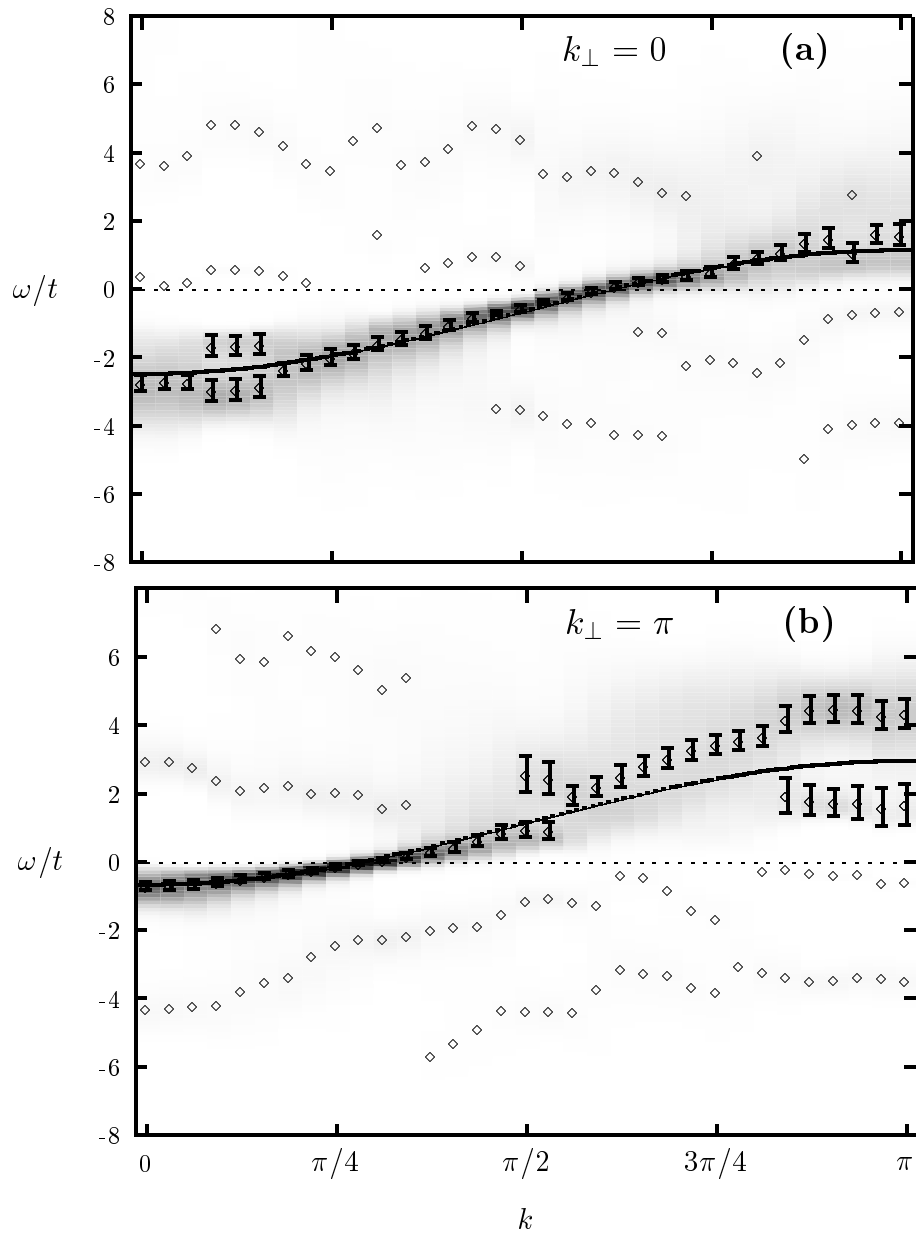


Abb. 4.3: Spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ für $t_{\perp}/t = 1$, $U/t = 4$ und $\beta t = 5$ in einem 2×64 -System mit einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.8776 \pm 0.0001$. Teil (a) zeigt den $k_{\perp} = 0$ -Kanal und Teil (b) den $k_{\perp} = \pi$ -Kanal. Die durchgezogene Linie ist das Ergebnis der Slave-Boson-Mean-Field-Berechnung.

4.2 Der Bereich mittlerer Dotierung

Im folgenden soll der Bereich mittlerer Dotierung $\langle n \rangle = 0.875$ im physikalisch relevanten, isotropen Fall $t_{\perp} = t$ betrachtet werden. Hierfür wurde ein 2×64 -System mit $U/t = 4$ und einer inversen Temperatur von $\beta t = 5$ simuliert. Aufgrund der Beschränkung durch das Vorzeichenproblem ist der Wert $\beta t = 5$ bei diesen Systemparametern die tiefste Temperatur, die sich mit derzeitigen Methoden in vertretbarem Rechenzeitaufwand erreichen läßt.

4.2.1 Die Einteilchen-Spektraldichte

Abb. 4.3 zeigt die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ für dieses System. Deutlich sind zwei verschiedenartige Strukturen zu erkennen: Der größte Anteil des spektralen Gewichtes ist in einer bandähnlichen, cosinus-förmigen Struktur enthalten, die sich im $k_{\perp} = 0$ -Kanal von $\omega \approx -2.8t$ bis $\omega \approx 1.6t$ und im $k_{\perp} = \pi$ -Kanal von $\omega \approx -0.7t$ bis $\omega \approx 4.4t$ erstreckt. Zum zweiten führt die Korrelation der Teilchen in beiden k_{\perp} -Kanälen zu einem breiten, inkohärenten Hintergrund mit geringem spektralem Gewicht, sowohl im Photoemissionsbereich ($\omega < 0$) als auch im inversen Photoemissionsbereich ($\omega > 0$). Dieser Hintergrund tritt analog in ein- und zweidimensionalen Hubbard-Modellen auf und wurde in einer Reihe von Arbeiten von R. Preuss et al. [60, 65] ausführlich untersucht.

Die Dispersion, die den größten Teil des spektralen Gewichtes enthält, entspricht qualitativ dem cosinus-Verhalten der wechselwirkungsfreien Bandstruktur, wobei die Wechselwirkung zu einer Renormierung der Bandbreite führt. Diese Renormierung läßt sich mit Hilfe der *Slave-Boson-Mean-Field* (SBMF) Methode beschreiben (siehe z.B. [73, 77, 78]): Mit Hilfe eines paramagnetischen Ansatzes folgt für die Dispersion

$$\varepsilon^{\text{SBMF}}(\vec{k}) = -z_+^2 (2t \cos k + t_{\perp} \cos k_{\perp}) + \lambda_0 - \mu, \quad (4.5)$$

mit dem Renormierungsfaktor z_+ und dem Lagrangemultiplikator λ_0 . Für $t_{\perp} = t$ und $U/t = 4$ ergeben sich bei der betrachteten Dotierung von $\langle n \rangle = 0.875$ folgende Werte [72]:

$$\begin{aligned} z_+^2 &= 0.9066, \\ \lambda_0/t &= 1.6040 \quad \text{und} \\ \mu/t &= 1.3728. \end{aligned}$$

Diese Dispersion ist in Abb. 4.3 eingezeichnet (durchgezogene Linie). Die Übereinstimmung ist in beiden k_{\perp} -Kanälen in der Nähe der Fermienergie (der Bereich bester Auflösung von MaxEnt) hervorragend. (Eine mögliche Aufspaltung der quasiteilchenähnlichen Struktur nahe der Fermikante in getrennte Spin- und Ladungsanregungen, die in einer eindimensionalen Luttinger-Flüssigkeit auftritt, kann aufgrund der statistischen Fehler der QMC-Daten und der dadurch reduzierten MaxEnt-Auflösung nicht beobachtet werden [60, 79].) Im höherenergetischen Bereich, vor allem bei $k = \pi$ im $k_{\perp} = \pi$ -Kanal, wird die Übereinstimmung der QMC-Daten mit der SBMF-Rechnung zunehmend schlechter. Dies lässt sich auf folgende Weise verstehen: Für diese Systemparameter ist analog zum halbgefüllten Fall ein sog. *spin-wave-shake-off*-Effekt zu erwarten: Eine selbstkonsistente diagrammatische Berechnung der Selbstenergie innerhalb eines SDW-Zustandes führt bei Halbfüllung zu zusätzlichen Beiträgen in der spektralen Dichte, die vor allem in den Zentren der magnetischen Brillouin-Zone, d.h. bei $k = 0$ und $k = \pi$ in beiden k_{\perp} -Kanälen, auftreten. Verantwortlich für diesen *shake-off*-Effekt ist die Diagrammklasse zur Beschreibung der transversalen magnetischen Fluktuationen (siehe hierzu [80]). Im dotierten Bereich ist immer noch eine kurzreichweitige antiferromagnetische Spinkorrelation vorhanden und somit der reminiscente Charakter einer Spin-Dichte-Welle. D.h. analog zum halbgefüllten Fall ist die Ausbildung eines *spin-wave-shake-off*-Effektes zu erwarten. Trotz der hohen Temperatur ($\beta t = 5$) der QMC-Simulation und des Vorzeichenproblems, welches zu starken Fluktuationen in den QMC-Daten führt, sind die Anzeichen hierfür in Abb. 4.3, vor allem bei $k = \pi$ im $k_{\perp} = \pi$ -Kanal, zu erkennen.

4.2.2 Die Random-Phase-Approximation

Die Spin- und Ladungsanregungen des obigen Systems lassen sich qualitativ mit Hilfe der *Random-Phase-Approximation* (RPA) verstehen. Die Grundzüge dieser Näherung sollen im folgenden aus diagrammatischer Sicht kurz erläutert werden: Innerhalb der RPA-Näherung wird die reine Coulomb-Wechselwirkung $V_{\sigma,\sigma'}^0(\vec{q}, \omega_n)$ im Impulsraum durch eine effektive Wechselwirkung $V_{\sigma,\sigma'}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n)$ ersetzt, in der Abschirmprozesse des korrelierten Vielteilchensystem berücksichtigt werden. Diagrammatisch lässt sich diese Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung durch Einschleiben von Elektron-Lochanregungen in die „nackte“ Wechselwirkung erreichen (siehe Abb. 4.4).

Somit folgt, unter Beachtung der Feynman-Regeln, für die abgeschirmte Wechselwir-

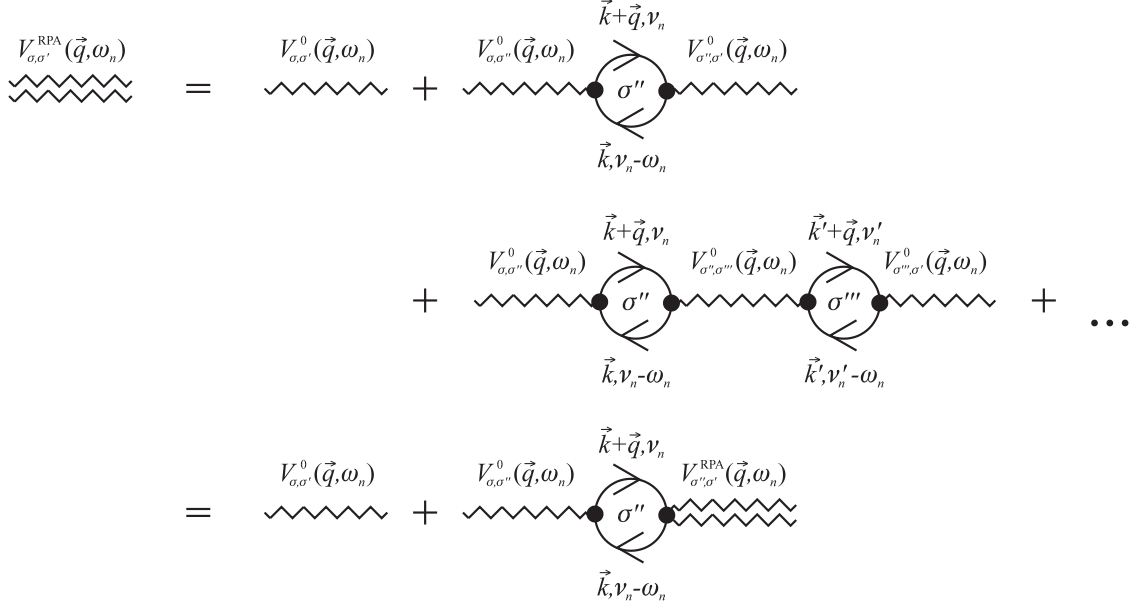


Abb. 4.4: Diagrammatische Entwicklung der effektiven Wechselwirkung $V_{\sigma,\sigma'}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n)$ innerhalb der RPA-Näherung.

kung $V_{\sigma,\sigma'}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n)$:

$$V_{\sigma,\sigma'}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n) = V_{\sigma,\sigma'}^0(\vec{q}, \omega_n) + \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}, \nu_n, \sigma''} V_{\sigma,\sigma''}^0(\vec{q}, \omega_n) \mathbf{G}_{0,\vec{k}}^{\sigma''}(\nu_n - \omega_n) \mathbf{G}_{0,\vec{k}+\vec{q}}^{\sigma''}(\nu_n) V_{\sigma'',\sigma'}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n), \quad (4.6)$$

wobei ω_n und ν_n die Matsubara-Frequenzen und $\mathbf{G}_{0,\vec{k}}^{\sigma}(\omega_n)$ die freien Propagatoren eines Teilchens mit Impuls \vec{k} und Spin σ sind. Mit Hilfe der Dichte-Response-Funktion des wechselwirkungsfreien Systems (Lindhard-Funktion),

$$\chi_0(\vec{q}, \omega_n) = -\frac{1}{N\beta} \sum_{\vec{k}, \nu_n} \mathbf{G}_{0,\vec{k}}^{\sigma}(\nu_n - \omega_n) \mathbf{G}_{0,\vec{k}+\vec{q}}^{\sigma}(\nu_n), \quad (4.7)$$

kann die Wechselwirkung $V_{\sigma,\sigma'}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n)$ folgendermaßen geschrieben werden ($\mathbf{G}_{0,\vec{k}}^{\sigma}(\omega_n)$ ist unabhängig von σ):

$$\mathbf{V}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n) = \mathbf{V}^0(\vec{q}, \omega_n) - N\chi_0(\vec{q}, \omega_n) \mathbf{V}^0(\vec{q}, \omega_n) \mathbf{V}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n). \quad (4.8)$$

Hier sind $\mathbf{V}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n)$ und $\mathbf{V}^0(\vec{q}, \omega_n)$ 2×2 -Matrizen im Spinraum und $\mathbf{V}^0 \mathbf{V}^{\text{RPA}}$ die entsprechende Matrixmultiplikation. Die letzte Gleichung 4.8 läßt sich nun nach \mathbf{V}^{RPA} auflösen:

$$\mathbf{V}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n) = \left[1 + N\chi_0(\vec{q}, \omega_n) \mathbf{V}^0(\vec{q}, \omega_n) \right]^{-1} \mathbf{V}^0(\vec{q}, \omega_n). \quad (4.9)$$

Im Fall der dreidimensionalen Coulomb-Wechselwirkung $V_{\sigma,\sigma'}^{\text{Coulomb}}(\vec{q}, \omega_n) = 4\pi e^2/q^2$ folgt beispielsweise für die abgeschirmte Wechselwirkung im langreichweitigen Limes ($r \rightarrow \infty$):

$$V_{TF}(r) \longrightarrow \frac{e^2}{r} e^{-\Gamma_{TF} r}, \quad (4.10)$$

wobei Γ_{TF} die Thomas-Fermi-Abschirmung bezeichnet [50, 81]. Für das hier betrachtete Hubbard-Modell mit nur lokaler Wechselwirkung U ist $\mathbf{V}^0(\vec{q}, \omega_n)$ gegeben durch:

$$V_{\sigma,\sigma'}^0(\vec{q}, \omega_n) = \frac{U}{N} \delta_{\sigma,-\sigma'}. \quad (4.11)$$

Somit folgt für $\mathbf{V}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n)$:

$$\mathbf{V}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n) = \frac{U}{N} \frac{1}{1 - U^2 (\chi_0(\vec{q}, \omega_n))^2} \begin{pmatrix} -U\chi_0(\vec{q}, \omega_n) & 1 \\ 1 & -U\chi_0(\vec{q}, \omega_n) \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Mit Hilfe dieser effektiven Wechselwirkung sollen nun die Ladungs- und Spinsuszeptibilitäten abgeleitet werden. Diese lassen sich in imaginärer Zeit auf folgende Weise schreiben (siehe auch Gl. 3.37):

$$\begin{aligned} N\chi_{c,s}(\vec{q}, \tau) &= \langle O_{c,s}(\vec{q}, \tau) O_{c,s}(-\vec{q}, 0) \rangle - \langle O_{c,s}(\vec{q}) \rangle^2 \delta_{\vec{q}=0} \\ &= \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} (\pm 1)^{\sigma+\sigma'} \langle c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger(\tau) c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}(\tau) c_{\vec{k}', \sigma'}^\dagger c_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'} \rangle - \langle O_{c,s}(\vec{q}) \rangle^2 \delta_{\vec{q}=0} \\ &= \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} (\pm 1)^{\sigma+\sigma'} \langle T_\tau [c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}(\tau) c_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}(0) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger(\tau+) c_{\vec{k}', \sigma'}^\dagger(0+)] \rangle \\ &\quad - \langle O_{c,s}(\vec{q}) \rangle^2 \delta_{\vec{q}=0}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Nach Anwendung der Feynman-Diagrammregeln und Transformation in den Matsubara-Frequenzraum bleiben bei Beschränkung auf die *Bubble*-Diagramme (linear in der effektiven Wechselwirkung $\mathbf{V}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n)$) zwei von Null verschiedene Terme erhalten (siehe Diagrammdarstellung in Abb. 4.5). Somit folgt:

$$\begin{aligned} N\chi_{c,s}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n) &= 2N\chi_0(\vec{q}, \omega_n) - \sum_{\sigma, \sigma'} (\pm 1)^{\sigma+\sigma'} V_{\sigma, \sigma'}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n) N^2 \chi_0(\vec{q}, \omega_n)^2 \\ &= 2N\chi_0(\vec{q}, \omega_n) \left(1 - \frac{U\chi_0(\vec{q}, \omega_n)}{2} \frac{\pm 2 - 2U\chi_0(\vec{q}, \omega_n)}{1 - U^2 (\chi_0(\vec{q}, \omega_n))^2} \right) \\ &= 2N\chi_0(\vec{q}, \omega_n) \frac{1 \pm U\chi_0(\vec{q}, \omega_n) \mp U\chi_0(\vec{q}, \omega_n)}{1 \pm U\chi_0(\vec{q}, \omega_n)}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$N\chi_{c,s}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n) = \text{Diagram 1} + (\pm 1)^{\sigma+\sigma'} \text{Diagram 2}$$

Abb. 4.5: Diagrammatische Entwicklung der Ladungs- und Spinsuszeptibilität $\chi_{c,s}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega_n)$ in RPA-Näherung.

Für reelle Werte von ω ($i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$) ergibt sich somit für die Ladungs- und Spinsuszeptibilität $\chi_{c,s}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega)$ im Frequenzraum:

$$\chi_{c,s}^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega) = \frac{2\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 \pm U\chi_0(\vec{q}, \omega)}. \quad (4.15)$$

(Ladungs- und Spin-Response in RPA)

In Abb. 4.6 ist dieses Ergebnis für das oben betrachtete 2×64 -System mit $U/t = 4$ im isotropen Fall $t_{\perp} = t$ bei einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.875$ dargestellt. Dabei zeigen die Teile (a) und (c) das Resultat der RPA-Berechnung für $T \rightarrow 0$ für beide Werte von q_{\perp} , wobei die Pole von $\chi_c^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega)$, d.h. die Nullstellen des Nenners in Gl. 4.15, durch Karos (\diamond) und die Größe des Imaginärteils von $\chi_c^{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega)$ durch die Stärke der Grauschattierung gekennzeichnet sind. Die Teile (b) und (d) der Abb. 4.6 zeigen die Berechnung von $\chi_c(\vec{q}, \omega)$ mit Hilfe der QMC/MaxEnt-Methode für eine inverse Temperatur von $\beta t = 5$. Abgesehen von dem durch die Statistik bedingten Rauschen in den QMC-Daten ist die Übereinstimmung hervorragend. Im $q_{\perp} = 0$ -Kanal läßt sich in den QMC-Daten eine deutliche Mode erkennen, die sich von $\omega = 0$ bei $q = 0$ bis $\omega \approx 5t$ bei $q = \pi$ erstreckt. Für $q \rightarrow 0$ entspricht diese Mode einer Ladungsgeschwindigkeit von $v_c/t = 1.74 \pm 0.17$. Dies ist analog zur RPA-Berechnung, bei der sich der größte Teil des spektralen Gewichtes in einer bandähnlichen Struktur befindet, die qualitativ mit den QMC-Daten übereinstimmt. Die RPA zeigt zudem ein breites Spektrum unterhalb dieser stark ausgeprägten Mode mit zwei zusätzlichen gaplosen Anregungen bei $q_1 = 17\pi/32$ und $q_2 = 25\pi/32$. Diese beiden zusätzlichen $q \rightarrow 0$ Moden sind ebenfalls andeutungsweise in den QMC-Daten vorhanden, jedoch aufgrund des QMC-Rauschens und des geringen Anteils an spektralem Gewicht nicht deutlich aufgelöst.

Ein entsprechendes Bild zeigt der $q_{\perp} = \pi$ -Kanal (Abb. 4.6 (c) und (d)). Der größte Teil des spektralen Gewichtes liegt in beiden Fällen (RPA und QMC) in einer deutlich

ausgeprägten bandähnlichen Struktur, die sich von $\omega \approx 2.5t$ bei $q = 0$ bis $\omega \approx 6t$ bei $q = \pi$ erstreckt. Unterhalb dieser Mode ist im Fall der RPA-Näherung ein breites Spektrum mit zwei gaplosen Anregungen bei $q_3 = 11\pi/32$ und $q_4 = 28\pi/32$ zu erkennen. Die QMC-Daten (Abb. 4.6(d)) zeigen wieder andeutungsweise diese Struktur.

