

Diplomarbeit

**Elektronische Anregungen des
Hubbard-Modells mit
längerreichweitiger Wechselwirkung**

von
Christopher Dahnken

vorgelegt bei

Prof. Dr. W. Hanke
Lehrstuhl für Theoretische Physik I

am
Physikalischen Institut der
Bayerischen Julius-Maximilians-Universität Würzburg

August 1998

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	3
1.1	Einleitung	3
1.2	Eigenschaften der Hochtemperatur-Supraleiter	5
1.3	Das Hubbard- und <i>Extended</i> -Hubbard-Modell	8
2	Numerische Techniken	11
2.1	Das großkanonische QMC-Verfahren	11
2.1.1	Die Transformation der Zustandssumme	11
2.1.2	Die Greensche Funktion	15
2.1.3	Der Monte-Carlo-Algorithmus	17
2.1.4	Das Vorzeichenproblem	20
2.2	Die <i>Maximum Entropy</i> -Methode	21
2.3	Verifikation der QMC-Ergebnisse	22
3	Halbfüllung	25
3.1	Analytische Näherungen	26
3.1.1	Störungstheorie zweiter Ordnung	26
3.1.2	Spin- und Ladungs-Dichte-Welle-Näherung	29
3.2	Stand der Forschung	34
3.3	QMC-Ergebnisse	35
3.3.1	Schwache Coulomb-Wechselwirkung bei $U/t = 8$	35
3.3.2	Der SDW-CDW-Übergang bei $U/t = 4$	46

3.3.3	Attraktive Wechselwirkung zwischen direkten Nachbarn . . .	54
4	Das dotierte <i>Extended</i>-Hubbard-Modell	59
4.1	Das dotierte EHM in der SDW-Phase	59
4.2	Das dotierte EHM in der CDW-Phase	68
4.3	Das dotierte EHM bei attraktivem V	70
5	Das <i>Extended</i>-Hubbard-Modell in zwei Ebenen	73
5.1	Einteilchen-Anregungen	74
5.2	Die Aufspaltung der Bandstruktur	78
5.2.1	Stand der Forschung	78
5.2.2	Ergebnisse der QMC-Simulation	79
5.3	Kohärenz und Inkohärenz des Einteilchenhüpfens	82
5.3.1	Das Zwei-Niveau-System	82
5.3.2	Gekoppelte Nicht-Fermi-Flüssigkeiten	84
5.3.3	Einteilchen-Hüpfen im <i>Extended</i> -Hubbard-Modell	85
6	Zusammenfassung und Ausblick	89
A	Übersicht der QMC-Simulationen	93
B	Darstellung der ersten Brillouin-Zone	95

Kapitel 1

Einführung

1.1 Einleitung

Die Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleitung (HTSL) in keramischen Kupferoxid-Materialien durch J. G. Bednorz und K. A. Müller [Bed86] vor über 10 Jahren löste in der theoretischen Festkörperphysik eine immense Forschungsaktivität aus. Dennoch ist die Physik der Kuprate bis heute noch in mancher Hinsicht unverstanden, da die Eigenschaften dieser Materialien teilweise stark von denen herkömmlicher Metalle und Halbleiter abweichen. Bisher konnte noch kein theoretisches Modell vorgelegt werden, das – im Einklang mit den experimentellen Fakten – die Eigenschaften der Kuprate umfassend beschreibt. Dies bedeutet insbesondere, daß noch kein mikroskopisches Bild für die hohen Sprungtemperaturen der Kuprate existiert.

Obwohl im Lauf der Zeit die verschiedensten Gattungen von Hochtemperatur-Supraleitern mit sehr unterschiedlichen chemischen Eigenschaften hergestellt wurden, gibt es eine bedeutende Übereinstimmung: Allen Kuprat-Supraleitern gemein ist eine ein- oder mehrschichtige Anordnung gegeneinander isolierter Kupferoxid-Ebenen. Es wird vermutet, daß der Mechanismus der HTSL in diesen Ebenen und den darin vorliegenden starken elektronischen Korrelationen zu suchen ist [Bre95]. Geeignete Modelle, um die Physik der Kuprate – zumindest in Teilaspekten – zu beschreiben, stellen das Ein- [Hub63] und Drei-Band-Hubbard-Modell [Eme87] dar. Bis heute ist jedoch nicht schlüssig geklärt, ob eines dieser Modelle eine supraleitende Phase aufweist und darüber hinaus noch eine quantitative Erklärung für die hohen Sprungtemperaturen geben kann.