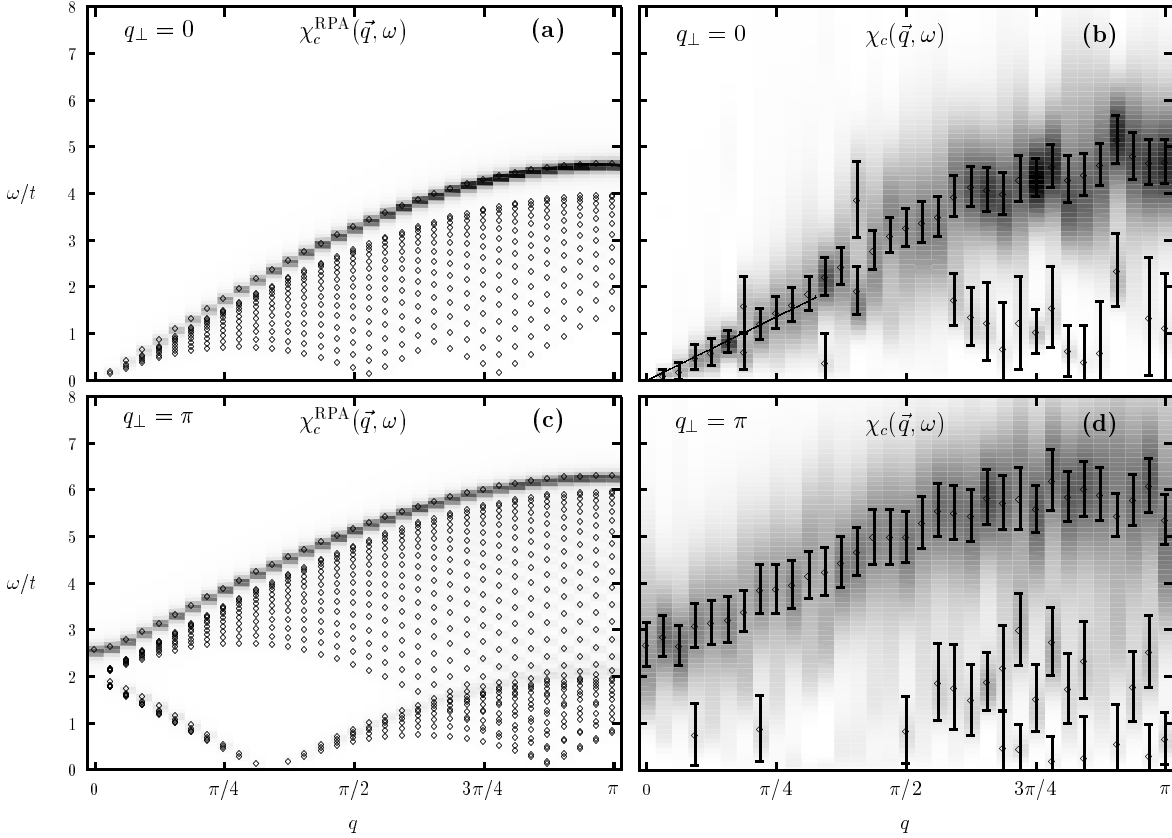


Abb. 4.6: Ladungssuszeptibilität $\chi_c(\vec{q}, \omega)$ für den isotropen Fall $t_\perp = t$ mit $U/t = 4$ in einem 2×64 -System und einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.875$. In den Teilen (a) und (c) ist für beide q_\perp -Kanäle das Ergebnis der RPA-Näherung für $T = 0$ dargestellt (Grauschattierung und Karos \diamond), während die Teile (b) und (d) die QMC-Ergebnisse für $\beta t = 5$ zeigen.

Das zusätzliche Auftreten der gaplosen Anregungen in den RPA-Daten bei q_1 und q_2 im $q_\perp = 0$ -Kanal sowie bei q_3 und q_4 im $q_\perp = \pi$ -Kanal läßt sich bereits durch die wechselwirkungsfreie Bandstruktur des Systems verstehen. Abb. 4.7 zeigt das bindende ($k_\perp = 0$) und antibindende ($k_\perp = \pi$) Band $\varepsilon(k)$ ohne eingeschaltete Wechselwirkung ($U = 0$) mit den entsprechenden Fermivektoren k_{F_1} und k_{F_2} . Aus dieser Darstellung wird deutlich, daß insgesamt vier gaplose, elementare Anregungen möglich sind, und zwar zwei innerhalb eines Bandes (Intraband-Anregungen) und zwei zwischen den

Bändern (Interband-Anregungen). Die beiden Intraband-Anregungen ($q_{\perp} = 0$) liegen dabei im $k = \pi$ -Band bei $q_1 = 2k_{F_2}$ und im $k_{\perp} = 0$ -Band bei $q_2 = 2\pi - 2k_{F_1}$ (über den Rand der Brillouinzone). Die Interband-Anregungen ($q_{\perp} = \pi$) ergeben sich aus Abb. 4.7 zu $q_3 = k_{F_1} - k_{F_2}$ und $q_4 = k_{F_1} + k_{F_2}$. Diese vier lückenlosen Anregungen sind der Ursprung der oben beschriebenen, zusätzlichen $\omega \rightarrow 0$ -Moden im Ladungsspektrum.

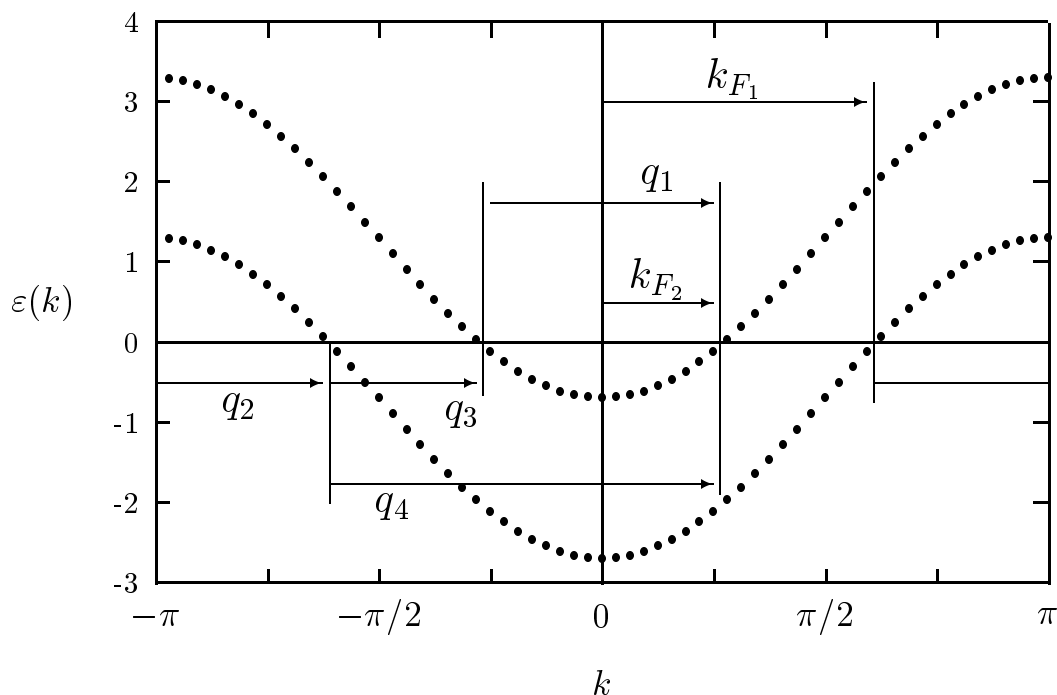


Abb. 4.7: Bandstruktur für den wechselwirkungsfreien Fall ($U = 0$) in einem 2×64 -System mit $t_{\perp}/t = 1.0$ und einer Teilchendichte von $\langle n \rangle = 0.875$.

Abb. 4.8 zeigt das QMC-Ergebnis sowie die RPA-Berechnung der Spinsuszeptibilität $\chi_s(\vec{q}, \omega)$ für die gleichen Parameterwerte. Die Darstellung ist dabei analog zu Abb. 4.6. Die Übereinstimmung der RPA- und QMC-Berechnung ist hier nur noch qualitativ vorhanden. Im $q_{\perp} = 0$ -Kanal ist in den QMC-Daten eine einzelne $\omega \rightarrow 0$ -Mode sichtbar, die bis $\omega \approx 1.5t$ bei $q = \pi$ verläuft. Im Gegensatz hierzu zeigt die RPA-Näherung ein breites Spektrum, welches sich bis $\omega \approx 4t$ bei $q = \pi$ erstreckt, wobei der größte Teil des spektralen Gewichtes in zwei zusätzlichen, gaplosen Moden mit Polen bei $q_5 \approx 13\pi/32$ und $q_6 \approx 27\pi/32$ enthalten ist. Die Abweichung der beiden Ergebnisse läßt sich folgendermaßen verstehen: Zum einen führt die hohe Temperatur der QMC-Simulation ($\beta t = 5$) zu einer künstlichen Verbreiterung der Strukturen, so daß die einzelnen Pole selbst bei exakten Daten (frei von statistischen Fehlern) nicht mehr

aufgelöst werden können. Zum zweiten ist aus DMRG-Berechnungen bekannt [31], daß selbst bei Dotierung eine endliche Spinlücke in gekoppelten Hubbard-Ketten vorhanden ist. Dieses Spingap darf aufgrund der Fermi-Flüssigkeitseigenschaft der RPA-Theorie nicht in den RPA-Daten erwartet werden, führt jedoch in der exakten QMC-Simulation zum Verschwinden der stark ausgeprägten $q \rightarrow 0$ -Moden bei q_5 und q_6 .

Im $q_{\perp} = \pi$ -Kanal (Abb. 4.8 (c) und (d)) zeigt die RPA-Näherung drei gaplose Anregungen an den Stellen $q_7 \approx 11\pi/32$, $q_8 \approx 20\pi/32$ und $q_9 \approx 28\pi/32$. In den QMC-Daten ist davon lediglich das obere Ende der q_7 -Dispersion, welches für $q \rightarrow 0$ bei $\omega \approx t$ liegt, deutlich erkennbar. Der größte Teil des spektralen Gewichtes ist im Gegensatz zur RPA-Näherung in den QMC-Daten jedoch im $q_{\perp} = \pi$ Kanal für große Werte von $q \lesssim \pi$ um $\omega \approx 0.5t$ konzentriert. Diese Verteilung des spektralen Gewichtes im $q_{\perp} = \pi$ -Kanal ist mit der cosinus-Dispersion bei kleiner Dotierung (Abb. 4.2 (b)) vergleichbar und entspricht der Propagation eines Triplet-Zustandes auf einer Sprosse in einem Spin-Singulett Hintergrund. Die QMC-Daten für $\chi_s(\vec{q}, \omega)$ zeigen somit in beiden q_{\perp} -Kanälen Anzeichen für das Auftreten eines Spingaps.

4.3 Supraleitende Ordnung in dotierten Hubbard-Ketten

Dieser Abschnitt beschäftigt sich mit der möglichen Existenz eines Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs in gekoppelten Hubbard-Ketten. Dabei findet ein von F.F. Assaad et al. [27, 82, 83] entwickeltes Verfahren Anwendung, welches direkt die Bestimmung der superfluiden Dichte eines Systems erlaubt. Hierzu wird das Leitersystem auf die Geometrie eines Zylinders abgebildet (siehe Abb. 4.9), der von einem magnetischen Fluß $\Phi = \int_F \vec{B} \cdot d\vec{f}$ durchsetzt wird. Ein Teilchen mit Ladung $+e$, welches auf der Zylinderoberfläche um eine Flußlinie bewegt wird, erhält dabei eine zusätzliche Phase $e^{-ie\Phi/\hbar c} = e^{-2\pi i\Phi/\Phi_0}$ (siehe auch [84]), wobei $\Phi_0 = hc/e$ das elementare Flußquantum ist. Der Hamiltonoperator dieses Ein-Band-Hubbard-Modells mit angelegtem Magnetfeld in Richtung der Ketten läßt sich dann folgendermaßen schreiben:

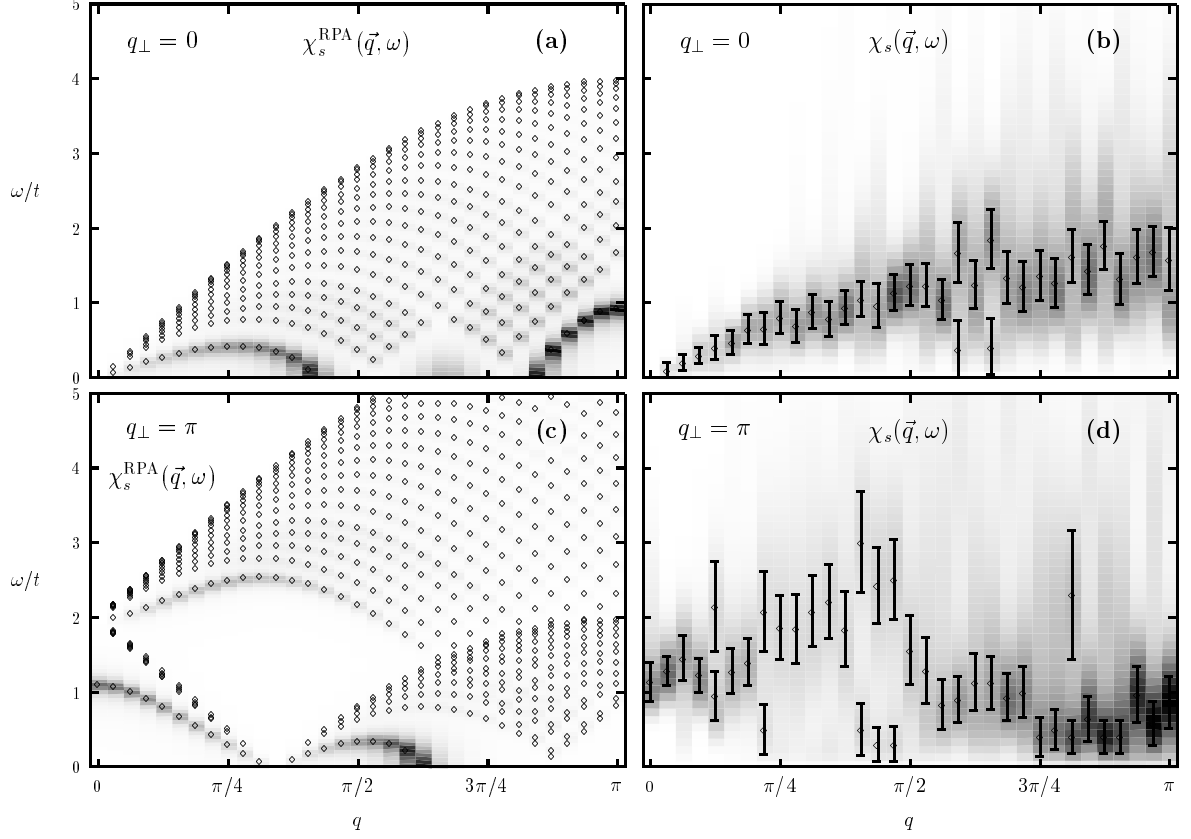


Abb. 4.8: Spinsuszeptibilität $\chi_s(\vec{q}, \omega)$ für den isotropen Fall $t_\perp = t$ mit $U/t = 4$ in einem 2×64 -System und einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.875$. In den Teilen (a) und (c) ist für beide q_\perp -Kanäle das Ergebnis der RPA-Näherung für $T = 0$ dargestellt (Grauschattierung und Karos \diamond), während die Teile (b) und (d) die QMC-Ergebnisse für $\beta t = 5$ zeigen.

$$\begin{aligned}
 H(\Phi) = & -t \sum_{i, \lambda \sigma} \left(e^{\frac{2\pi i}{L} \frac{\Phi}{\Phi_0}} c_{i, \lambda \sigma}^\dagger c_{i+1, \lambda \sigma} + e^{-\frac{2\pi i}{L} \frac{\Phi}{\Phi_0}} c_{i+1, \lambda \sigma}^\dagger c_{i, \lambda \sigma} \right) \\
 & - t_\perp \sum_{i, \sigma} (c_{i, 1\sigma}^\dagger c_{i, 2\sigma} + h.c.) + U \sum_{i\lambda} n_{i, \lambda \uparrow} n_{i, \lambda \downarrow}.
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Die superfluide Dichte D_S kann hieraus durch Entwicklung der freien Energie,

$$F(\Phi) = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} e^{-\beta(H(\Phi) - \mu \hat{N})}, \tag{4.17}$$

bis zur zweiten Ordnung im angelegten magnetischen Fluß abgeleitet werden:

$$F(\Phi) - F(\Phi = 0) = (\Phi/\Phi_0)^2 D_S(\beta) + \mathcal{O}((\Phi/\Phi_0)^4). \tag{4.18}$$

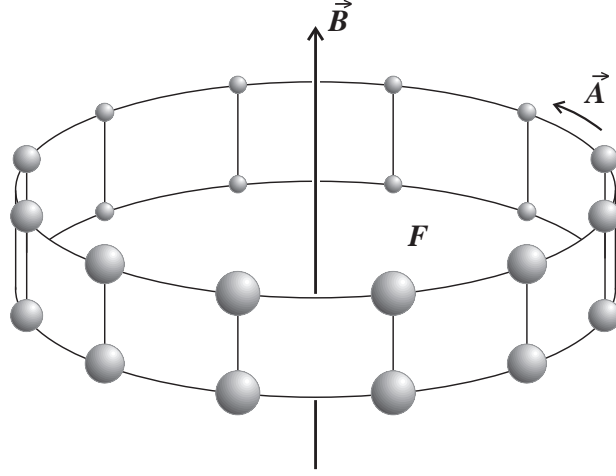


Abb. 4.9: Geometrie eines Leitersystems bei angelegtem äußeren Magnetfeld senkrecht zu den Ketten.

Somit folgt für die Differenz der inneren Energie $E = \partial(\beta F)/\partial\beta$ mit und ohne angelegtem Magnetfeld:

$$\begin{aligned} E(\Phi) - E(\Phi = 0) &= \frac{\partial}{\partial\beta} (\beta F(\Phi) - \beta F(\Phi = 0)) \\ &= \frac{\partial}{\partial\beta} (\beta D_S(\beta)) (\Phi/\Phi_0)^2 + \mathcal{O}((\Phi/\Phi_0)^4). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Die linke Seite der obigen Gleichung lässt sich direkt mit Hilfe eines komplexen QMC-Verfahrens (siehe Kapitel 2) numerisch berechnen. Die rechte Seite beinhaltet die Ableitung der superfluiden Dichte nach der Temperatur, $\partial(\beta D_S)/\partial\beta$. Im Fall eines Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs ist ein Sprung in der superfluiden Dichte bei der Übergangstemperatur T_{KT} zu erwarten. Dies führt auch für endliche Systeme zu einem δ -förmigen Signal in $\partial(\beta D_S)/\partial\beta$ bei T_{KT} [27, 83], das mit Hilfe einer QMC-Simulation nachgewiesen werden kann.

In Abb. 4.10 ist die Energiedifferenz $E(\Phi) - E(0)$ für $\Phi/\Phi_0 = 0.25$, d.h. die Ableitung der superfluiden Dichte nach der Temperatur, für ein System aus gekoppelten Hubbard-Ketten bei einer mittleren Teilchenzahl von $\langle n \rangle = 0.75$ und einer isotropen, physikalisch relevanten Kopplung von $t_\perp = t$ dargestellt. Die Simulation wurde für verschiedene Systemgrößen (2×8 , 2×16 und 2×24) bis zu einer maximalen inversen Temperatur von $\beta t = 10$ durchgeführt. Abb. 4.10(a) zeigt das Ergebnis für eine repulsive Hubbard-Wechselwirkung $U/t = 4$, während in Teil (b) der wechselwirkungsfreie Fall $U/t = 0$ abgebildet ist.

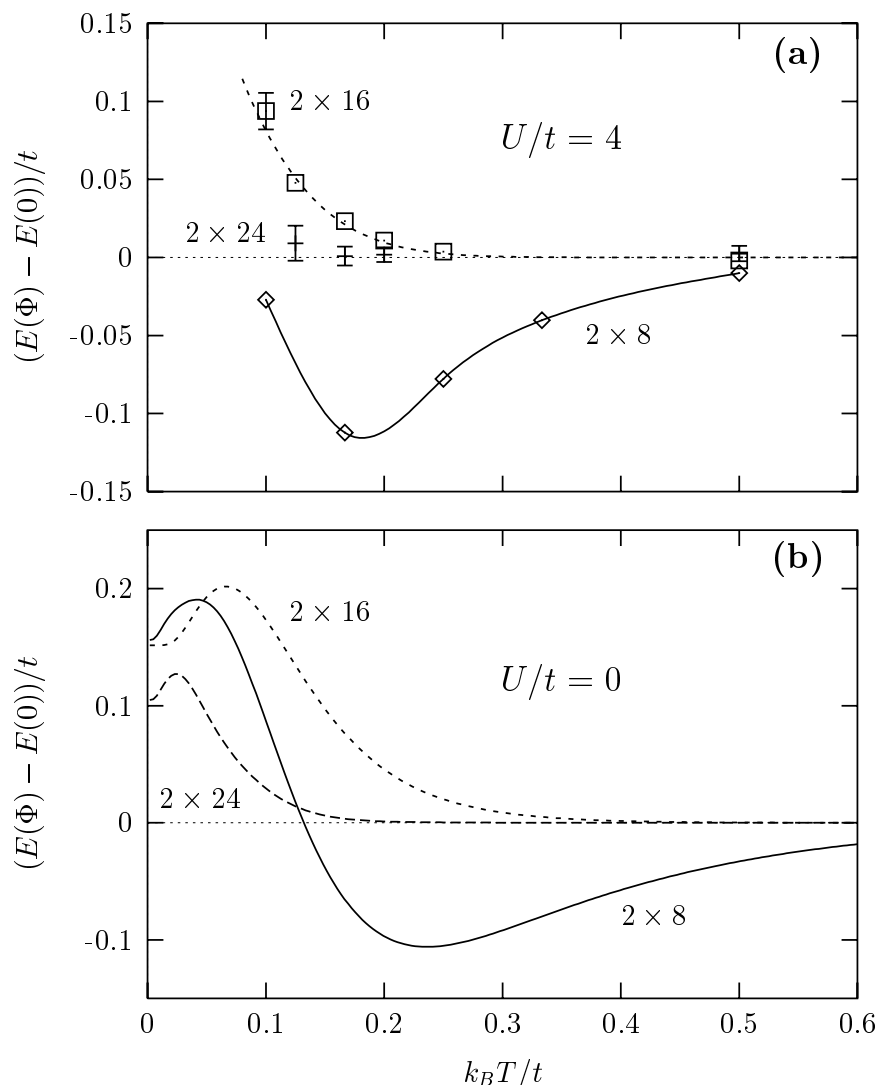


Abb. 4.10: Ableitung der superfluiden Dichte nach der Temperatur für $t_{\perp}/t = 1$ bei einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.75$. Teil (a) zeigt das Ergebnis der QMC-Berechnung für $U/t = 4$ und Teil (b) die finite-size-Abhängigkeit des wechselwirkungsfreien Falls ($U/t = 0$).

Der Vergleich der Ergebnisse für $U/t = 4$ und $U/t = 0$ macht deutlich, daß der beobachtete Anstieg der Ableitung der superfluiden Dichte bei $k_B T/t \approx 0.1 \dots 0.2$ für das 2×16 -System (Abb. 4.10(a)) lediglich auf die endliche Systemgröße zurückzuführen ist: Das Verhalten des Systems bei eingeschalteter Wechselwirkung $U/t = 4$ ist analog zum wechselwirkungsfreien Fall, bei dem sicherlich keine supraleitende Ordnung vorliegt. Dieser *finite-size*-Effekt wird durch den Rückgang des Anstiegs im 2×24 -System zusätzlich untermauert. Ein möglicher Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang kann also

höchstens bei Temperaturen $k_B T/t \ll 0.1$ auftreten, die der großkanonischen QMC-Simulation aufgrund des Vorzeichenproblems nicht zugänglich sind.

Um zu klären, ob ein supraleitender Phasenübergang bei tieferen Temperaturen vorliegt, muß somit ein komplexer Projektor-QMC-Algorithmus angewandt werden [27, 82]. Auf diese Weise läßt sich die Flußquantisierung, d.h. die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie vom magnetischen Fluß Φ , untersuchen, die direkt Auskunft über eine zugrundeliegende supraleitende Ordnung gibt [27, 82, 84].

4.4 Kleine Kopplungsstärke $t_{\perp} \ll t$ – Kohärenz und Inkohärenz

In einer Reihe von Arbeiten von P.W. Anderson et al. (siehe z.B. [19, 20] und darin enthaltene Referenzen) wird auf das mögliche Auftreten von inkohärentem Einteilchen-Hüpfen zwischen zwei Ketten von gekoppelten Luttinger-Flüssigkeiten hingewiesen, welches im Widerspruch zu dem gewöhnlichen Fermi-Flüssigkeitsverhalten steht. Ein derartiges inkohärentes Einteilchen-Hüpfen ist ebenso zwischen zwei Kupferoxid-Ebenen der HTSL denkbar, falls sich das eindimensionale Konzept der Luttinger-Flüssigkeit auf zwei Dimensionen extrapolieren läßt (siehe hierzu z.B. [22]). Ein System aus inkohärent gekoppelten Luttinger-Flüssigkeiten ist nicht in der Lage, die Gesamtenergie durch kohärentes Einteilchen-Hüpfen zu senken. Jedoch ist eine Energie-Absenkung durch kohärentes Paarhüpfen möglich, und somit eine Stabilisierung des Paarungsprozesses. D.h. eine inkohärente Kopplung zwischen den CuO_2 -Ebenen stellt ein mögliches physikalisches Szenario dar, um die hohen Sprungtemperaturen der Mehrschicht-HTSL theoretisch zu klären [18].

Ein inkohärentes Einteilchen-Hüpfen führt ferner zu *keiner* Aufspaltung der Fermifläche zwischen bindenden und antibindenden Bändern. Die Existenz dieser Aufspaltung wird zwar durch Bandstruktur-Rechnungen vorhergesagt [85, 86], jedoch ist die Frage nach einer oder zwei Fermiflächen experimentell noch nicht endgültig geklärt (die Gruppe von X. Shen [87] beobachtet zwar diese Aufspaltung, während Ding et al. [88, 89] eine *einzelne* Fermifläche in ihren Photoemissionsdaten sehen). Als weiterer experimenteller Hinweis auf inkohärentes Verhalten kann die anomale c -Achsen-Leitfähigkeit gesehen werden, deren Frequenzabhängigkeit keinen Drudepeak aufweist [90–92], der im Fall einer kohärenten Ebenenkopplung zu erwarten wäre.

4.4.1 Das Zwei-Niveau-System

Als Beispielmodell, mit dessen Hilfe sich inkohärentes Verhalten veranschaulichen läßt, soll zunächst das Zwei-Niveau-System (*Two-level-System*, TLS) betrachtet werden [20, 93]. Der Hamiltonoperator dieses Systems läßt sich folgendermaßen schreiben:

$$H_{\text{TLS}} = \frac{\Delta}{2}\sigma_x + \sum_i \left\{ \frac{1}{2}m_i\omega_i^2 x_i^2 + \frac{1}{2}p_i^2/m_i \right\} + \frac{1}{2}\sigma_z \sum_i C_i x_i. \quad (4.20)$$

Dabei sind $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ und $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ die gewöhnlichen Pauli-Matrizen und x_i bzw. p_i die Orts- und Impulsoperatoren eines Bades aus harmonischen Oszillatoren mit den Massen m_i und Eigenfrequenzen ω_i . Der Hamiltonoperator beschreibt somit zwei Energieniveaus $+\Delta/2$ und $-\Delta/2$, die über die Konstanten C_i mit dem Bad aus Oszillatoren gekoppelt sind.

Das System wird zunächst zur Zeit $\tau_0 = 0$ im Zustand $|\uparrow\rangle$ präpariert, d.h. in einem Eigenzustand von σ_z . Betrachtet wird schließlich die Wahrscheinlichkeit $P(\tau)$, das System zur Zeit $\tau > 0$ wieder im Zustand $|\uparrow\rangle$ anzutreffen. Dabei ist $P(\tau)$ gegeben durch

$$P(\tau) = \frac{1}{2} (\langle \sigma_z(\tau) \rangle + 1), \quad (4.21)$$

wobei $\langle \sigma_z(\tau) \rangle$ der Erwartungswert des Operators σ_z zur Zeit τ ist, d.h.

$$\langle \sigma_z(\tau) \rangle = \langle \uparrow | e^{iH\tau} \sigma_z e^{-iH\tau} | \uparrow \rangle. \quad (4.22)$$

Für den freien Fall $C_i \equiv 0$ (ohne Kopplung zu den harmonischen Oszillatoren) läßt sich $\langle \sigma_z(\tau) \rangle$ leicht bestimmen. In Matrixschreibweise gilt:

$$e^{-iH\tau} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left\{ e^{-i\Delta\tau/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{i\Delta\tau/2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\}. \quad (4.23)$$

Somit folgt

$$\langle \sigma_z(\tau) \rangle = \cos \Delta\tau. \quad (4.24)$$

Der Erwartungswert von σ_z zeigt also oszillatorisches Verhalten mit der Frequenz Δ . Dies läßt sich auf folgende Weise verstehen: Zur Zeit $\tau = 0$ wurde das System in einem Zustand präpariert, der eine Superposition der beiden Eigenzustände des Hamiltonoperators ist. Diese beiden Zustände besitzen verschiedene Energien und somit verschiedene, aber wohldefinierte Phasen. Die quantenmechanische Interferenz der beiden Zustände mit fester Phasenbeziehung führt zu der beobachteten Oszillation.

Diese Oszillation bleibt beim Einschalten einer schwachen Kopplung C_i zunächst erhalten, wird jedoch durch den Energieaustausch mit dem Oszillatoren-Bad gedämpft. Falls diese Dämpfung, d.h. die Stärke der Kopplungen C_i , groß genug ist, kommt kein Interferenzeffekt mehr zustande und der Erwartungswert von σ_z verschwindet exponentiell ($\langle \sigma_z(\tau) \rangle \sim e^{-\Gamma\tau}$) [20]. Ein Analogon aus der klassischen Mechanik ist der gedämpfte, harmonische Oszillator, der bei großer Dämpfung vom *Schwingfall* in den *Kriechfall* übergeht (siehe z.B. [94]). Das Verhalten des Systems wird als *kohärent* bezeichnet, falls $\langle \sigma_z(\tau) \rangle$ und damit $P(\tau)$ einen oszillatorischen Anteil enthält, ansonsten liegt *Inkohärenz* vor.

4.4.2 Analyse des Ein-Band-Hubbard-Modells

Die eben beschriebenen Ergebnisse des Zwei-Niveau-Systems können nicht präzise auf das Ein-Band-Hubbard-Modell für gekoppelte Ketten abgebildet werden, jedoch ist ein Analogieschluß möglich. Der Hamiltonoperator aus Gl. 1.2 des Leitersystems ist gegeben durch

$$H = \underbrace{H_{1D}^{(1)} + H_{1D}^{(2)}}_{H_{1D}} - t_{\perp} \sum_{i,\sigma} (c_{i,1\sigma}^{\dagger} c_{i,2\sigma} + h.c.), \quad (4.25)$$

wobei $H_{1D}^{(\lambda)}$ jeweils der gesamte Hamiltonoperator (mit Wechselwirkungstermen) einer isolierten Kette $\lambda = 1, 2$ ist. Dabei entspricht die Teilchendifferenz $\Delta N = N_1 - N_2$, wobei N_{λ} für die Anzahl der Teilchen auf Kette λ steht, dem Erwartungswert $\langle \sigma_z(\tau = 0) \rangle$. Die Rolle des Bades aus Oszillatoren wird hier von bosonischen Spin- und Ladungsanregungen übernommen, die in den beiden Ketten bei $t_{\perp} = 0$ vorliegen. Da das Hüpfen eines Teilchens von einer Kette in die Zweite das „Aufbrechen“ dieser *Spinonen* bzw. *Holonen* notwendig macht, führt die Ausbildung einer Luttinger-Flüssigkeit in den einzelnen Ketten zu einer Dämpfung des Ausgleichs einer Teilchenzahldifferenz ΔN . Als ein Maß für die Stärke der Dämpfung kann der universelle Parameter α angesehen werden (in niedrigster Ordnung Störungsrechnung ist die Trennung der Spin- und Ladungsgeschwindigkeit $v_c - v_s$ proportional zu $\sqrt{\alpha}$ [19]), der zudem die Zustandsdichte $N(\omega) = |\omega|^{\alpha}$ einer Luttinger-Flüssigkeit an der Fermikante beschreibt [95]. Auf den Einfluß dieser anomalen Dimension α auf die Natur des Einteilchen-Hüpfens zwischen den Ketten wird in Abschnitt 4.4.3 noch näher eingegangen.

Im folgenden sollen nun verschiedene Meßgrößen vorgestellt werden, mit deren Hilfe derart ungewöhnliches, inkohärentes Einteilchen-Hüpfen numerisch nachgewiesen werden kann. Der erste numerische Versuch, gekoppelte Ketten auf inkohärentes Verhalten zu untersuchen, wurde von F. Mila und D. Poilblanc [21] durchgeführt. Die Autoren berechneten im tJ -Modell eine zu Gl. 4.21 analoge Wahrscheinlichkeit $\tilde{P}(\tau)$, die folgendermaßen definiert ist:

$$\tilde{P}(\tau) = |\langle L_1 L_2 | e^{iH_{1D}\tau} e^{-iH\tau} | L_1 L_2 \rangle|^2. \quad (4.26)$$

(Diagnostic Operator I)

Das System wird zur Zeit $\tau = 0$ in einem Eigenzustand $|L_1 L_2\rangle = |L_1\rangle \otimes |L_2\rangle$ des Hamiltonoperators H_{1D} (siehe Gl. 4.25), der zwei isolierte Ketten beschreibt, mit einer Teilchenzahldifferenz $\Delta N \neq 0$ zwischen beiden Ketten präpariert. Bei eingeschaltetem t_{\perp} propagiert dieser Zustand für die Zeit τ , so daß $\tilde{P}(\tau)$ die Wahrscheinlichkeit angibt, das System zur Zeit $\tau > 0$ wieder im Zustand $|L_1 L_2\rangle$ zu finden. Der Faktor $e^{iH_{1D}\tau}$ in Gl. 4.26 dient dabei lediglich der Normierung von $\tilde{P}(\tau)$ und ist so gewählt, daß $\tilde{P}(\tau) \equiv 1$ ist für $t_{\perp} = 0$.

Bei eingeschaltetem t_{\perp} wird die Teilchenzahldifferenz ΔN für $\tau \rightarrow \infty$ ausgeglichen, d.h. $\tilde{P}(\tau \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Findet dieser Ausgleich der Teilchenzahl kohärent statt, so ist zusätzlich zum zeitlichen Abfall von $\tilde{P}(\tau)$ ein oszillatorisches Verhalten zu erwarten. Im inkohärenten Fall fällt $\tilde{P}(\tau)$ ohne zusätzliche Oszillation auf Null ab. Die Frage, ob ein inkohärentes Einteilchen-Hüpfen vorliegt, kann somit durch direktes Betrachten der Zeitabhängigkeit von $\tilde{P}(\tau)$ geschehen. Einfacher ist die Untersuchung der Fourier-Transformierten $\tilde{P}(E) = \int_0^{\infty} \tilde{P}(\tau) e^{iE\tau} d\tau$, die nur im Fall von kohärentem Hüpfen einen isolierten Peak bei endlichen Werten von E aufweist.

F. Mila und D. Poilblanc [21] fanden durch Untersuchung dieser Größe $\tilde{P}(\tau)$ im tJ -Modell kohärentes Verhalten für integrable Werte von J , d.h. für $J/t = 0$ und $J/t = 2$, ansonsten verhält sich das System stets inkohärent. Die Natur des Einteilchen-Hüpfens im tJ -Modell ist somit abhängig von der Integrabilität des eindimensionalen Systems und hängt nicht vom Parameter α ab, der für $0 \leq J/t \leq 2$ im Intervall $[0, 1/8]$ liegt.

Allerdings ist der Zustand $|L_1L_2\rangle$ vom Gleichgewichtszustand des Systems bei $t_\perp \neq 0$ weit entfernt. D.h. beim Einschalten von t_\perp zeigt die Größe $\tilde{P}(\tau)$ neben dem Ausgleich der Teilchenzahldifferenz auch noch den Übergang des Systems von einem Eigenzustand der beiden isolierten Ketten zu einem Eigenzustand des Gesamtsystems mit endlichem t_\perp . Besser ist es somit, eine Teilchenzahldifferenz ΔN im bereits vorhandenen Gleichgewichtszustand des Gesamtsystems zu erzeugen. Die entsprechende Größe $P(\tau)$, die zum Nachweis von Kohärenz bzw. Inkohärenz herangezogen werden kann, ist dabei gegeben durch [96, 97]:

$$P_{1,2}(\tau) = |\langle c_{k,(1,2)\uparrow}(\tau)c_{k,1\uparrow}^\dagger \rangle|^2. \quad (4.27)$$

(Diagnostic Operator II)

Die spitzen Klammern $\langle \dots \rangle$ beziehen sich hierbei auf den (großkanonischen) Erwartungswert des Gesamtsystems, d.h. bereits bei eingeschaltetem $t_\perp \neq 0$. Ferner ist $c_{k,\lambda\sigma} = \sum_i e^{ikr_i} c_{i,\lambda\sigma} / \sqrt{L}$ der Fourier-Transformierte Fermionenvernichter auf der Kette λ . Im Limes $\beta \rightarrow \infty$ beschreibt Gl. 4.27 somit die Propagation des Zustandes $c_{k,1\uparrow}^\dagger |\psi_0\rangle$, wobei $|\psi_0\rangle$ der tatsächliche Grundzustand des Gesamtsystems ist. $P_{1,2}(\tau)$ gibt schließlich die Wahrscheinlichkeit an, das System zur Zeit $\tau > 0$ wieder im Zustand $c_{k,1\uparrow}^\dagger |\psi_0\rangle$ ($P_1(\tau)$) oder im Zustand $c_{k,2\uparrow}^\dagger |\psi_0\rangle$ ($P_2(\tau)$) zu finden, der durch das Hüpfen des erzeugten Teilchens auf die Kette $\lambda = 2$ entsteht. Das Einteilchen-Hüpfen zwischen den Ketten verläuft kohärent, wenn $P_1(\tau)$ oder $P_2(\tau)$ oszillatorisches Verhalten aufweisen, ansonsten liegt eine inkohärente Kopplung der beiden Ketten vor. Dieser „*Diagnostic Operator*“ für inkohärentes Verhalten läßt sich im Energieraum außerdem mit Hilfe der spektralen Dichte $A(k, k_\perp, \omega)$ des Systems ausdrücken (siehe Anhang C):

$$P_{1,2}(E) = \frac{\pi}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{1,2}(k, \omega)}{1 + e^{-\beta\omega}} \frac{A_{1,2}(k, \omega - E)}{1 + e^{-\beta(\omega - E)}} d\omega \quad (4.28)$$

mit

$$A_{1,2}(k, \omega) = \frac{1}{2} (A(k, k_\perp = 0, \omega) \pm A(k, k_\perp = \pi, \omega)). \quad (4.29)$$

Für große Werte der inversen Temperatur β ($T \rightarrow 0$) vereinfacht sich diese Gleichung zu

$$P_{1,2}(E) = \frac{\pi}{4} \int_E^\infty A_{1,2}(k, \omega) A_{1,2}(k, \omega - E) d\omega. \quad (4.30)$$

Der Wert von k sollte dabei so gewählt werden, daß zum einen k möglichst nahe an der Fermikante ist, und zum zweiten der Hauptteil des spektralen Gewichtes für beide Werte von k_\perp (0 und π) im inversen Photoemissionsbereich des Spektrums liegt, um ein möglichst großes Signal in $P_{1,2}(E)$ zu gewährleisten.

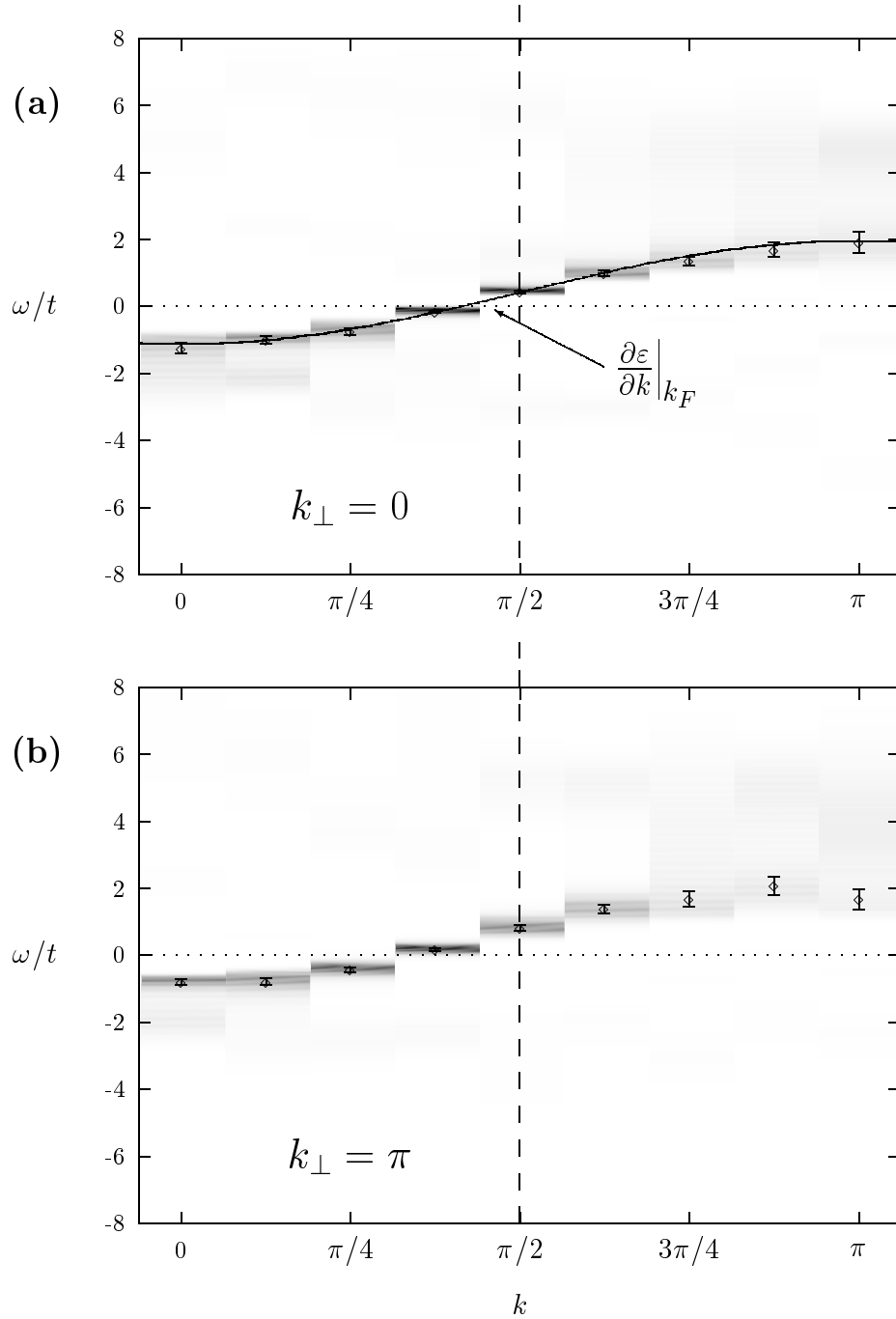


Abb. 4.11: QMC-Ergebnis der spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ für alle möglichen Werte von $\vec{k} = (k, k_{\perp})$ in einem 2×16 -System mit $U/t = 4$, $V_r/t = 0$ und $t_{\perp}/t = 0.2$ bei einer inverse Temperatur von $\beta t = 10$ und einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.75$. Teil (a) und (b) zeigen jeweils das Resultat für $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \pi$, wobei die vertikale, gestrichelte Linie denjenigen k -Wert markiert, der für die Auswertung von $P_{1,2}(E)$ (siehe Text) herangezogen wurde.