Als realistischste Beschreibung der niederenergetischen Physik der Kuprate gilt allgemein das Drei-Band-Hubbard-Modell [Dop90]. Dieses stellt aber aufgrund seiner zahlreichen Freiheitsgrade einen schwierigen Ansatzpunkt dar. Es existieren

jedoch Überlegungen, die eine Abbildung des komplizierten Drei-Band-Modells auf das weitaus einfachere Ein-Band-Hubbard-Modell rechtfertigen [Zha88]. Das Ein-Band-Hubbard-Modell gibt daher nur eine stark vereinfachte Beschreibung der Kupferoxid-Ebenen der Kuprate, da sich die kinetische Energie auf Prozesse zwischen benachbarten Plätzen beschränkt und sich die potentielle Energie auf eine lokale Wechselwirkung reduziert.

Reale HTSL-Materialien weisen, neben einer komplizierteren Ebenenstruktur, jedoch auch eine längerreichweitige Coulomb-Abstoßung auf. Diese dürfte für benachbarte Plätze etwa in der Größenordnung der magnetischen Austauschwechselwirkung liegen und kann damit für die niederenergetische Physik der Kuprate wichtig werden [Ede96, Sch98]. Bisher sind jedoch keine systematischen Studien der längerreichweitigen Coulomb-Abstoßung in Ebenen und gekoppelten Ebenen mit dem in dieser Arbeit verwendeten Quanten-Monte-Carlo-Verfahren bekannt. Daher soll in dieser Diplomarbeit versucht werden, einen Einblick in den Einfluß der längerreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung auf die Eigenschaften des Ein-Band-Hubbard-Modells zu gewinnen. Dies soll im Rahmen eines *Extended*-Hubbard-Modells (EHM) geschehen, das gegenüber dem Ein-Band-Hubbard-Modell um einen längerreichweitigen Wechselwirkungsterm erweitert ist.

Im folgenden Abschnitt dieser Einführung soll zunächst auf die Struktur und die physikalischen Eigenschaften der HTSL-Materialien eingegangen werden. Eine Beschreibung des verwendeten mikroskopischen Modells beschließt das Kapitel.

Die numerischen Methoden, mittels derer die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse gewonnen wurden, sind in Kapitel 2 dargestellt. Das Kapitel unterteilt sich in die Herleitung des großkanonischen Quanten-Monte-Carlo-Verfahrens (QMC-Verfahren), wobei die Implementierung des *Extended*-Hubbard-Modells besondere Berücksichtigung findet, und die Gewinnung von dynamischen Daten auf der reellen Frequenzachse mit der *Maximum Entropy*-Methode. Das großkanonische QMC-Verfahren erlaubt die Simulation stark korrelierter Systeme bei endlichen Temperaturen. Dabei ist die Zeitabhängigkeit der gewonnen Größen auf die imaginäre Achse beschränkt. Die analytische Fortsetzung dieser Daten über das Spektraltheorem erfordert die Invertierung einer Laplace-Transformation. Dieses mathematisch schlecht konditionierte Problem kann mit dem auf der Bayesschen Logik basierenden *Maximum-Entropy*-Verfahren bewältigt werden.

Diese numerischen Methoden sollen im folgenden zur Bestimmung der Eigenschaften des EHM für unterschiedliche Parametersätze eingesetzt werden. Kapitel 3 behandelt das halbgefüllte¹ *Extended*-Hubbard-Modell. Das halbgefüllte System entspricht den undotierten Prototypen der Hochtemperatur-Supraleiter. Ein störungstheoretischer Ansatz soll zunächst eine Abschätzung der möglichen

¹“Halbfüllung” beschreibt die Tatsache, daß ein System im Mittel genau so viele Ladungsträger enthält wie Gitterplätze vorhanden sind.

Grundzustände des Systems geben. Dabei wird in Abhängigkeit von der Stärke der Coulombwechselwirkung zwischen direkten Nachbarn ein Übergang von einer antiferromagnetisch geordneten (“SDW”) in eine ladungsgeordnete (“CDW”) Phase gefunden. Auf dieser Basis kann im Anschluß der Hamilton-Operator im Rahmen einer Molekularfeld-Näherung diagonalisiert werden. Anhand dieser Resultate werden die Ergebnisse der Quanten-Monte-Carlo-Simulationen des halbgefüllten EHM diskutiert. Dabei werden Ein- und Zweiteilchenanregungen für beide Phasen eingehend auf Auswirkungen der längerreichweitigen Wechselwirkung untersucht und mit experimentellen Daten aus der winkelaufgelösten Photoemissions-Spektroskopie verglichen.