Im folgenden soll das Verhalten von $P_{1,2}(E)$ für einen Parametersatz mit einem relativ hohen Wert von $t_{\perp}/t = 0.2$, bei dem kohärentes Verhalten zu erwarten ist, getestet werden. Abb. 4.11 zeigt die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ für diesen Wert von t_{\perp} mit $U/t = 4$, $V_r/t = 0$ und $\beta t = 10$ bei einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.75$. Deutlich sind zwei quasiteilchen-ähnliche Bänder zu erkennen, die in beiden k_{\perp} -Kanälen von $\omega \approx -t$ bis $\omega \approx 2t$ verlaufen. Der Wert $k = \pi/2$ (gestrichelte Linie in Abb. 4.11) ist derjenige k -Wert, der der Fermikante am nächsten liegt und bei dem für beide Werte von k_{\perp} das meiste spektrale Gewicht im Photoemissionsbereich ($\omega > 0$) enthalten ist. Abb. 4.12 zeigt die einzelnen Schritte, die zur Bestimmung von $P_{1,2}(E)$ für $k = \pi/2$ notwendig sind. In Abb. 4.12(a) sind die spektralen Dichten $A(k, k_{\perp}, \omega)$ für $k_{\perp} = 0$ und $k_{\perp} = \pi$ im relevanten Energiefenster dargestellt. Der größte Teil des spektralen Gewichtes ist dabei in zwei Maxima enthalten, wobei im Fall $k_{\perp} = 0$ noch zusätzlich ein weitaus schwächerer, inkohärenter Hintergrund zu erkennen ist. Teil (b) zeigt die Differenz dieser beiden Kurven entsprechend Gl. 4.29 für $A_2(k, \omega)$. Das Ergebnis der Faltung (Gl. 4.28) ist in Abb. 4.12(c) für $P_1(E)$ und in Abb. 4.12(d) für $P_2(E)$ abgebildet.

In Abb. 4.12 wird deutlich, wie ein Signal bei endlichen Werten von $E = E_0$ in $P_{1,2}(E)$ zustande kommt: Die Aufspaltung der beiden Bänder (Abb. 4.12(a)) führt zu zwei getrennten *Peaks* in $A_{1,2}(k, \omega)$, die bei der Berechnung von $P_{1,2}(E)$ genau dann ein starkes Signal in $P_{1,2}(E)$ hervorrufen, wenn $E = 0$ ist oder E der Aufspaltung Δ der beiden Bänder entspricht. Dieses Signal ist in $P_2(E)$ deutlicher zu sehen als in $P_1(E)$, da aufgrund der beschränkten Auflösung des QMC/MaxEnt-Verfahrens die beiden Signale bei $E = 0$ und $E = E_0$ vor allem bei gleichen Vorzeichen ($P_1(E)$) schwer zu trennen sind. Für $t_{\perp}/t = 0.2$ ist bei $E_0 \approx 0.42t$ ein deutliches Minimum und somit kohärentes Verhalten vorhanden. Bei kleineren Werten von t_{\perp} bleibt dieses Signal bestehen, es verschiebt sich jedoch zu kleineren Energiewerten.

Aufgrund der endlichen Breite der ursprünglichen Maxima in $A(\vec{k}, \omega)$ wird es bei kleinen Werten von t_{\perp} immer schwieriger, das Signal aufzulösen (siehe Abb. 4.12(d)). Hier läßt sich jedoch ein einfacheres Verfahren anwenden: Im Fall rein lokaler Wechselwirkung ist der größte Teil des spektralen Gewichtes in einem quasiteilchen-ähnlichen Band enthalten, d.h. der inkohärente Hintergrund in $A(\vec{k}, \omega)$ ist zur Berechnung von $P_{1,2}(E)$ vernachlässigbar. Somit kann die Frage nach kohärentem oder inkohärentem Verhalten durch die Aufspaltung der Bandstruktur an der Fermikante beantwortet werden. Im Fall $t_{\perp}/t = 0.2$ liefert der MaxEnt-Algorithmus eine Aufspaltung von $\Delta/t = 0.327 \pm 0.052$. Dieser Wert besitzt einen relativ großen statistischen Fehler und ist somit für

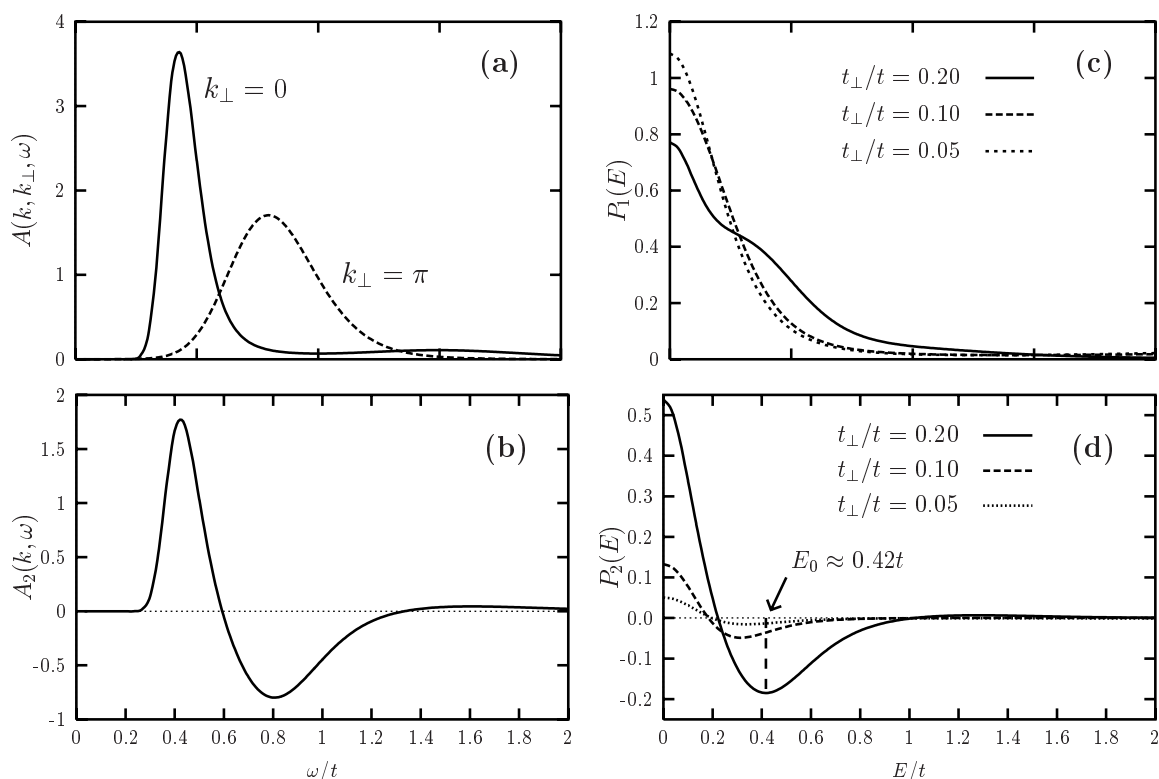


Abb. 4.12: Berechnung von $P_{1,2}(\tau)$ für $k = \pi/2$ mit identischen Parametern wie in Abb. 4.11. Teil (a) zeigt die spektrale Dichte $A(k = \pi/2, k_{\perp}, \omega)$ für beide Werte von $k_{\perp} = 0, \pi$, Teil (b) ist die Differenz $A_2(k, \omega)$ entsprechend Gl. 4.29, Teil (c) die Wahrscheinlichkeit $P_1(E)$ und Teil (d) die Wahrscheinlichkeit $P_2(E)$.

die Analyse ungeeignet. Um den Fehler zu reduzieren, wurde daher folgendes Verfahren angewandt:

Die Maxima von $A(\vec{k}, \omega)$ können an eine cosinus-Funktion gefittet werden, wodurch eine relativ genaue Bestimmung der Steigung $\partial\varepsilon/\partial k$ der Bandstruktur möglich ist (siehe Abb. 4.11(a)). Diese Steigung erlaubt zusammen mit der Aufspaltung Δk im Impulsraum, die entsprechend Abb. 4.13 mit Hilfe der mittleren Besetzungszahlen $\langle n_{\vec{k}} \rangle = \sum_{\sigma} \langle n_{\vec{k}\sigma} \rangle$ bestimmt werden kann, die Berechnung der Bandaufspaltung:

$$\Delta = \left. \frac{\partial\varepsilon}{\partial k} \right|_{k_F} \cdot \Delta k. \quad (4.31)$$

Auf diese Weise ergibt sich ein Wert von $\Delta/t = 0.288 \pm 0.010$ für $t_{\perp}/t = 0.2$, d.h. eine Reduzierung des Fehlers um den Faktor ≈ 5 . Abb. 4.14 zeigt die auf diese Weise berechnete Aufspaltung der Bänder an der Fermikante in Abhängigkeit von t_{\perp} . Zwischen der

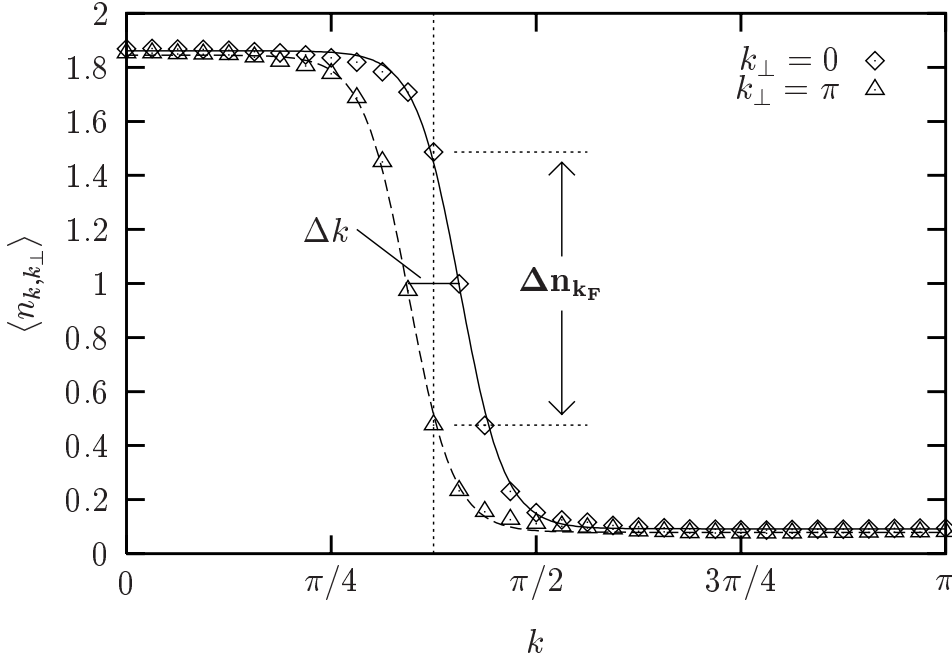


Abb. 4.13: Besetzungszahlen $\langle n_{k,k_\perp} \rangle$ für alle Werte von (k, k_\perp) in einem 2×64 -System mit $U/t = 4$, $V_r/t = 0$ und $t_\perp/t = 0.2$, berechnet mit dem QMC-Verfahren bei einer inversen Temperatur von $\beta t = 10$ und einer mittleren Teilchendichte von $\langle n \rangle = 0.75$.

Aufspaltung im wechselwirkungsfreien Fall ($U/t = 0$) und der Aufspaltung bei $U/t = 4$ läßt sich deutlich eine Reduzierung beobachten. Jedoch ist die Abhängigkeit von t_\perp , wie bei einer Fermi-Flüssigkeit zu erwarten, auch für $U/t = 4$ immer noch linear, d.h. es liegt *kein* Hinweis auf inkohärentes Verhalten vor.

Bei größeren Werten von α wird der inkohärente Anteil des Spektrums relevant und ist somit bei der Untersuchung von $P_{1,2}(E)$ nicht mehr vernachlässigbar [97]. Als Alternative läßt sich jedoch direkt die Aufspaltung der Fermifläche in der mittleren Besetzungszahl $\langle n_{k,k_\perp} \rangle$ betrachten:

$$\Delta n_{k_F} = \langle n_{k_F, k_\perp=0} - n_{k_F, k_\perp=\pi} \rangle. \quad (4.32)$$

(Diagnostic Operator III)

Hierbei ist $\langle n_{k_F, k_\perp} \rangle = \sum_\sigma \langle c_{k_F, k_\perp \sigma}^\dagger c_{k_F, k_\perp \sigma} \rangle = 2 \int_{-\infty}^0 A(k, k_\perp, \omega) d\omega$ und enthält somit sowohl den quasiteilchen-ähnlichen *Peak* als auch den inkohärenten Hintergrund des Spektrums. Inkohärentes Verhalten spiegelt sich also im Fehlen der Aufspaltung der Fermifläche in einen bindenden und antibindenden Anteil wieder [19]. Ferner sind zur Bestimmung dieser Größe keine dynamischen Korrelationsfunktionen notwendig, d.h.

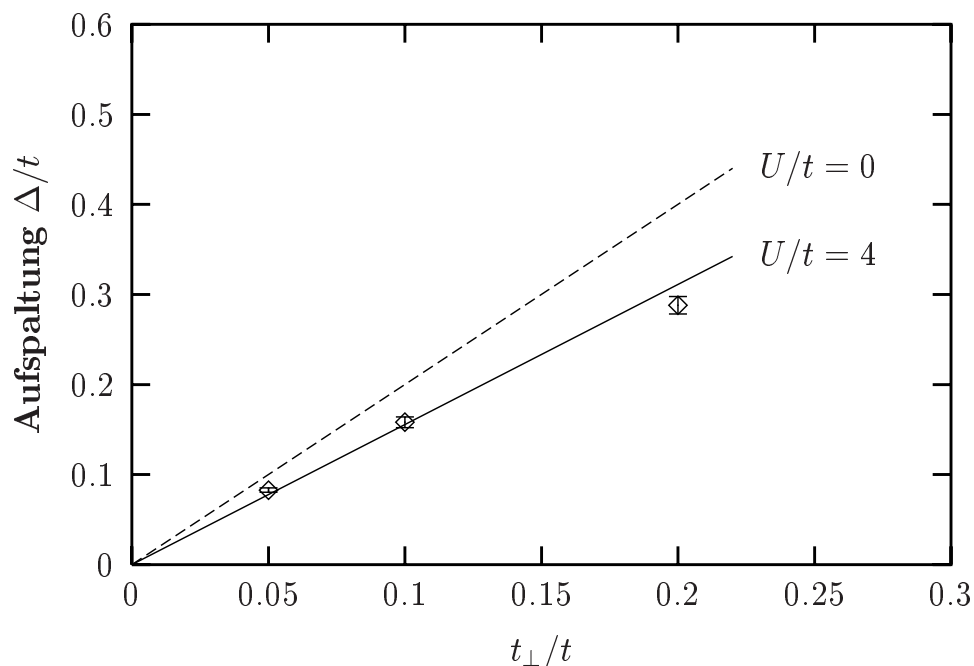


Abb. 4.14: Energieaufspaltung der quasiteilchen-ähnlichen Bandstruktur zwischen $A(k, 0, \omega)$ und $A(k, \pi, \omega)$ in Abhängigkeit von t_{\perp} . Die Berechnungen wurden in einem 2×16 -System durchgeführt, ansonsten sind die Parameterwerte identisch zu Abb. 4.13. Die gestrichelte Linie entspricht dem wechselwirkungsfreien Ergebnis ($U = 0$).

die Berechnung mit dem QMC-Verfahren ist weniger rechenzeitaufwendig und somit genauer durchführbar. Dies ermöglicht außerdem die Verwendung der längerreichweitigen Wechselwirkung V_r , die aufgrund von *vier* zusätzlichen Ising-Feldern pro Wechselwirkungsterm $\sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}$ zu einem verstärkten Vorzeichenproblem und somit zu erheblich mehr Rechenzeit führt (siehe hierzu auch Abschnitt 2.1.1).

Abb. 4.15 zeigt das Ergebnis der Berechnung von Δn_{k_F} in Abhängigkeit von t_{\perp} für verschiedene Parameterwerte V_1 und verschiedene Gittergrößen bis zu 2×64 Plätzen. Die lokale Wechselwirkung ist stets $U/t = 4$, wobei der kleinste Wert der Kopplung zwischen den Ketten $t_{\perp}/t = 0.025$ beträgt. Die Berechnungen für $V_r \neq 0$ wurden dabei von M.G. Zacher im Rahmen seiner Diplomarbeit durchgeführt [98]. Die QMC-Fehler liegen in Abb. 4.15 innerhalb der Symbolgrößen und sind deshalb nicht eingezeichnet. In allen Fällen läßt sich kein Hinweis auf inkohärentes Verhalten erkennen; die Aufspaltung ist stets proportional zu t_{\perp} und unabhängig von den Parameterwerten. Dies ist vor allem im Hinblick auf die Integrabilität der Systeme interessant. Das eindimensionale Hubbard-Modell ist für jeden Wert von U integrabel [99], während bei eingeschaltetem

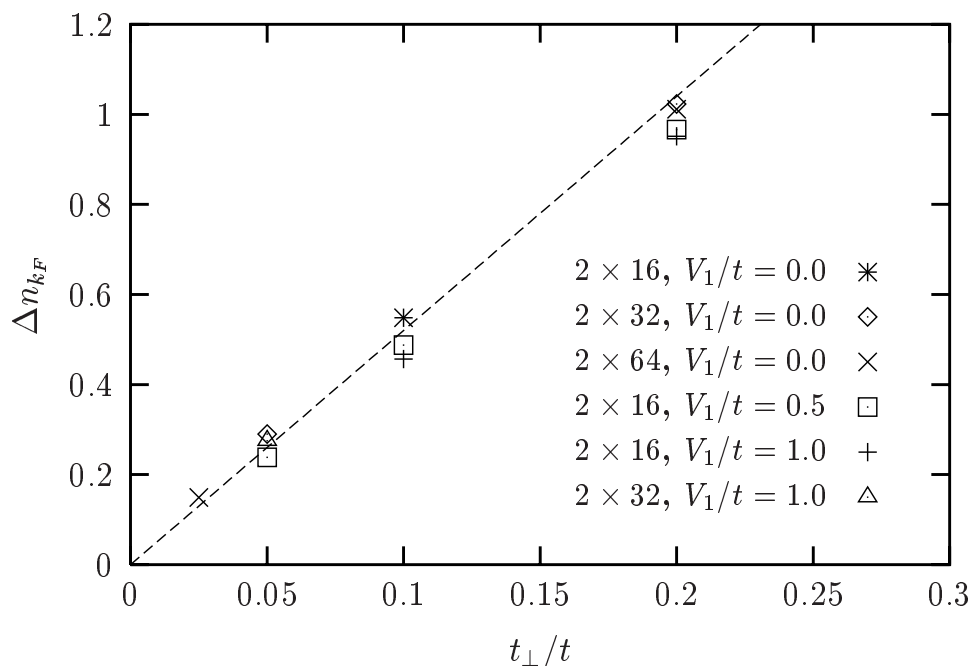


Abb. 4.15: Aufspaltung Δn_{k_F} für verschiedene Gittergrößen und verschiedene Werte der extended Hubbard-Kopplung V_1 in Abhängigkeit von t_{\perp} . Die Berechnungen wurden mit einer lokalen Coulomb-Abstoßung von $U/t = 4$, einer inversen Temperatur von $\beta t = 10$ und einer mittleren Teilchendichte von $\langle n \rangle = 0.75$ durchgeführt.

V_r die Integrabilität verloren geht. Der Zusammenhang zwischen Integrabilität und Kohärenz, den F. Mila und D. Poilblanc im tJ -Modell feststellen [21], besteht somit im Hubbard-Modell nicht.

4.4.3 Der Einfluß der anomalen Dimension α

Wie bereits erwähnt, kann der universelle Parameter α als Maß für die Stärke der „Dämpfung“ des Einteilchen-Hüpfens angesehen werden. D.h. der Übergang zu inkohärentem Verhalten findet möglicherweise nur bei größeren Werten von α statt. D.G. Clarke und S.P. Strong [20] finden aufgrund von störungstheoretischen Betrachtungen den Übergang zu inkohärentem Verhalten zwischen zwei gekoppelten Luttinger-Flüssigkeiten bei $\alpha \gtrsim 1/2$. Somit ist die Analyse der Natur des Einteilchen-Hüpfens in Parameterbereichen des Hubbard-Modells mit $\alpha \gtrsim 1/2$ sinnvoll.

Die Berechnung des Wertes der anomalen Dispersion α wurde in dieser Arbeit auf folgende Weise durchgeführt: α läßt sich aus dem Korrelationsexponenten K_{ρ} , der das

langreichweitige Verhalten der Korrelationsfunktionen einer Luttinger-Flüssigkeit angibt, direkt berechnen [8, 95, 100]:

$$\alpha = \frac{1}{4} \left(K_{\rho} + \frac{1}{K_{\rho}} - 2 \right). \quad (4.33)$$

K_{ρ} ist dabei durch die Geschwindigkeit der Ladungsanregungen v_c und der elektronischen Kompressibilität $\kappa = \partial \langle n \rangle / \partial \mu$ gegeben [95]:

$$K_{\rho} = \frac{\pi}{2} v_c \kappa. \quad (4.34)$$

Während die Geschwindigkeit v_c aus dem Spektrum der Ladungssuszeptibilität $\chi_c(\vec{q}, \omega)$ abgelesen werden kann, läßt sich κ direkt über die Abhängigkeit der mittleren Teilchenzahl $\langle n \rangle$ vom chemischen Potential μ mit der großkanonischen QMC-Methode berechnen. Für $U/t = 4$, $V_r/t = 0$ bei einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.75$ wurde durch dieses Verfahren ein Wert von $\alpha = 0.036 \pm 0.012$ bestimmt, der innerhalb des Fehlerbalkens mit dem Wert $\alpha = 0.031$ von H. Schulz [95] übereinstimmt.

Bei einer zusätzlichen *extended*-Wechselwirkung von $V_1/t = 1$ läßt sich bei $U/t = 4$ und $\langle n \rangle = 0.75$ bereits ein Wert von $\alpha = 0.084 \pm 0.022$ erreichen, der jedoch immer noch weit von $\alpha = 0.5$ entfernt ist. Von experimenteller Bedeutung sind hingegen Werte von $\alpha > 1$. So sind z.B. die elektronischen Eigenschaften der eindimensionalen Bechgaard-Salze [101] mit $\alpha \approx 1.2$ konform. In diesen organischen Leitern sind langreichweitige Coulomb-Wechselwirkungen von entscheidender Wichtigkeit, die eine mögliche Ursache für derart große α -Werte darstellen. Es liegt somit nahe, bei längerreichweitigen Potentialen mit Coulomb-artigen Abstandsverhalten zu simulieren.

Bei einer Dotierung von $\langle n \rangle = 0.25$, die aufgrund des Vorzeichenproblems zugänglich ist, wurde für ein derartiges Coulomb-Potential $V_r = U/(r + 1)$ mit $U/t = 4$ und $r = 1, 2$ ein Wert für die anomale Dimension von $\alpha = 0.505 \pm 0.049$ erreicht. Abb. 4.16 zeigt die Aufspaltung der Fermifläche Δn_{k_F} in Abhängigkeit von t_{\perp} in einem 2×16 -System für $U/t = 4$ und $\langle n \rangle = 0.25$, und zwar für $V_r = 0$ und $V_r = U/(r + 1)$. Für die längerreichweitige Coulomb-Wechselwirkung schneidet die Aufspaltung Δn_{k_F} die Rechtswertachse bei $t_{\perp}^c/t \approx 0.025$, d.h. für $\alpha \approx 0.5$ liegt inkohärentes Verhalten für $t_{\perp}/t \lesssim 0.025$ vor. Dies ist der bisher einzige numerische Hinweis auf inkohärentes Einteilchen-Hüpfen und bestätigt die störungstheoretischen Betrachtungen von D.G. Clarke und S.P. Strong [20].

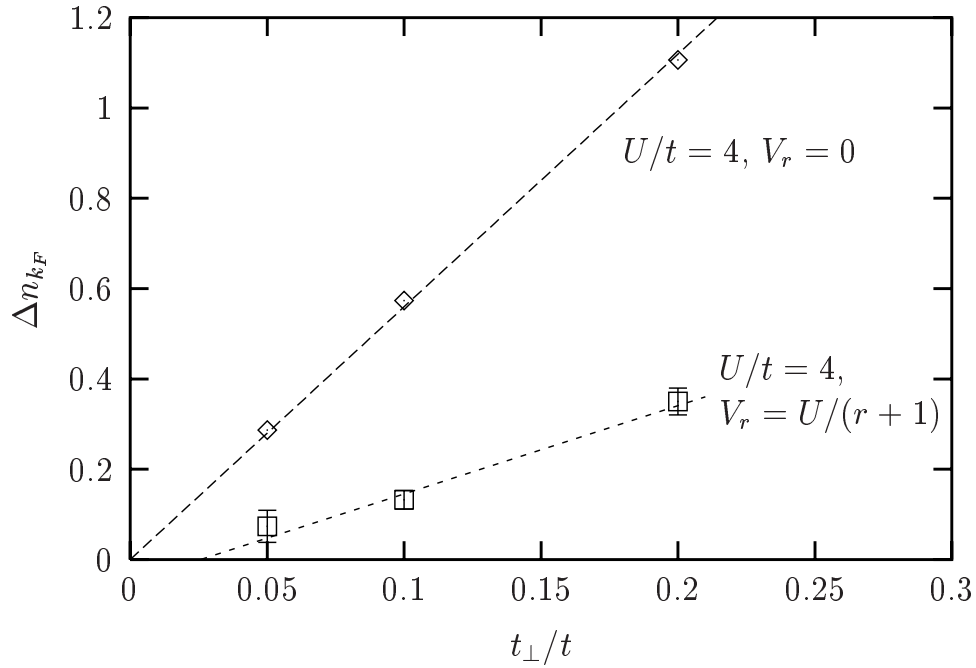


Abb. 4.16: Aufspaltung Δn_{k_F} bei einer mittleren Teilchendichte von $\langle n \rangle = 0.25$ in Abhängigkeit von t_{\perp} . Die Karos (\diamond) zeigen dabei das Ergebnis für eine rein lokale Wechselwirkung ($U/t = 4, V_r/t = 0$), während die Quadrate (\square) das Resultat für ein Coulomb-artiges Potential ($U/t = 4, V_r = U/(r+1)$ für $r = 1, 2$) wiedergeben. Im letzteren Fall beträgt die anomale Dimension $\alpha \approx 1/2$, und das System zeigt inkohärentes Einteilchen-Hüpfen für $t_{\perp}/t \lesssim 0.025$.

Kapitel 5

ODLRO im Drei-Band-Hubbard-Modell

5.1 Einführung

Das folgende Kapitel beschäftigt sich mit der möglichen Existenz von langreichweitiger supraleitender Ordnung (ODLRO) im Drei-Band-Hubbard-Modell. Dieses Modell wurde zuerst von V.J. Emery [6, 42] vorgeschlagen und beinhaltet sowohl die Kupfer- $d_{x^2-y^2}$ als auch die Sauerstoff- p_x - und $-p_y$ -Orbitale der Kupferoxid-Ebenen. Da diese für die wesentlichen physikalischen Eigenschaften der HTSL, und vor allem für das Auftreten der Supraleitung, verantwortlich gemacht werden, stellt das Drei-Band-Modell einen natürlichen Ausgangspunkt für eine theoretische Untersuchung der HTSL dar.

Der supraleitende Ordnungsparameter, der den Übergang von einer normalleitenden in eine supraleitende Phase beschreibt, läßt sich in zwei Dimensionen folgendermaßen ausdrücken [102]:

$$\Delta(\vec{k}) = \Delta_s + \Delta_{s^*}(\cos k_x + \cos k_y) + \Delta_d(\cos k_x - \cos k_y) + \dots \quad (5.1)$$

Die ersten drei Glieder der Reihenentwicklung von $\Delta(\vec{k})$ (Gl. 5.1) entsprechen jeweils der *on-site* s -Wellen-Paarung (Δ_s), der *extended* s^* -Wellen-Paarung (Δ_{s^*}) und der $d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Paarung (Δ_d). Die entsprechenden Ordnungsparameter für das Drei-Band-Modell im Ortsraum sind im Anhang C der Dissertation von G. Dopf [24] explizit dargestellt. Abb. 5.1 zeigt beispielsweise die möglichen Singulett-Paarungen (dargestellt

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_{\vec{r}}^{s*} &= \sum_{\vec{l}, \vec{l}'} g^{s*}(\vec{l}, \vec{l}') c_{\vec{r}+\vec{l}\uparrow} c_{\vec{r}+\vec{l}'\downarrow} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{3}} \left[\left(d_{\vec{r}\uparrow} d_{\vec{r}+\hat{x}\downarrow} - d_{\vec{r}\downarrow} d_{\vec{r}+\hat{x}\uparrow} \right) + \left(d_{\vec{r}\uparrow} d_{\vec{r}+\hat{y}\downarrow} - d_{\vec{r}\downarrow} d_{\vec{r}+\hat{y}\uparrow} \right) + \right. \\
&\quad \left(p_{\vec{r}\uparrow}^x p_{\vec{r}+\hat{x}\downarrow}^x - p_{\vec{r}\downarrow}^x p_{\vec{r}+\hat{x}\uparrow}^x \right) + \left(p_{\vec{r}\uparrow}^x p_{\vec{r}+\hat{y}\downarrow}^x - p_{\vec{r}\downarrow}^x p_{\vec{r}+\hat{y}\uparrow}^x \right) + \\
&\quad \left. \left(p_{\vec{r}\uparrow}^y p_{\vec{r}+\hat{x}\downarrow}^y - p_{\vec{r}\downarrow}^y p_{\vec{r}+\hat{x}\uparrow}^y \right) + \left(p_{\vec{r}\uparrow}^y p_{\vec{r}+\hat{y}\downarrow}^y - p_{\vec{r}\downarrow}^y p_{\vec{r}+\hat{y}\uparrow}^y \right) \right]. \quad (5.3)
\end{aligned}$$

Hierbei beinhalten die Faktoren $g^\alpha(\vec{l}, \vec{l}')$ die entsprechende Geometrie des Operators $\mathcal{O}_{\vec{r}}^\alpha$ im Ortsraum, während die Operatoren $c_{\vec{r}\sigma}$ jeweils für die Vernichter von Teilchen an den Kupfer- bzw. Sauerstoff-Orbitalen am Ort \vec{r} stehen.

Aufgrund des Theorems von N.D. Mermin und H. Wagner [104] kann bei endlicher Temperatur in zwei Dimensionen keine langreichweitige Ordnung gefunden werden. Jedoch besteht die Möglichkeit eines sog. Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs [105] bei einer endlichen Temperatur T_{KT} , der beispielsweise von F.F. Assaad et al. [83] im attraktiven Ein-Band-Hubbard-Modell nachgewiesen wurde. Oberhalb dieser Kosterlitz-Thouless-Temperatur T_{KT} fällt die Paarkorrelationsfunktion exponentiell gemäß $P_\alpha(\vec{r}) \propto e^{-|\vec{r}|/\xi}$ ab, wobei ξ die Korrelationslänge der supraleitenden Ordnung ist. Für Temperaturen kleiner als T_{KT} zeigt P_α potenzartiges Verhalten mit $P_\alpha(\vec{r}) \propto 1/|\vec{r}|^\eta$ und der Konstanten η . Die $\vec{q} = (0, 0)$ -Komponente der Paarkorrelationsfunktion, die von G. Dopf et al. [24, 25] bereits untersucht wurde, ist schließlich durch Summation über alle Abstände \vec{r} gegeben:

$$P_\alpha(\vec{q} = (0, 0)) = \sum_{\vec{r}} P_\alpha(\vec{r}). \quad (5.4)$$

Im Falle eines Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs skaliert $P_\alpha(\vec{q} = (0, 0))$ mit $N_x^{2-\eta}$ [106], wobei N_x für die lineare Gitterdimension steht. Um somit einen supraleitenden KT-Übergang mit Hilfe von numerischen QMC-Methoden nachweisen zu können, ist eine sorgfältige Untersuchung des Skalenverhaltens von $P_\alpha(\vec{q} = (0, 0))$ notwendig (*finite-size scaling*).

Abb. 5.2 zeigt die diagrammatische Darstellung von $P_\alpha(\vec{r})$ bzw. $P_\alpha(\vec{q})$ [107]. Der erste Term der Darstellung besteht lediglich aus dem Produkt der vollen („*dressed*“) Green'schen Funktionen und repräsentiert den unkorrelierten Anteil von P_α . Der zweite Term stellt den eigentlichen Wechselwirkungsvertex dar, der beispielsweise darüber Auskunft

gibt, ob die effektive Wechselwirkung attraktiv oder repulsiv ist. Maßgebend ist somit die Größe

$$P_\alpha^{\text{Vertex}} = P_\alpha - \bar{P}_\alpha, \quad (5.5)$$

wobei \bar{P}_α für den unkorrelierten Anteil steht mit

$$\bar{P}_\alpha(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}'} \sum_{\vec{l}_1, \vec{l}_2, \vec{l}_3, \vec{l}_4} g^\alpha(\vec{l}_1, \vec{l}_2) g^\alpha(\vec{l}_3, \vec{l}_4) \mathcal{G}_{\vec{r}'+\vec{l}_1, \vec{r}'+\vec{r}+\vec{l}_3}^\uparrow \mathcal{G}_{\vec{r}'+\vec{l}_2, \vec{r}'+\vec{r}+\vec{l}_4}^\downarrow. \quad (5.6)$$

Hier ist \mathcal{G}_{ij}^σ die gleichzeitige, ortsabhängige Greensche Funktion entsprechend Gl. 2.20.

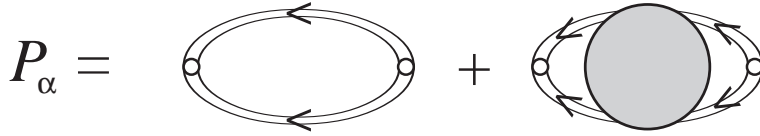


Abb. 5.2: Diagrammatische Darstellung der Paar-Paar-Korrelationsfunktion P_α .

5.2 Die Ergebnisse der QMC-Simulation

G. Dopf et al. [24, 25] berechneten $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{q} = (0, 0))$ in einem System aus 4×4 Einheitszellen mit Hilfe der großkanonischen QMC-Methode. Hier wurde ein universeller Parametersatz ($U_d/t_{pd} = 6$, $\Delta/t_{pd} = 4$) verwendet, der ein breites Spektrum von Normalzustandseigenschaften in zum Teil quantitativer Übereinstimmung mit dem Experiment reproduzieren kann [23–26]. Dieser Parametersatz weist bereits bei einer inversen Temperatur von $\beta t_{pd} = 10$ einen attraktiver Wechselwirkungsvertex im *extended s**-Wellen-Kanal mit dem richtigen, experimentell bestätigten Dotierungsverhalten auf. Die Untersuchung von $P_{s^*}^{\text{Vertex}}$ als Funktion von der Systemgröße (*finite-size scaling*) führt zu einem $1/N^2$ -Verhalten und somit zu keinem Anzeichen von ODLRO [24]. Dieses Ergebnis wurde von F.F. Assaad et al. [27] durch Berechnung der Ableitung der superfluiden Dichte nach der Temperatur mit Hilfe eines komplexen QMC-Algorithmus bestätigt. Das Verhalten des Wechselwirkungsvertex $P_{s^*}^{\text{Vertex}}$ in Abhängigkeit von der Temperatur zeigt jedoch keinen Sättigungseffekt bei $\beta t_{pd} = 10$, so daß bei tieferen Temperaturen unterhalb von T_c langreichweitige Ordnung aufgrund der Ergebnisse von G. Dopf et al. nicht ausgeschlossen werden kann.

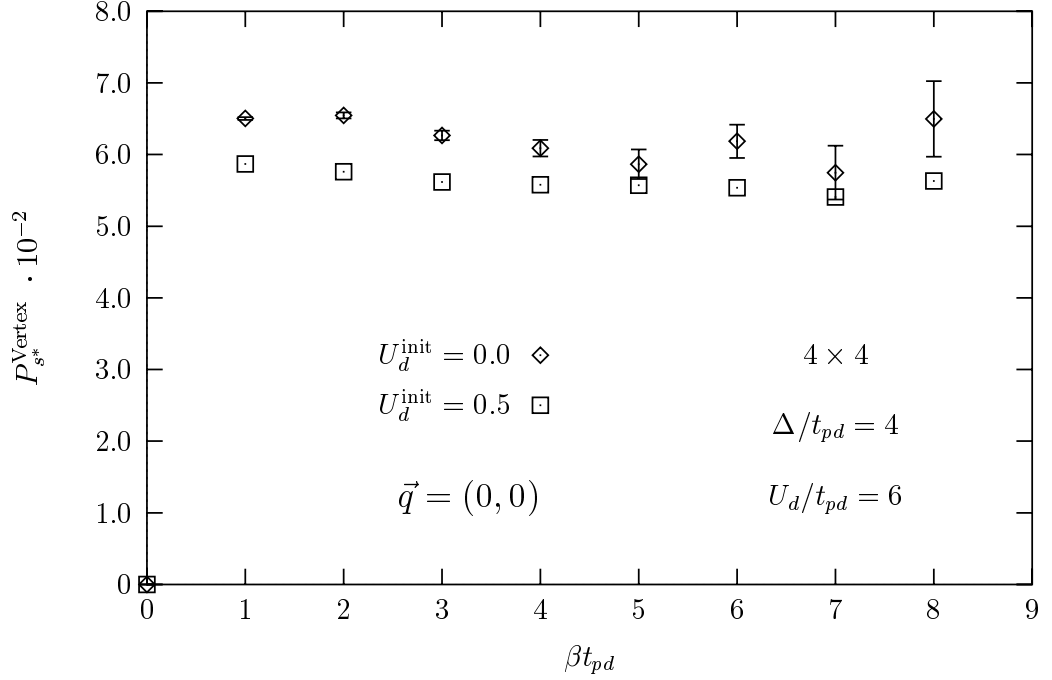


Abb. 5.3: Vergleich der Konvergenz der freien $U_d^{\text{init}} = 0.0$ Testwellenfunktion (\diamond) mit einer optimierten Testwellenfunktion (\square) (siehe Abschnitt 2.2.5) für den Wechselwirkungsverstärker $P_s^{\text{Vertex}}(\vec{q} = (0, 0))$ im erweiterten s^* -Paarungskanal.

In einer neueren Veröffentlichung von K. Kuroki und H. Aoki [28] untersuchen die Autoren dieses Drei-Band-Modell auf d -Wellen-Paarung mit Hilfe der Projektor-QMC-Methode. Sie berechnen jedoch lediglich die Größe $P_\alpha(\vec{r})$, die nur eingeschränkte Aussagen über das supraleitende Verhalten des Systems erlaubt. In einem Parameterbereich von $\Delta = \varepsilon_p - \varepsilon_d = 2.7t_{pd}$ und $U_d/t_{pd} = 3.2$ zeigt sich ein deutlicher Anstieg von $P_d(\vec{r})$ für Abstände $|\vec{r}| \leq 4\sqrt{2}a$ in Systemgrößen mit bis zu 8×8 -Einheitszellen, der auf ein mögliches Auftreten von d -Wellen-Paarung hinweist. Jedoch ist nicht klar, inwiefern der von K. Kuroki und H. Aoki gewählte Parametersatz die physikalischen Eigenschaften der HTSL im Normalzustand wiedergeben kann. Zum zweiten könnte der beobachtete Anstieg im d -Wellen-Kanal auf einen Anstieg des unkorrelierten Anteils \bar{P}_d zurückzuführen sein, der für die Frage nach supraleitender Paarung nicht relevant ist.

In der vorliegenden Arbeit wurde daher das $T = 0$ -Projektor-QMC-Verfahren verwendet, um direkt den Wechselwirkungsverstärker im Grundzustand untersuchen zu können. Mit Hilfe der in Abschnitt 2.2.5 vorgestellten optimierten Testwellenfunktion ist es möglich, das Drei-Band-Modell bei jeder physikalisch relevanten Dotierung in Systeme-

men mit bis zu 8×8 Einheitszellen zu untersuchen. Abb. 5.3 zeigt in einem System aus 4×4 Einheitszellen das Ergebnis des Vertex $P_{s^*}^{\text{Vertex}}(\vec{q} = (0, 0))$ in Abhängigkeit des Projektionsparameters β für eine freie ($U_d = 0$) Testwellenfunktion im Vergleich mit der optimierten Testwellenfunktion. Beide Simulationen konvergieren gegen den gleichen Wert, wobei für die freie Testwellenfunktion bereits bei $\beta t_{pd} \approx 7$ große Fehlerbalken aufgrund des Vorzeichenproblems auftreten. Mit der optimierten Testwellenfunktion ist es nun möglich, bei Systemgrößen aus bis zu 8×8 Einheitszellen jede Dotierung zu simulieren, die mit einer freien Testwellenfunktion aufgrund des Vorzeichenproblems nicht mehr erreicht werden kann.

In Abb. 5.4 ist der Wechselwirkungsververtex P_s^{Vertex} mit $\vec{q} = (0, 0)$ für den universellen Parametersatz ($U_d/t_{pd} = 6$, $\Delta/t = 4$) in Abhängigkeit von der Lochdotierung $\langle n \rangle$ dargestellt. Dabei zeigt Teil (a) das Ergebnis im s -Wellen-Kanal, Teil (b) im s^* -Wellen-Kanal und schließlich Teil (c) im d -Wellen-Kanal, wobei die Karos (\diamond) mit Hilfe des großkanonischen Algorithmus bei $\beta t_{pd} = 10$ in einem 4×4 -System und die Quadrate (\square) mit dem $T = 0$ -Projektor-QMC-Verfahren mit einem Projektionsparameter von $\beta t_{pd} = 5$ in einem 6×6 -System berechnet wurden. Der s -Wellen-Vertex (Abb. 5.4(a)) verläuft durchgehend negativ, d.h. die effektive Wechselwirkung ist hier repulsiv. Dieses Verhalten ist im *on-site-s*-Kanal aufgrund der lokalen Coulomb-Abstoßung U_d zu erwarten. Interessant ist der erweiterte s^* -Wellen-Kanal (Abb. 5.4(b)), der den experimentellen Verlauf der Sprungtemperatur in Abhängigkeit von der Dotierung in den HTSL zeigt [108]. Eine zusätzliche Berechnung des Vertex bei $T = 0$ im 4×4 -System zeigt, daß der Unterschied in den dargestellten 4×4 -Daten bei $k_B T = 0.1 t_{pd}$ und den 6×6 -Daten bei $T = 0$ nicht auf die verschiedenen Systemgrößen zurückzuführen ist. Der Wechselwirkungsververtex für die Temperatur $k_B T = 0.1 t_{pd}$ ist somit noch weit vom Sättigungsbereich bei $T = 0$ entfernt ist. Ein analoges Verhalten zeigt sich im d -Wellen-Kanal (Abb. 5.4(c)), allerdings entspricht hier die Dotierungsabhängigkeit nicht dem experimentellen Verhalten. Der effektive Wechselwirkungsververtex ist dennoch stets attraktiv.