Kapitel 4 beschäftigt sich mit dem dotierten *Extended*-Hubbard-Modell. Dotierte Systeme sind für die Erforschung der HTSL von besonderem Interesse, da bei den dotierten Kupraten für ausreichend tiefe Temperaturen der Übergang in die supraleitende Phase beobachtet werden kann. Oberhalb der Sprungtemperatur entwickeln sich die HTSL-Materialien mit der Füllung von einem Isolator zu einem Metall. In der vorliegenden Arbeit wurden Dotierungen von ca. 9% für verschiedene Parametersätze mit dem QMC-Verfahren simuliert.

Gekoppelte Ebenen, und damit der Übergang zu einer dritten Dimension, werden in Kapitel 5 behandelt. Für die eigentliche Supraleitung der Kuprate ist die Kopplung der Kupferoxidebenen essentiell, da eine langreichweitige supraleitende Ordnung in einem rein zweidimensionalen System nicht auftreten kann [Su98]. Die Eigenschaften des *Extended*-Hubbard-Modells werden sowohl für Halbfüllung als auch für Dotierung untersucht. Besonderes Augenmerk gilt der Aufspaltung der spektralen Dichte in ein bindendes und ein antibindendes Band. Die Beobachtung dieser Aufspaltung ist experimentell umstritten und entscheidend für die Bewertung der sogenannten Theorie des Zwischenebenentunnelns (*Inter layer tunneling*, ILT), die ein mögliches Szenario für die Hochtemperatur-Supraleitung darstellt [And97].

Die Zusammenfassung der Ergebnisse in Kapitel 6 beschließt die Arbeit.

1.2 Eigenschaften der Hochtemperatur-Supraleiter

Das bedeutendste strukturelle Element der Kuprate sind die Kupferoxidebenen mit der Einheitszelle CuO_2 . Diese Ebenen werden durch Oktaeder, Pyramiden und Quadrate geformt, in deren Mittelpunkt jeweils ein von Sauerstoffatomen umgebenes Kupferatom sitzt (Abbildung 1.1). Abbildung 1.2 zeigt die Gitterstruktur zweier Repräsentanten der Kuprate mit den aus den genannten Strukturelementen gebildeten CuO_2 -Ebenen. Diese Ebenen bilden eine Schichtstruktur

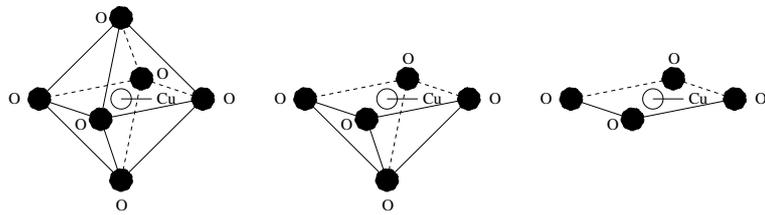


Abbildung 1.1: Strukturelemente, die die Kupferoxid-Ebenen der Hochtemperatur-Supraleiter formen. Das gemeinsame Eigenschaft ist das von Sauerstoff (O) umgebene Kupferatom (Cu) [Ful95].