Um langreichweitige, supraleitende Ordnung nachweisen zu können, muß untersucht werden, wie $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{q} = (0, 0))$ mit der Systemgröße skaliert. Diese Analyse ist jedoch für die hier betrachteten Gittergrößen von bis zu 8×8 Einheitszellen schwierig, da $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{q} = (0, 0))$ ein starkes *finite-size*-Verhalten aufweist. Somit ist es günstiger, direkt den Vertex $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{r})$ zu berechnen, der analog zu Gl. 5.4 durch Summation über alle Gitterplätze mit $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{q} = (0, 0))$ zusammenhängt. Für das Auf-

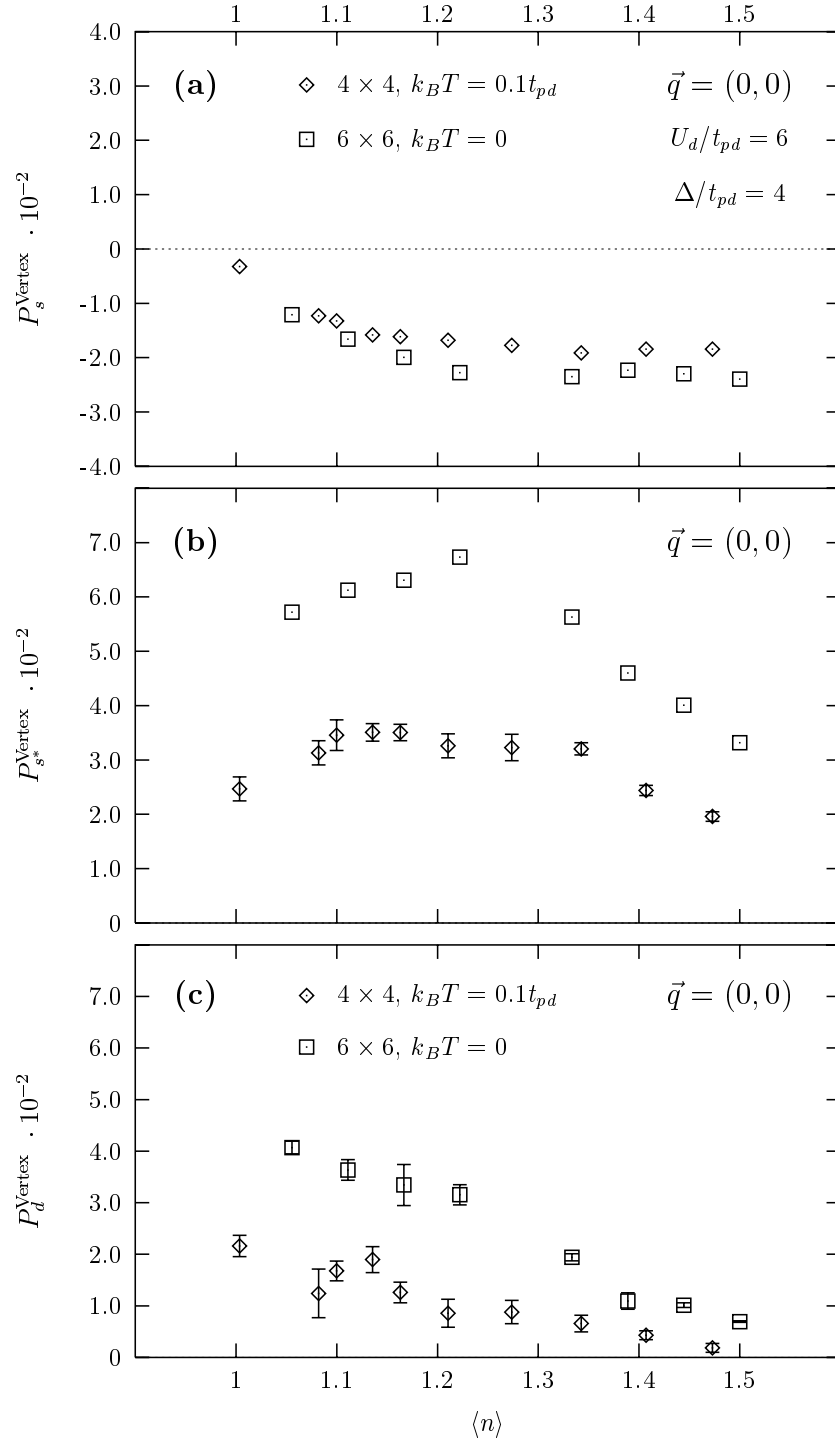


Abb. 5.4: Wechselwirkungsvertex bei $\vec{q} = (0, 0)$ für $U_d/t_{pd} = 6$ und $\Delta/t_{pd} = 4$ in Abhängigkeit von der mittleren Lochdichte $\langle n \rangle$ im Drei-Band-Hubbard-Modell. Teil (a) zeigt das Ergebnis im s -Wellen-Kanal, Teil (b) im extended- s^* -Wellen-Kanal und Teil (c) im d -Wellen-Kanal.

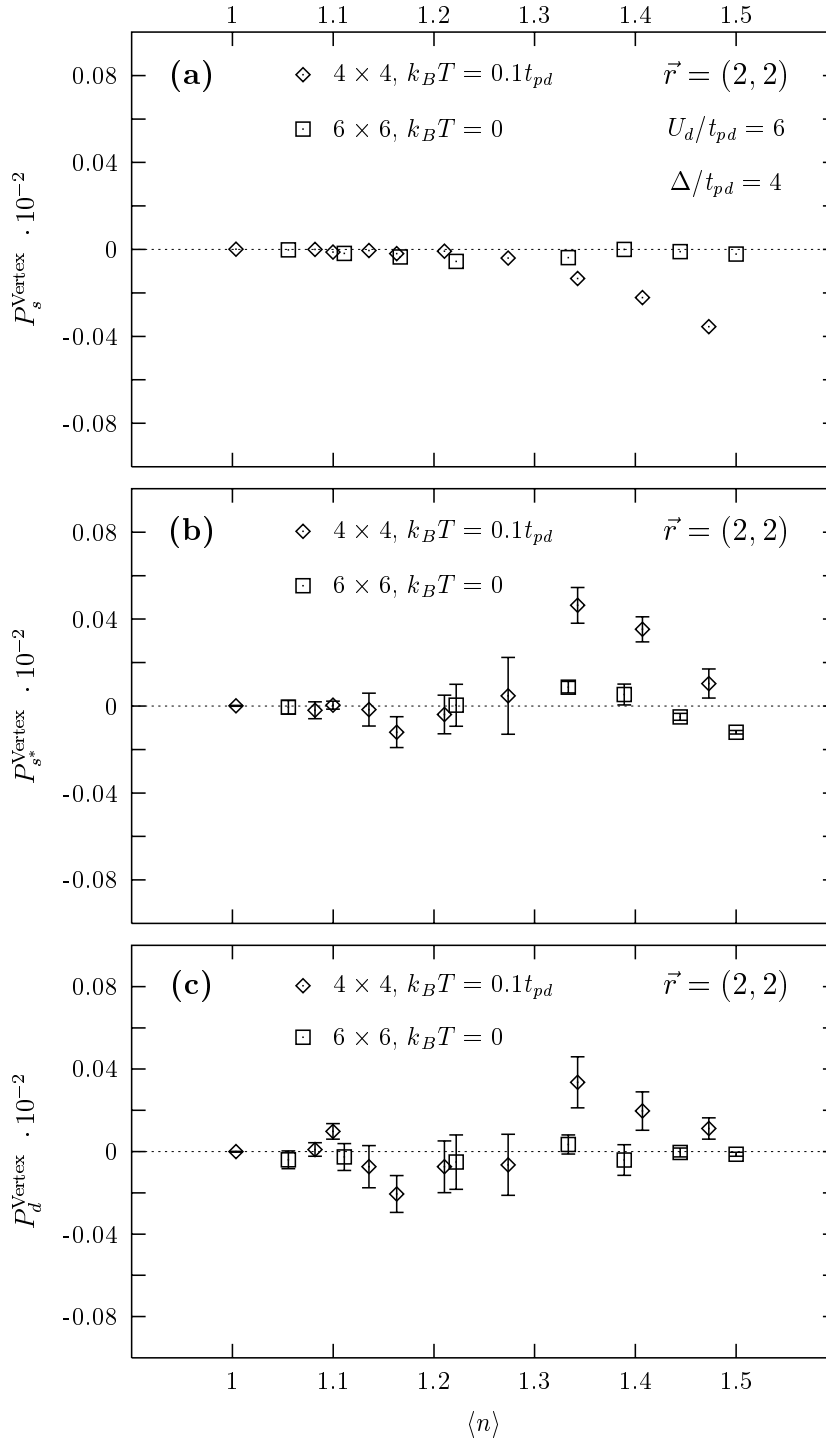


Abb. 5.5: Wechselwirkungsvertex $P_{\alpha}^{\text{Vertex}}(\vec{r})$ für $\vec{r} = (2, 2)$ in Abhängigkeit von der mittleren Lochdichte $\langle n \rangle$. Ansonsten entspricht die Darstellung Abb. 5.4.

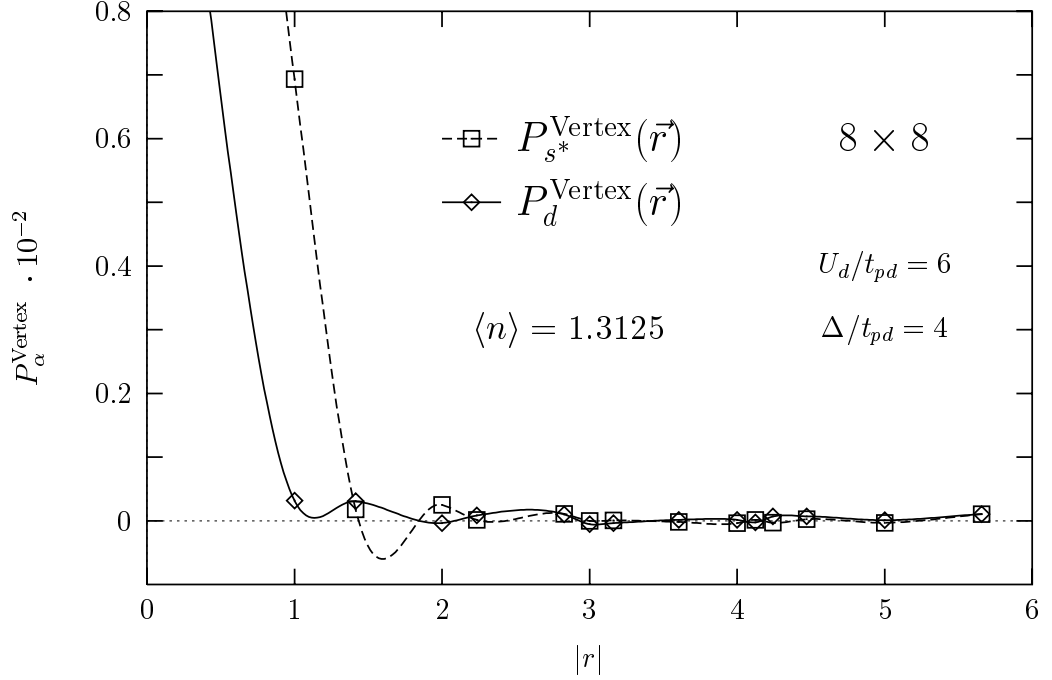


Abb. 5.6: Paar-Paar-Korrelationsfunktion $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{r})$ in Abhängigkeit vom Abstand $|\vec{r}|$ in einem 8×8 -System.

treten von ODLRO ist dann der Wert des Vertex $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{r})$ für große Werte von $|\vec{r}|$ verantwortlich. Die problematischen *finite-size*-Effekte, die beim Betrachten von $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{q} = (0, 0)) = \sum_{\vec{r}} P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{r})$ vor allem durch Beiträge für $|\vec{r}| \leq 1$ entstehen, sind hierbei stark reduziert.

Abb. 5.5 zeigt $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{r})$ für einen Abstand von $\vec{r} = (2, 2)$ für den identischen Datensatz zu Abb. 5.4. Auffällig ist in allen drei Fällen (*s*-, *s**- und *d*-Kanal) der um zwei Größenordnungen verkleinerte Skalenbereich, der auf die großen *finite-size*-Effekte in $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{q} = (0, 0))$ hinweist. Innerhalb der Fehlerbalken sind lediglich bei $\langle n \rangle \approx 1.35$ der *extended-s** und der *d*-Wellen-Kanal im 4×4 -System positiv. Dieses Signal wird jedoch bereits im 6×6 -System stark unterdrückt (siehe Abb. 5.5 (b) und (c)) und ist somit ein reiner *finite-size*-Effekt.

Um das positive Signal bei $\beta t_{pd} = 10$ im 4×4 -System dennoch genauer untersuchen zu können, wurde zusätzlich ein 8×8 -System bei einer Lochdotierung innerhalb dieses Bereichs von $\langle n \rangle = 1.3125$ simuliert. In Abb. 5.6 ist das Ergebnis im $T = 0$ -Grundzustand für die *extended-s**- und *d*-Wellen-Symmetrie in Abhängigkeit von $|\vec{r}|$ aufgetragen. In beiden Kanälen fällt das Signal über mehrere Größenordnungen sehr

schnell ab und ist bereits für $|r| \geq 3$ innerhalb der Fehlerbalken Null. D.h. selbst im Grundzustand zeigt das Drei-Band-Modell keinen Hinweis auf supraleitende Ordnung. Zur konsistenten Beschreibung der HTSL müssen somit zusätzliche Prozesse zum oben betrachteten Parametersatz berücksichtigt werden. Dies sind z.B. längerreichweitige Coulomb-Wechselwirkungen, Elektron-Phonon-Kopplungen oder dreidimensionale Kopplungen zwischen den CuO_2 -Ebenen.

Kapitel 6

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein tieferes Verständnis der Physik des Hubbard-Modell zwischen einer und zwei Dimensionen angestrebt, und zwar einerseits mittels der numerischen Quanten-Monte-Carlo-Methoden (QMC) und andererseits durch die Anwendung von verschiedenen analytischen Näherungsverfahren. Der QMC-Algorithmus erlaubt bis auf statistische Fehler die exakte Bestimmung des Erwartungswertes physikalischer Observablen, sowohl im Grundzustand (Projektor-QMC) als auch bei endlicher Temperatur (großkanonisches QMC). Neben statischen Größen wurde die Analyse von dynamischen Eigenschaften der Hubbard-Modelle durchgeführt, die aus den „rohen“ QMC-Daten auf der imaginären Zeitachse durch analytische Fortsetzung auf die reelle Frequenzachse gewonnen werden konnten. Dabei kam zusätzlich das Verfahren der maximalen Entropie zum Einsatz, welches derzeit bei der numerischen Berechnung von Spektralfunktionen die größtmögliche Auflösung bietet. Diese exakten QMC-Ergebnisse wurden schließlich den Aussagen von verschiedenen analytischen Näherungsverfahren gegenübergestellt, wie z.B. der antiferromagnetischen Hartree-Fock-Näherung, der lokalen Singulett-Näherung oder der *Random-Phase-Approximation*. Dadurch konnten die QMC-Daten zum Teil quantitativ wiedergegeben und so ein grundlegendes Verständnis der Ergebnisse erreicht werden.

Die Eigenschaften des Hubbard-Modells zwischen einer und zwei Dimensionen wurde durch die Analyse von zwei gekoppelten Hubbard-Ketten im Ein-Band-Modell beleuchtet. Dieses Leitersystem stellt den ersten Schritt in Richtung zu zwei Dimensionen dar und ist somit von besonderem theoretischen Interesse. Bei Halbfüllung wurde dabei ein Übergang zwischen einem Vier-Band-Isolator bei kleinen Werten der Kopplung

$t_{\perp} \lesssim 2t$ zu einem Zwei-Band-Isolator bei großen Werten der Kopplung $t_{\perp} \gtrsim 2t$ beobachtet [69]. Dieser manifestierte sich außer in der spektralen Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ vor allem in der Spin-Spin-Korrelationslänge parallel zu den Ketten. Für große Kopplungen verhalten sich die einzelnen Sprossen nahezu unabhängig voneinander, wodurch eine kleine Korrelationslänge zustande kommt. Die Leitersysteme konnten somit in diesem Bereich durch eine lokale Singulett-Näherung beschrieben werden, bei der das Hüpfen t parallel zu den Ketten störungstheoretisch behandelt wurde. Mit Hilfe dieser Näherung ließen sich die exakten QMC-Daten der spektralen Dichte sowie der Spin- und Ladungssuszeptibilität in zum Teil quantitativer Übereinstimmung reproduzieren. Die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ enthält dabei jeweils ein cosinus-förmiges Band in beiden k_{\perp} -Kanälen, welches den größten Anteil des spektralen Gewichtes trägt. Dieses entsteht durch einen Einteilchen-Zustand an einer einzelnen Sprosse, die in Richtung der Ketten delokalisiert ist. Die Spin- und Ladungssuszeptibilität besitzt entsprechend dem lokalen Singulett-Bild nahezu kein spektrales Gewicht im $q_{\perp} = 0$ -Kanal. Der $q_{\perp} = \pi$ -Kanal der Spin-Response-Funktion besteht im Gegensatz dazu aus einer deutlich ausgeprägten Magnon-Mode, d.h. der Propagation eines Spin-Triplett-Zustandes durch den Spin-Singulett-Hintergrund. Die Ladungs-Response-Funktion beinhaltet für $q_{\perp} = \pi$ eine dispersionslose Mode, die einer Ladungsanregung an einer Sprosse entspricht, und eine bandähnliche Struktur mit geringem spektralem Gewicht, die durch Teilchen-Loch-Anregungen zustande kommt.

Bei einer kleinen Kopplung $t_{\perp} \lesssim 2t$ ist die Spin-Spin-Korrelation groß genug, so daß sich das Leitersystem durch einen langreichweitigen Antiferromagneten annähern läßt. Dies führte zur Anwendung der Spin-Dichte-Welle-Theorie, die sowohl die dynamischen Ein- und Zweiteilchen-Spektren in qualitativer Übereinstimmung mit den QMC/MaxEnt-Ergebnis reproduzieren konnte. Die spektrale Dichte zeigte sowohl im bindenden als auch im antibindenden Kanal zwei Bänder (jeweils im Photoemissions- und inversen Photoemissionsbereich), die durch eine Energielücke voneinander getrennt sind. Ferner war insbesondere bei $k = 0$ und $k = \pi$ eine weitere Aufspaltung dieser Bänder in den QMC-Daten zu erkennen, die auf einen sog. *spin-wave-shake-off*-Effekt hinweist und somit das Zugrundeliegen einer Spin-Dichte-Welle untermauert.

Das Bild der lokalen Singulett-Näherung ließ sich im Fall großer Kopplung $t_{\perp} \gtrsim 2t$ ebenso bei Dotierung anwenden. Es wurde gezeigt, daß die effektive Bandstruktur der spektralen Dichte bei einer Dotierung von einem Loch quantitativ durch diese sog. *Local-Rung-Approximation* beschrieben werden kann. Ferner konnten die daraus erwar-

teten lokalen Ladungs- bzw. Spinanregungen in der Spin- und Ladungssuszeptibilität im $q_{\perp} = \pi$ -Kanal beobachtet werden. Im Gegensatz zum halbgefüllten Fall enthält der $q_{\perp} = 0$ -Kanal der Ladungs-Response-Funktion zudem eine deutlich ausgeprägte, gaplose Mode, die den Übergang vom Metall zum Isolator signalisiert.

Zusätzlich wurde bei einer mittleren Dotierung von $\langle n \rangle = 0.875$ und einer für die experimentell realisierbaren Leitersysteme relevanten isotropen Kopplung von $t_{\perp} = t$ simuliert. Die spektrale Dichte $A(\vec{k}, \omega)$ zeigte hier zwei wesentliche Merkmale: Erstens einen mehrere t breiten inkohärenten Hintergrund, der in analoger Form bereits in ein- und zweidimensionalen Systemen beobachtet wurde, und zweitens eine quasiteilchen-ähnliche Struktur, die mit Hilfe der *Slave-Boson-Mean-Field*-Methode wiedergegeben werden konnte. Ferner war der reminiscente Charakter einer Spin-Dichte-Welle und der daraus resultierende *spin-wave-shake-off*-Effekt zu erkennen. Die wesentlichen Eigenschaften der Ladungssuszeptibilität bei diesem Parametersatz konnten desweiteren durch eine *Random-Phase-Approximation* (RPA) beschrieben werden. Im Gegensatz dazu ergaben sich im entsprechenden Spinkanal Anzeichen für das Auftreten eines Spingaps, welches durch die RPA-Näherung nicht wiedergegeben werden kann. Ferner konnte durch den Einsatz eines komplexen, großkanonischen QMC-Algorithmus bei dem gleichen isotropen Parametersatz zusätzlich eine sorgfältige *finite-size*-Studie der superfluiden Dichte durchgeführt werden. Dieses komplexe QMC-Verfahren erlaubt die direkte Berechnung der superfluiden Dichte in Abhängigkeit von der Temperatur, und zwar ohne Einschränkung auf bestimmte Symmetriekanäle und ohne Vernachlässigung von Retardierungseffekten. Dabei wurde jedoch kein Hinweis auf einen Kosterlitz-Thouless-artigen Übergang bei Temperaturen bis zu $k_B T/t = 0.1$ gefunden.

Schließlich wurde die Natur des Einteilchen-Hüpfens zwischen zwei gekoppelten Hubbard-Ketten ausführlich untersucht [97]. Hier fanden drei verschiedene „Diagnostic Operators“ Anwendung, die den Nachweis von sog. inkohärentem Einteilchen-Hüpfen senkrecht zu den Ketten ermöglichen. Im Gegensatz zu Ergebnissen im tJ -Modell ist die Frage nach der Integrabilität des Systems hier nicht relevant für kohärentes Verhalten. Vielmehr wurde im System aus gekoppelten Hubbard-Ketten mit zusätzlicher, längerreichweitiger Coulomb-Wechselwirkung erstmals das Auftreten von inkohärentem Hüpfen bei Werten der anomalen Dimension von $\alpha \gtrsim 0.5$ eindeutig nachgewiesen. Diese Entdeckung hat tiefgreifende Konsequenzen auf das Verständnis der Mehrschicht-Hochtemperatur-Supraleiter, die pro Elementarzelle mehrere gekoppelte CuO_2 -Ebenen enthalten, und somit ebenfalls derartiges inkohärentes Hüpfen aufweisen können.

Motiviert durch technische Fortschritte und zum Teil widersprüchliche Ergebnisse in der Literatur wurde das für die Hochtemperatur-Supraleiter (HTSL) relevante Drei-Band-Hubbard-Modell auf das Auftreten von langreichweitiger, supraleitender Ordnung (*off-diagonal-long-range-order*, ODLRO) untersucht und so der Schritt zu zwei Dimensionen vollzogen. Dabei kam ein Verfahren zur Erzeugung einer optimierten Testwellenfunktion zum Einsatz, welches es erstmals ermöglichte, im Drei-Band-Hubbard-Modell jede relevante Dotierung im Grundzustand mit Hilfe des Projektor-QMC-Verfahrens zu simulieren. Trotz des Vorzeichenproblems erlaubte diese Methode für einen Parametersatz, der konsistent die Normalzustandseigenschaften der HTSL wiedergeben kann ($U_d/t_{pd} = 6$, $\Delta/t_{pd} = 4$), die Analyse von Kristallgittern mit bis zu 8×8 -Einheitszellen.

In diesen Systemen wurden die Paar-Paar-Korrelationsfunktionen im s -Wellen-, im erweiterten s^* -Wellen- und im d -Wellen-Kanal in Abhängigkeit von der Dotierung bei $T = 0$ untersucht und die dabei auftretenden *finite-size*-Effekte studiert. Während bei lokaler s -Wellen-Symmetrie der effektive $\vec{q} = (0, 0)$ -Wechselwirkungsvertex repulsiv ist, wurde im *extended* s^* -Wellen- und im d -Wellen-Kanal ein attraktiver Vertex im Grundzustand gefunden. Darüberhinaus entspricht im erweiterten s^* -Kanal die Dotierungsabhängigkeit des Vertex den experimentellen Ergebnissen, wobei die im großkanonischen Fall simulierte Temperatur $k_B T/t_{pd} = 0.1$ noch weit vom Sättigungsbereich entfernt ist, der durch den $T = 0$ Projektor-Algorithmus erreicht wurde.

Relevant für langreichweitige, supraleitende Ordnung (ODLRO) ist jedoch der Wechselwirkungsvertex $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{r})$ für große Werte von $|\vec{r}|$, da in dieser Größe weniger *finite-size*-Effekte zu erwarten sind als in $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{q} = (0, 0))$. Obwohl für $\vec{r} = (2, 2)$ ein positives Signal in einem 4×4 -System bei einer Lochdotierung von $\langle n \rangle \approx 1.3$ gefunden wurde, ergab die Analyse der Abhängigkeit von $P_\alpha^{\text{Vertex}}(\vec{r})$ von der Systemgröße in sämtlichen betrachteten Symmetriekanälen selbst bei $T = 0$ keinen Hinweis auf langreichweitige Ordnung. Aus diesen Ergebnissen wird für zukünftige Forschungsaktivitäten deutlich, daß für die endgültige theoretische Beschreibung der HTSL zusätzliche Mechanismen notwendig sind, die im topologisch bereits korrektem Drei-Band-Hubbard-Modell nicht berücksichtigt sind.

Anhang A

Die Hubbard-Kette mit zwei Plätzen

In diesem Anhang soll explizit ein Hamiltonoperator für zwei Gitterplätze (einer einzelnen Sprosse im System von gekoppelten Hubbard-Ketten) mit einer lokalen Wechselwirkung U und einem Hüpfen t_\perp berechnet werden. Der Hamiltonoperator ist dabei gegeben durch (siehe Gl. 3.21)

$$H_i^{\text{Sprosse}} = -t_\perp \sum_\sigma (c_{i,1\sigma}^\dagger c_{i,2\sigma} + h.c.) + U \sum_\lambda n_{i,\lambda\uparrow} n_{i,\lambda\downarrow}. \quad (\text{A.1})$$

Pro Platz sind vier Zustände ($|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ und $|\uparrow\downarrow\rangle$) möglich, so daß insgesamt 16 verschiedene Eigenzustände existieren. Da dieser Hamiltonoperator jedoch sowohl die Teilchenzahlen N_\uparrow und N_\downarrow , den Gesamtspin \vec{S}^2 als auch den Gesamtimpuls k_\perp erhält, ist es sinnvoll, innerhalb dieser Unterräume zu diagonalisieren. Beispielsweise sind für $N_\uparrow = 1$, $N_\downarrow = 1$ (Halbfüllung), $\langle \vec{S}^2 \rangle = 0$ und $k_\perp = 0$ folgende Zustände möglich:

$$|\Phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle), \quad (\text{A.2})$$

$$|\Phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle). \quad (\text{A.3})$$

In diesem Unterraum läßt sich der Hamiltonoperator als 2×2 -Matrix schreiben:

$$H_{i, N_\uparrow=1, N_\downarrow=1, \langle \vec{S}^2 \rangle=0, k_\perp=0}^{\text{Sprosse}} = \begin{pmatrix} U & -2t_\perp \\ -2t_\perp & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Nr.	$\langle \hat{N} \rangle$	Energie	$\langle \vec{S}^2 \rangle$	Impuls k_\perp	Zustand
0.	0	$E_0 = 0$	0	$k_\perp = 0$	$ \Psi_0\rangle = vac\rangle$
1.	1	$E_1 = t_\perp$	$\frac{3}{4}$	$k_\perp = \pi$	$ \Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (0, \uparrow\rangle - \uparrow, 0\rangle)$
2.	1	$E_2 = -t_\perp$	$\frac{3}{4}$	$k_\perp = 0$	$ \Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (0, \uparrow\rangle + \uparrow, 0\rangle)$
3.	1	$E_3 = t_\perp$	$\frac{3}{4}$	$k_\perp = \pi$	$ \Psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (0, \downarrow\rangle - \downarrow, 0\rangle)$
4.	1	$E_4 = -t_\perp$	$\frac{3}{4}$	$k_\perp = 0$	$ \Psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (0, \downarrow\rangle + \downarrow, 0\rangle)$
5.	2	$E_5 = E_b$	0	$k_\perp = 0$	$ \Psi_5\rangle = \frac{1}{N_a} (\uparrow\downarrow, 0\rangle + 0, \uparrow\downarrow\rangle + \frac{E_a}{2t_\perp} (\uparrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow\rangle))$
6.	2	$E_6 = U$	0	$k_\perp = \pi$	$ \Psi_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow, 0\rangle - 0, \uparrow\downarrow\rangle)$
7.	2	$E_7 = 0$	2	$k_\perp = \pi$	$ \Psi_7\rangle = \downarrow, \downarrow\rangle$
8.	2	$E_8 = 0$	2	$k_\perp = \pi$	$ \Psi_8\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow, \downarrow\rangle + \downarrow, \uparrow\rangle)$
9.	2	$E_9 = 0$	2	$k_\perp = \pi$	$ \Psi_9\rangle = \uparrow, \uparrow\rangle$
10.	2	$E_{10} = E_a$	0	$k_\perp = 0$	$ \Psi_{10}\rangle = \frac{1}{N_b} (\uparrow\downarrow, 0\rangle + 0, \uparrow\downarrow\rangle + \frac{E_b}{2t_\perp} (\uparrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow\rangle))$
11.	3	$E_{11} = U + t_\perp$	$\frac{3}{4}$	$k_\perp = 0$	$ \Psi_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle + \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle)$
12.	3	$E_{12} = U - t_\perp$	$\frac{3}{4}$	$k_\perp = \pi$	$ \Psi_{12}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle - \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle)$
13.	3	$E_{13} = U + t_\perp$	$\frac{3}{4}$	$k_\perp = 0$	$ \Psi_{13}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle + \downarrow, \uparrow\downarrow\rangle)$
14.	3	$E_{14} = U - t_\perp$	$\frac{3}{4}$	$k_\perp = \pi$	$ \Psi_{14}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow\downarrow\rangle)$
15.	4	$E_{15} = 2U$	0	$k_\perp = 0$	$ \Psi_{15}\rangle = \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle$

Tabelle A.1: Sämtliche 16 Eigenzustände des Hamiltonoperators H_i^{Sprosse} (siehe Gl. A.1).

Hieraus folgen die exakten Eigenenergien,

$$E_{a,b} = \frac{1}{2} \left(U \mp \sqrt{U^2 + 16t_\perp^2} \right), \quad (\text{A.5})$$

und die entsprechenden Eigenzustände dieses Hamiltonoperators:

$$|\Psi_a\rangle = \frac{1}{N_b} \left(|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle + \frac{E_b}{2t_\perp} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) \right), \quad (\text{A.6})$$

$$|\Psi_b\rangle = \frac{1}{N_a} \left(|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle + \frac{E_a}{2t_\perp} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) \right), \quad (\text{A.7})$$

mit den Normierungsfaktoren $N_{a,b} = \sqrt{2 + E_{a,b}^2/2t_{\perp}^2}$. Auf diese Weise lassen sich sämtliche 16 Eigenzustände von H_i^{Sprosse} berechnen. Diese sind in Tabelle A.1 mit den entsprechenden Werten von $\langle \vec{S}^2 \rangle$ und k_{\perp} aufgelistet.

Anhang B

Die Spinsuszeptibilität in LRA-Näherung

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie innerhalb der lokalen Singulett-Näherung ($t_{\perp} \gg t$) die Dispersion der Spin-Response-Funktion $\chi_s(\vec{q}, \omega)$ für den halbgefüllten Fall berechnet werden kann. Dies soll analog zur Berechnung der Einteilchen-Dispersion $A(\vec{k}, \omega)$ (siehe Abschnitt 3.1.3) erfolgen, d.h. der Gesamthamiltonoperator H wird in den Sprossenanteil H_0 und den Wechselwirkungsanteil H_I zerlegt (siehe Gl. 3.26 und Gl. 3.27), wobei H_0 exakt und H_I störungstheoretisch behandelt wird. Somit muß die Energiedifferenz des Grundzustandes $|\psi_0\rangle$ (Gl. 3.23) mit dem ersten Anregungszustand $|\psi_{S=1}(q)\rangle$ im Spinkanal gebildet werden. Wie in Abb. 3.9 zu erkennen ist, findet dieser Übergang im $q_{\perp} = \pi$ -Kanal zwischen dem $S = 0$ -Grundzustand und dem dreifach entarteten $S = 1$ -Anregungszustand bei gleicher Teilchenzahl statt. Die drei entarteten Anregungszustände sind in Tabelle A.1 mit $|\Psi_7\rangle$, $|\Psi_8\rangle$ und $|\Psi_9\rangle$ bezeichnet. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird hier nur der Zustand $|\Psi_8\rangle = (|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ betrachtet. Analog zu Gl. 3.25 läßt sich daraus ein translationsinvarianter Bloch-Zustand bilden:

$$|\psi_{S=1}(q)\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\ell=1}^L e^{iq\ell} |\ell\rangle_{S=1} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\ell=1}^L e^{iq\ell} |S_1\rangle |S_2\rangle \dots |\Psi_8\rangle_{\ell} \dots |S_L\rangle. \quad (\text{B.1})$$

Die Energien der beiden Zustände im ungestörten Fall sind dabei:

$$E_0 = \langle \psi_0 | H_0 | \psi_0 \rangle = L \cdot E_a, \quad (\text{B.2})$$

$$E_{S=1} = \langle \psi_{S=1}(q) | H_0 | \psi_{S=1}(q) \rangle = (L - 1)E_a. \quad (\text{B.3})$$

Allerdings verschwindet in diesem Fall die Korrektur in 1. Ordnung exakt, d.h.

$$\langle \psi_0 | H_I | \psi_0 \rangle = \langle \psi_{S=1}(q) | H_I | \psi_{S=1}(q) \rangle = 0. \quad (\text{B.4})$$

Um die Dispersion trotzdem berechnen zu können, ist Störungsrechnung in 2. Ordnung notwendig. Dabei sind die Korrekturen der beiden Energien E_0 und $E_{S=1}$ in 2. Ordnung gegeben durch (siehe z.B. [109]):

$$E_0^{(2)} = \sum_{i \neq 0} \frac{|\langle \psi_0 | H_I | \psi_i \rangle|^2}{E_0 - E_i}, \quad (\text{B.5})$$

$$E_{S=1}^{(2)} = \sum_{i \neq \text{„}S=1\text{“}} \frac{|\langle \psi_{S=1}(q) | H_I | \psi_i \rangle|^2}{E_{S=1} - E_i}. \quad (\text{B.6})$$

Im zweiten Fall ($E_{S=1}^{(2)}$) ist eigentlich entartete Störungsrechnung in zweiter Ordnung notwendig. Aufgrund der Symmetrie des Hamiltonoperators H ist jedoch bekannt, daß q und S_z „gute“ Quantenzahlen sind. Es ist somit ausreichend, die Summation in Gl. B.6 nur für $S_z = 0$ und bei festem q durchzuführen.

Zur Berechnung der Korrekturen $E_0^{(2)}$ und $E_{S=1}^{(2)}$ werden folgende Matrixelemente benötigt:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_a | c_{1,2\uparrow} | \Psi_{11} \rangle &= A_1, & \langle \Psi_a | c_{1,2\uparrow}^\dagger | \Psi_3 \rangle &= \mp A_1, \\ \langle \Psi_a | c_{1,2\uparrow} | \Psi_{12} \rangle &= \mp A_2, & \langle \Psi_a | c_{1,2\uparrow}^\dagger | \Psi_4 \rangle &= A_2, \\ \langle \Psi_8 | c_{1,2\uparrow} | \Psi_{11} \rangle &= \pm \frac{1}{2}, & \langle \Psi_8 | c_{1,2\uparrow}^\dagger | \Psi_3 \rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle \Psi_8 | c_{1,2\uparrow} | \Psi_{12} \rangle &= \frac{1}{2}, & \langle \Psi_8 | c_{1,2\uparrow}^\dagger | \Psi_4 \rangle &= \pm \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Dabei ist $A_{1,2} = (1 \mp E_b/2t_\perp)/\sqrt{2}N_b$, ansonsten sind die Bezeichnungen identisch zu Anhang A. Die Zustände, über die in Gl. B.5 und Gl. B.6 summiert werden soll, werden folgendermaßen bezeichnet:

$$\begin{aligned} |\ell; m, m'\rangle &= |S_1\rangle \dots |\Psi_m\rangle_\ell |\Psi_{m'}\rangle_{(\ell+1)} \dots |S_L\rangle, \\ |\ell; m, m'; \ell'\rangle &= |S_1\rangle \dots |\Psi_8\rangle_{\ell'} \dots |\Psi_m\rangle_\ell |\Psi_{m'}\rangle_{(\ell+1)} \dots |S_L\rangle, \end{aligned}$$

mit $\ell \neq \ell'$ und $\ell \neq \ell' - 1$. Die weitere Berechnung von $E_0^{(2)}$ führt schließlich auf folgende Matrixelemente (für den Spin-up Anteil des Hamiltonoperators H_I):

$$\langle \psi_0 | H_I^\dagger | \ell; 3, 12 \rangle = \langle \psi_0 | H_I^\dagger | \ell; 12, 3 \rangle = -2tA_1A_2, \quad (\text{B.7})$$

$$\langle \psi_0 | H_I^\dagger | \ell; 4, 11 \rangle = \langle \psi_0 | H_I^\dagger | \ell; 11, 4 \rangle = 2tA_1A_2. \quad (\text{B.8})$$

Die Energien der entsprechenden Zustände sind dabei

$$\langle \ell; 3, 12 | H_0 | \ell; 3, 12 \rangle = \langle \ell; 12, 3 | H_0 | \ell; 12, 3 \rangle = (L - 2)E_a + U, \quad (\text{B.9})$$

$$\langle \ell; 4, 11 | H_0 | \ell; 4, 11 \rangle = \langle \ell; 11, 4 | H_0 | \ell; 11, 4 \rangle = (L - 2)E_a + U. \quad (\text{B.10})$$

Durch Einsetzen in Gl. B.5 folgt somit insgesamt:

$$\begin{aligned} E_0^{(2)} &= \underbrace{2}_{\text{Spin}} \cdot L \cdot 4 \cdot \frac{4t^2 L (A_1 A_2)^2}{L E_a - ((L - 2)E_a + U)} \\ &= \frac{32t^2 L (A_1 A_2)^2}{2E_a - U} = \frac{t^2 L}{E_a - U/2} \left(\frac{1 - E_b^2/4t_\perp}{1 + E_b^2/4t_\perp} \right)^2. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Um die entsprechende Korrektur $E_{S=1}^{(2)}$ zu berechnen, sind die Matrixelemente des Störoperators H_I von dem in Gl. B.1 implizit definierten Zustand $|\ell\rangle_{S=1}$ mit $|\ell; m, m'\rangle$ und $|\ell; m, m'; \ell'\rangle$ notwendig. Für die von Null verschiedenen Matrixelemente gilt:

$${}_{S=1}\langle \ell | H_I^\dagger | \ell'; 3, 11 \rangle = {}_{S=1}\langle \ell | H_I^\dagger | \ell'; 11, 3 \rangle = -tA_1(\delta_{\ell, \ell'} - \delta_{\ell, \ell'+1}), \quad (\text{B.12})$$

$${}_{S=1}\langle \ell | H_I^\dagger | \ell'; 4, 12 \rangle = {}_{S=1}\langle \ell | H_I^\dagger | \ell'; 12, 4 \rangle = tA_2(\delta_{\ell, \ell'} - \delta_{\ell, \ell'+1}), \quad (\text{B.13})$$

$${}_{S=1}\langle \ell | H_I^\dagger | \ell'; 3, 12; \ell'' \rangle = {}_{S=1}\langle \ell | H_I^\dagger | \ell'; 12, 3; \ell'' \rangle = -2tA_1 A_2 \delta_{\ell, \ell''}, \quad (\text{B.14})$$

$${}_{S=1}\langle \ell | H_I^\dagger | \ell'; 4, 11; \ell'' \rangle = {}_{S=1}\langle \ell | H_I^\dagger | \ell'; 11, 4; \ell'' \rangle = 2tA_1 A_2 \delta_{\ell, \ell''}. \quad (\text{B.15})$$

Für die entsprechenden Matrixelemente mit $|\psi_{S=1}(q)\rangle$ folgt somit:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{S=1}(q) | H_I^\dagger | \ell'; 3, 11 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\ell=1}^L e^{-iq\ell} {}_{S=1}\langle \ell | H_I^\dagger | \ell'; 3, 11 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{L}} \left(e^{-iq\ell'} (-tA_1) + e^{-iq(\ell'+1)} tA_1 \right) \\ &= -\frac{2itA_1}{\sqrt{L}} e^{-iq\ell'} e^{-iq/2} \sin(q/2), \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

$$\langle \psi_{S=1}(q) | H_I^\dagger | \ell'; 4, 12 \rangle = \frac{2itA_2}{\sqrt{L}} e^{-iq\ell'} e^{-iq/2} \sin(q/2), \quad (\text{B.17})$$

$$\langle \psi_{S=1}(q) | H_I^\dagger | \ell'; 3, 12; \ell'' \rangle = -\frac{2tA_1 A_2}{\sqrt{L}} e^{-iq\ell''}, \quad (\text{B.18})$$

$$\langle \psi_{S=1}(q) | H_I^\dagger | \ell'; 4, 11; \ell'' \rangle = \frac{2tA_1 A_2}{\sqrt{L}} e^{-iq\ell''}. \quad (\text{B.19})$$

Die weiteren vier Matrixelemente, die durch Vertauschen von $3 \leftrightarrow 11$, $4 \leftrightarrow 12$, $3 \leftrightarrow 12$ und $4 \leftrightarrow 11$ entstehen, besitzen jeweils die identischen Werte. Die Energien der

Zustände $|\ell'; m; m'; \ell''\rangle$ sind zudem gegeben durch

$$\begin{aligned}\langle \ell'; 3, 12; \ell'' | H_0 | \ell'; 3, 12; \ell'' \rangle &= \langle \ell'; 4, 11; \ell'' | H_0 | \ell'; 4, 11; \ell'' \rangle = (L - 3)E_a + U, \\ \langle \ell'; 3, 11 | H_0 | \ell'; 3, 11 \rangle &= (L - 2)E_a + U + 2t_\perp, \\ \langle \ell'; 4, 12 | H_0 | \ell'; 4, 12 \rangle &= (L - 2)E_a + U - 2t_\perp.\end{aligned}$$

Durch Einsetzen dieser Ergebnisse in Gl. B.6 folgt für die Energiekorrektur $E_{S=1}^{(2)}$:

$$\begin{aligned}E_{S=1}^{(2)} &= 4L \left[\frac{4t^2 \sin^2(q/2)}{L} \left(\frac{A_1^2}{E_a - U - 2t_\perp} + \frac{A_2^2}{E_a - U + 2t_\perp} \right) \right. \\ &\quad \left. + 2(L - 2) \frac{4t^2 (A_1 A_2)^2}{L(2E_a - U)} \right] \\ &= -16t^2 \sin^2(q/2) \left(\frac{A_1^2}{E_b + 2t_\perp} + \frac{A_2^2}{E_b - 2t_\perp} \right) + \frac{32t^2 (L - 2) (A_1 A_2)^2}{2E_a - U}.\end{aligned}\tag{B.20}$$

Mit dem Ergebnis von $E_0^{(2)}$ (Gl. B.11) ergibt sich schließlich für die Dispersion $\omega_{Spin}(q)$ der Spinsuszeptibilität:

$$\boxed{\omega_{Spin}(q) = -E_a - \frac{64t^2 (A_1 A_2)^2}{2E_a - U} - 16t^2 \sin^2(q/2) \left(\frac{A_1^2}{E_b + 2t_\perp} + \frac{A_2^2}{E_b - 2t_\perp} \right).}$$

(Spin-Dispersion der LRA-Näherung)

Im Heisenberg-Limes, $U \gg t, t_\perp$, folgt für diese Dispersion mit $E_a \approx -4t_\perp^2/U = -J_\perp$, $J = 4t^2/U$, $E_b \approx U$ und $A_{1,2} \approx \mp \frac{1}{2}$:

$$\omega_{Spin}(q) \longrightarrow J_\perp + J \cos(q) \quad \text{für } U \gg t_\perp \gg t.\tag{B.21}$$

Dieses Ergebnis stimmt mit dem Resultat von T. Barnes et al. [74] für zwei gekoppelte Heisenberg-Ketten überein.

Anhang C

Die Darstellung von $P_{1,2}(E)$ durch die spektrale Dichte

Im folgenden soll gezeigt werden, wie die Wahrscheinlichkeit $P_{1,2}(\tau)$, die in Gl. 4.27 des Abschnittes 4.4.2 definiert wird, durch die spektrale Dichte $A(k, k_\perp, \omega)$ ausgedrückt werden kann. Die Spinindizes werden dabei aus Gründen der Übersichtlichkeit weggelassen. Durch Einsetzen der entsprechenden Fermionenoperatoren im Impulsraum, $c_{k,0} = (c_{k,1} + c_{k,2})/\sqrt{2}$ und $c_{k,\pi} = (c_{k,1} - c_{k,2})/\sqrt{2}$, in Gl. 4.27 folgt

$$\begin{aligned}
 P_{1,2}(\tau) &= |\langle c_{k,(1,2)}(\tau)c_{k,1}^\dagger \rangle|^2 = \left| \frac{1}{2} \left(\langle c_{k,(1,2)}(\tau)c_{k,1}^\dagger \rangle + \langle c_{k,(2,1)}(\tau)c_{k,2}^\dagger \rangle \right) \right|^2 \\
 &= \left| \frac{1}{4} \langle c_{k,0}(\tau)c_{k,0}^\dagger + c_{k,0}(\tau)c_{k,\pi}^\dagger \pm c_{k,\pi}(\tau)c_{k,0}^\dagger \pm c_{k,\pi}(\tau)c_{k,\pi}^\dagger + \right. \\
 &\quad \left. c_{k,0}(\tau)c_{k,0}^\dagger - c_{k,0}(\tau)c_{k,\pi}^\dagger \mp c_{k,\pi}(\tau)c_{k,0}^\dagger \pm c_{k,\pi}(\tau)c_{k,\pi}^\dagger \rangle \right|^2 \\
 &= \frac{1}{4} \left| \langle c_{k,0}(\tau)c_{k,0}^\dagger \pm c_{k,\pi}(\tau)c_{k,\pi}^\dagger \rangle \right|^2. \tag{C.1}
 \end{aligned}$$

Der erste Term des letzten Ausdrucks läßt sich folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned}
 \langle c_{k,0}(\tau)c_{k,0}^\dagger \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n | c_{k,0}(\tau) | m \rangle \langle m | c_{k,0}^\dagger | n \rangle \\
 &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{i\tau E_n} e^{-i\tau E_m} |\langle n | c_{k,0} | m \rangle|^2, \tag{C.2}
 \end{aligned}$$

wobei Z die Zustandssumme und $|n\rangle$ bzw. $|m\rangle$ vollständige Sätze von Eigenfunktionen des Hamiltonoperators H mit den entsprechenden Eigenwerten E_n bzw. E_m sind. Die

Fourier-Transformation in den ω -Raum führt zu

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty e^{i\omega\tau} \langle c_{k,0}(\tau) c_{k,0}^\dagger \rangle d\tau \\ &= \frac{1}{Z} \int_0^\infty \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{i(\omega - (E_m - E_n))\tau} |\langle n | c_{k,0} | m \rangle|^2 d\tau \\ &= \frac{\pi}{Z} \sum_{n,m} |\langle n | c_{k,0} | m \rangle|^2 e^{-\beta E_n} \delta(\omega - (E_m - E_n)). \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Ferner ist die spektrale Dichte $A(k, k_\perp, \omega)$ in Lehmann-Darstellung gegeben durch

$$A(k, k_\perp, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} |\langle n | c_{k,k_\perp} | m \rangle|^2 e^{-\beta E_n} (1 + e^{-\beta\omega}) \delta(\omega - (E_m - E_n)), \quad (\text{C.4})$$

wobei $k_\perp = 0$ und $k_\perp = \pi$ für den bindenden und antibindenden Kanal stehen. Der Vergleich mit dem Ergebnis aus Gl. C.3 führt zu

$$\int_0^\infty e^{i\omega\tau} \langle c_{k,0}(\tau) c_{k,0}^\dagger \rangle d\tau = \pi \frac{A(k, 0, \omega)}{1 + e^{-\beta\omega}} \quad (\text{C.5})$$

oder

$$\langle c_{k,0}(\tau) c_{k,0}^\dagger \rangle = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty \frac{A(k, 0, \omega)}{1 + e^{-\beta\omega}} e^{-i\omega\tau} d\omega. \quad (\text{C.6})$$

Das Einsetzen dieser Gleichung und des entsprechenden Ausdrucks für $k_\perp = \pi$ in Gl. C.1 führt zur Fourier-Transformierte von $P_{1,2}(\tau)$:

$$\begin{aligned} P_{1,2}(E) &= \int_0^\infty e^{iE\tau} P_{1,2}(\tau) d\tau \\ &= \frac{1}{4} \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^\infty d\omega \int_{-\infty}^\infty d\omega' e^{i(E - \omega + \omega')\tau} \frac{A_{1,2}(k, \omega)}{1 + e^{-\beta\omega}} \frac{A_{1,2}(k, \omega')}{1 + e^{-\beta\omega'}}, \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

mit

$$A_{1,2}(k, \omega) = \frac{1}{2} (A(k, k_\perp = 0, \omega) \pm A(k, k_\perp = \pi, \omega)). \quad (\text{C.8})$$

Durch Entwicklung des Integrals $\int d\tau$ läßt sich die Größe $P_{1,2}(E)$ schließlich als Faltung von Spektralfunktionen schreiben:

$$\boxed{P_{1,2}(E) = \frac{\pi}{4} \int_{-\infty}^\infty \frac{A_{1,2}(k, \omega)}{1 + e^{-\beta\omega}} \frac{A_{1,2}(k, \omega - E)}{1 + e^{-\beta(\omega - E)}} d\omega.} \quad (\text{C.9})$$

(Darstellung von $P_{1,2}(E)$ durch die spektrale Dichte)

Literaturverzeichnis

- [1] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
- [2] M.C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963).
- [3] J.G. Bednorz und K.A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [4] P.W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [5] M.K. Wu, J.R. Ashburn, C.J. Torng, P.H. Hor, R.L. Meng, L. Gao, Z.J. Huang, Y.Q. Wang und C.W. Chu, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 908 (1987).
- [6] V.J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [7] E.H. Lieb und F.Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
- [8] H. Schulz, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2831 (1990).
- [9] H. Frahm und V.E. Korepin, *Phys. Rev. B* **42**, 10553 (1990).
- [10] D.C. Mattis und E.H. Lieb, *J. Math. Phys.* **6**, 304 (1965).
- [11] D.C. Johnston, J.W. Johnston, D.P. Goshorn und A.J. Jacobson, *Phys. Rev. B* **35**, 219 (1987).
- [12] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, Y. Kitaoka, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3463 (1994).
- [13] Z. Hiroi und M. Takano, *Nature* **377**, 41 (1995).
- [14] E. Dagotto und T.M. Rice, *Science* **271**, 618 (1996).
- [15] K. Ishida, Y. Kitaoka, K. Asayama, M. Azuma, Z. Hiroi und M. Takano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 3222 (1994).

-
- [16] R.M. Noack, S.R. White und D.J. Scalapino, *Europhys. Lett.* **30**, 163 (1995).
- [17] C.A. Hayward, D. Poilblanc, R.M. Noack, D.J. Scalapino und W. Hanke, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 926 (1995).
- [18] S. Chakravarty, A. Sudbø, P.W. Anderson und S.P. Strong, *Science* **261**, 337 (1993).
- [19] D.G. Clarke, S.P. Strong und P.W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3218 (1994).
- [20] D.G. Clarke und S.P. Strong, Preprint cond-mat/9510168, (1995).
- [21] F. Mila und D. Poilblanc, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 287 (1996).
- [22] P.W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1839 (1990).
- [23] G. Dopf, A. Muramatsu und W. Hanke, *Phys. Rev. B* **41**, 9264 (1990).
- [24] G. Dopf, Dissertation, Universität Würzburg, (1991).
- [25] G. Dopf, A. Muramatsu und W. Hanke, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 353 (1992).
- [26] G. Dopf, J. Wagner, P. Dieterich, A. Muramatsu und W. Hanke, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2082 (1992).
- [27] F.F. Assaad, W. Hanke und D.J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **50**, 12835 (1994).
- [28] K. Kuroki und H. Aoki, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4400 (1996).
- [29] T. Barnes und J. Riera, *Phys. Rev. B* **50**, 6817 (1994).
- [30] R.S. Eccleston, T. Barnes, J. Brody und J.W. Johnson, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2626 (1994).
- [31] R.M. Noack, S.R. White und D.J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 882 (1994).
- [32] M. Fabrizio, A. Parola und E. Tosatti, *Phys. Rev. B* **46**, 3159 (1992).
- [33] M. Fabrizio, *Phys. Rev. B* **48**, 15838 (1993).
- [34] J. Sólyom, *Adv. Phys.* **28**, 201 (1979).
- [35] L. Balents und M.P.A. Fisher, *Phys. Rev. B* **53**, 12133 (1996).

-
- [36] A. Luther und V.J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 589 (1974).
- [37] M. Imada, *Phys. Rev. B* **48**, 550 (1993).
- [38] J. Voit, Preprint cond-mat/9602087, (1996).
- [39] S.R. White, R.M. Noack und D.J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 886 (1994).
- [40] S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [41] S.R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
- [42] V.J. Emery und G. Reiter, *Phys. Rev. B* **38**, 4547 (1988).
- [43] J. Zaanen und A.M. Oleś, *Phys. Rev. B* **37**, 9423 (1988).
- [44] A. Muramatsu, R. Zeyher und D. Schmeltzer, *Europhys. Lett.* **7**, 473 (1988).
- [45] G. Sugiyama und S.E. Koonin, *Annals of Physics* **168**, 1 (1986).
- [46] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **58**, 755 (1977); M. Suzuki, *Comm. Math. Phys.* **51**, 183 (1976); H.F. Trotter, *Prog. Am. Math. Soc.* **10**, 545 (1959).
- [47] J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **28**, 4059 (1983).
- [48] J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **31**, 4403 (1985).
- [49] E.Y. Loh und J.E. Gubernatis, in *Electronic Phase Transitions*, herausgegeben von W. Hanke und Y. Kopaeu, Elsevier, New York, 1990.
- [50] A.L. Fetter und J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, New York, 1971.
- [51] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling und B.P. Flannery, *Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [52] R. Blankenbecler, D.J. Scalapino und R.L. Sugar, *Phys. Rev. D* **24**, 2278, (1981).
- [53] F. Lorenz, *Lineare Algebra II*, BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1992.
- [54] E.Y. Loh, J.E. Gubernatis, R.T. Scalettar, S.R. White, D.J. Scalapino und R.L. Sugar, *Phys. Rev. B* **41**, 9301 (1990).

- [55] R.G. Miller, *Biometrika* **61**, 1 (1974).
- [56] B.A. Berg, *Computer Physics Communications* **69**, 7 (1992).
- [57] N. Furukawa und M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 3669 (1991).
- [58] N. Furukawa und M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 3331 (1992).
- [59] R. Preuss, Diplomarbeit, Universität Würzburg, (1993).
- [60] R. Preuss, Dissertation, Universität Würzburg, (1996).
- [61] S.R. White, *Phys. Rev. B* **44**, 4670 (1991).
- [62] W. von der Linden, R. Preuss und W. Hanke, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 3881 (1996).
- [63] M. Jarrell und J.E. Gubernatis, *Physics Reports* **269**, 133 (1996).
- [64] R.N. Silver, D.S. Sivia und J.E. Gubernatis, *Phys. Rev. B* **41**, 2380 (1990).
- [65] R. Preuss, W. Hanke und W. von der Linden, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1344 (1995).
- [66] N. Bulut, D.J. Scalapino und S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 748 (1994).
- [67] N. Bulut, D.J. Scalapino und S.R. White, *Phys. Rev. B* **50**, 7215 (1994).
- [68] N. Bulut, D.J. Scalapino und S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 705 (1994).
- [69] H. Endres, R.M. Noack, W. Hanke, D. Poilblanc und D.J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **53**, 5530 (1996).
- [70] J.R. Schrieffer, X.G. Wen und S.C. Zhang, *Phys. Rev. B* **39**, 11663 (1989).
- [71] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City, 1991.
- [72] Die *Slave-Boson-Mean-Field*-Berechnungen wurden von W. Ziegler, Universität Würzburg, durchgeführt.
- [73] L. Lilly, A. Muramatsu und W. Hanke, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1379 (1990).
- [74] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera und E.S. Swanson, *Phys. Rev. B* **47**, 3196 (1993).

- [75] I. Bose und S. Gayan, *Phys. Rev. B* **48**, 10653 (1993).
- [76] W. Hanke und L.J. Sham, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 387 (1979); *Phys. Rev. B* **21**, 4656 (1980).
- [77] W. Ziegler, Diplomarbeit, Universität Würzburg, (1993).
- [78] W. Ziegler, P. Dieterich, A. Muramatsu und W. Hanke, *Phys. Rev. B* **53**, 1231 (1996).
- [79] R. Preuss, A. Muramatsu, W. von der Linden, P. Dieterich, F.F. Assaad und W. Hanke, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 732 (1994).
- [80] J. Altmann, W. Brenig, A.P. Kampf und E. Müller-Hartmann, *Phys. Rev. B* **52**, 7395 (1995).
- [81] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, second edition, Plenum Press, New York, 1993.
- [82] F.F. Assaad, W. Hanke und D.J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1915 (1993).
- [83] F.F. Assaad, W. Hanke und D.J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **49**, 4327 (1994).
- [84] N. Byers und C.N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **7**, 46 (1961).
- [85] O.K. Andersen, A.I. Liechtenstein, O. Jepsen und F. Paulsen, *J. Phys. Chem. Solids* **56**, 1573 (1995).
- [86] A.I. Liechtenstein, O. Gunnarsson, O.K. Andersen und R.M. Martin, Preprint cond-mat/9509101, eingereicht bei *Phys. Rev. Lett.*, (1995).
- [87] M.C. Schabel, C.H. Park, A. Matsuura, Z.X. Shen, D.A. Bonn, R. Liang und W.N. Hardy, Preprint (1995).
- [88] H. Ding, J.C. Campuzano, A.F. Bellman, T. Yokoya, M.R. Norman, M. Randeria, T. Takahashi, H. Katayama-Yoshida, T. Mochiku, K. Kadowaki und G. Jennings, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2784 (1995).
- [89] H. Ding, A.F. Bellman, J.C. Campuzano, M. Randeria, M.R. Norman, T. Yokoya, T. Takahashi, H. Katayama-Yoshida, T. Mochiku, K. Kadowaki, G. Jennings und G.P. Brivio, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1533 (1996).

- [90] S.L. Cooper und K.E. Gray, *Physical Properties of High Temperature Superconductors IV*, D.M. Ginsberg (ed.) (World Scientific), 1994.
- [91] K. Tamasaku, T. Ito, H. Takagi und S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3088 (1994).
- [92] S.L. Cooper, P. Nyhus, D. Reznik, M.V. Klein, W.C. Lee, D.M. Ginsberg, B.W. Veal, A.P. Paulikas und B. Dabrowski, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1533 (1993).
- [93] A.J. Leggett, S. Chakravarty, A.T. Dorsey, M.P.A. Fisher, A. Garg und W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
- [94] C. Gerthsen, H.O. Kneser und H. Vogel, *Physik*, 16. Auflage, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1989.
- [95] H. Schulz, *Fermi liquids and non-Fermi liquids*, Les Houches lecture notes, cond-mat/9503150, (1994).
- [96] S. Chakravarty, private Mitteilung.
- [97] D. Poilblanc, H. Endres, F. Mila, M.G. Zacher, S. Capponi und W. Hanke, Preprint cond-mat/9605106, (1996).
- [98] M.G. Zacher, Diplomarbeit, Universität Würzburg, (1996).
- [99] B.S. Shastry, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2453 (1986).
- [100] J. Voit, *Reports on Progress in Physics* **58**, 977 (1995).
- [101] F. Mila und K. Penc, *Synthetic Metals* **70**, 997 (1995).
- [102] D.J. Scalapino, *Physics Reports* **250**, 329 (1995).
- [103] C.N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962).
- [104] N.D. Mermin und H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [105] J.M. Kosterlitz und D.J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
- [106] A. Moreo und D.J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 946 (1991).
- [107] S.R. White, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, N.E. Bickers und R.T. Scalettar, *Phys. Rev. B* **39**, 839 (1989).

- [108] J.B. Torrance, A. Bezing, A.I. Nazzal, T.C. Huang, S.S.P. Parkin, D.T. Keane, S.J. LaPlaca, P.M. Horn und G.A. Held, *Phys. Rev. B* **40**, 8872 (1989).
- [109] B.H. Bransden und C.J. Joachain, *Physics of atoms and molecules*, Longman Scientific & Technical, New York, 1983.

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. W. Hanke für die interessante Themenstellung in einem aktuellen Forschungsgebiet, für viele hilfreiche Diskussionen bei der Betreuung der Arbeit und somit für die Möglichkeit, während meiner Doktorarbeit an der „Forschungsfront“ mitzuarbeiten, bedanken.

Meinen drei Zimmergenossen Herrn Dipl.-Phys. S. Meixner, Herrn Dr. R. Preuss und Herrn Dipl.-Phys. W. Ziegler, die mich schon seit meiner Diplomarbeit „begleiten“, sage ich ein ganz persönliches Dankeschön für unzählige aufbauende Gespräche, nicht nur über physikalische Themen. Diese „social events“, das lockere Arbeitsklima und die daraus entstandenen persönlichen Beziehungen haben dazu beigetragen, daß mir die fünf Jahre meiner Diplom- und Doktorarbeit in angenehmer Erinnerung bleiben werden.

Herrn Priv. Doz. Dr. W. von der Linden und Herrn Dr. R. Preuss möchte ich für die Bereitstellung und die Hilfe mit dem MaxEnt-Programm danken. Herrn Prof. Dr. A. Muramatsu danke ich für zahlreiche, fruchtbare Diskussionen und Anregungen während seiner Zeit in Würzburg zu Beginn meiner Doktorarbeit. Für zahlreiche Dialoge, vor allem über gekoppelte Ketten sei Herrn Dr. R. Noack gedankt, für die Hilfe beim Verständnis der langreichweitigen Ordnung im Drei-Band-Hubbard-Modell Herrn Dr. H.G. Evertz.

Danken möchte ich zudem meinen drei Diplomanden, Herrn Dipl.-Phys. F. Matzkies, Herrn Dipl.-Phys. O. Schmitt und Herrn M.G. Zacher, deren Betreuung mir wegen der guten und kollegialen Zusammenarbeit viel Spaß gemacht hat. Außerdem möchte ich mich für sämtliche Hilfe bei beiden Sekretärinnen, Frau E. Fröhlich-Öftering und Frau U. Engels, bei Herrn Dipl.-Phys. G. Hildebrand für Tips und Tricks beim Umgang mit \LaTeX und schließlich bei allen Mitarbeitern des Instituts für Theoretische Physik für die angenehme Arbeitsatmosphäre bedanken.

Ohne die Bereitstellung von genügend Rechenzeit auf den Supercomputern Cray YM-P und Cray T90 des Leibniz-Rechenzentrums München und des Höchstleistungsrechenzentrums Jülich wäre diese Arbeit nicht zustande gekommen. Hierfür möchte ich den Mitarbeitern der beiden Rechenzentren an dieser Stelle danken. Ferner danke ich den Damen und Herren des Rechenzentrums Würzburg, insbesondere Herrn Dr. P. Dietrich, für bereitwillige Hilfestellungen in allen UNIX-spezifischen Fragen.

Last not least gilt mein besonderer Dank meiner Frau Beate, die mich in der nicht gerade streßlosen Zeit dieser Arbeit seelisch und moralisch unterstützt und somit auch wesentlich zum Gelingen dieses Werkes beigetragen hat.