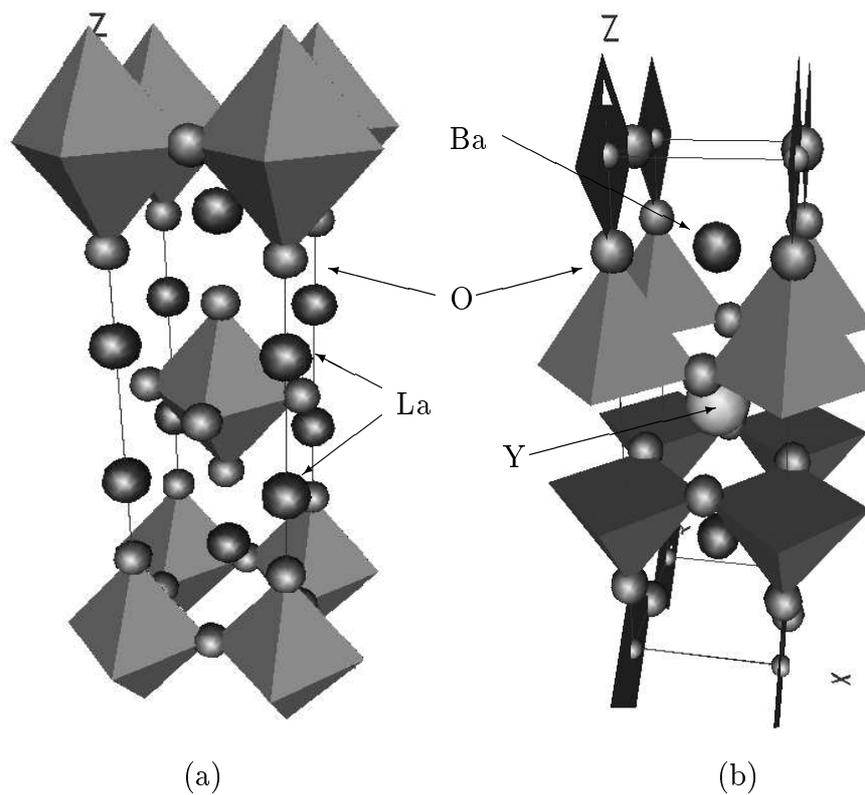


Abbildung 1.2: Kristallstruktur von (a) La_2CuO_4 und (b) $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

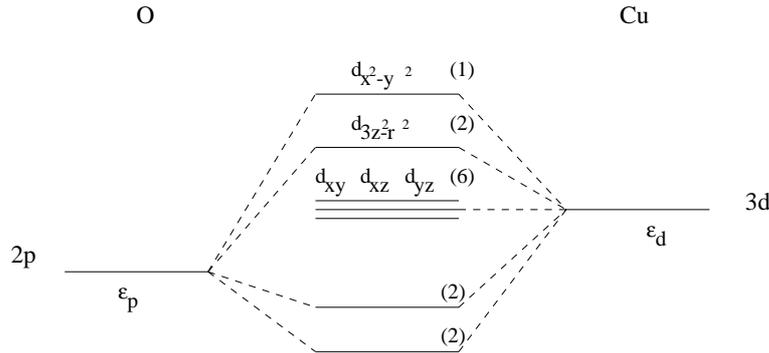


Abbildung 1.3: Bindung eines Cu²⁺ und zweier O²⁻ Ionen. Das höchste antibindende Orbital hat $d_{x^2-y^2}$ -Charakter und enthält ein Loch pro Einheitszelle. Die Werte in Klammern beziehen sich auf die Besetzungen der einzelnen Zustände [Ful95].

mit Atomlagen, die meist aus Alkalimetallen, seltenen Erden und Halogeniden zusammengesetzt sind. Abhängig von der Anzahl der CuO₂-Schichten pro Einheitszelle gibt es Ein-, Zwei- oder Drei-Ebenen-Strukturen, wie z.B. in La₂CuO₄, YBa₂Cu₃O₆ und Bi₂Sr₂YCu₃O₈ in dieser Reihenfolge. Es ist auch gelungen, Kuprate mit einer höheren Anzahl an CuO₂-Ebenen pro Einheitszelle herzustellen [Dag94]. Aufgrund der stark anisotropen Eigenschaften der Kuprate wird weitgehend angenommen, daß die für die Supraleitung entscheidenden elektronischen Prozesse in den CuO₂-Ebenen stattfinden. Dabei werden die Zwischenschichten als inertes Ladungsreservoir angesehen. Im Rahmen dieser Diplomarbeit soll angenommen werden, daß in den Kupraten eine tetragonal ebene Kristallstruktur vorliegt, obwohl in auch orthorombische Strukturen vorkommen.

Neben der Temperatur ist die Dotierung der essentielle Parameter zur Kontrolle der verschiedenen Phasen der HTSL-Materialien. Es ist experimentell gut bestätigt, daß die undotierten Verbindungen wie La₂CuO₄ und YBa₂Cu₃O₆ unterhalb einer Temperatur T_N antiferromagnetisch geordnete Isolatoren sind [Bre95]. Diese Eigenschaft wird auf starke Elektronenkorrelationen in diesen Materialien zurückgeführt, widerspricht sie doch einfachen Überlegungen zur Bandstruktur:

Abbildung 1.3 zeigt die Energieniveaus und Besetzungszahlen einer CuO₂-Bindung. Die formalen Wertigkeiten von Lanthan, Sauerstoff und Kupfer in La₂CuO₄ sind La³⁺, O²⁻ und Cu²⁺. Daher wird die einzige nicht abgeschlossene Schale von der [Ar]3d⁹-Konfiguration des Kupfers gestellt, welche ein einzelnes d-Loch enthält [Ful95]. Wäre ein Modell unabhängiger oder unkorrelierter Elektronen gültig, so würde man bei einem Loch pro Einheitszelle einen metallischen Zustand mit halbgefülltem Leitungsband erwarten. Die experimentell vorgefundenen Isolatoreigenschaften werden daher mit stark korrelierten Elektronen be-

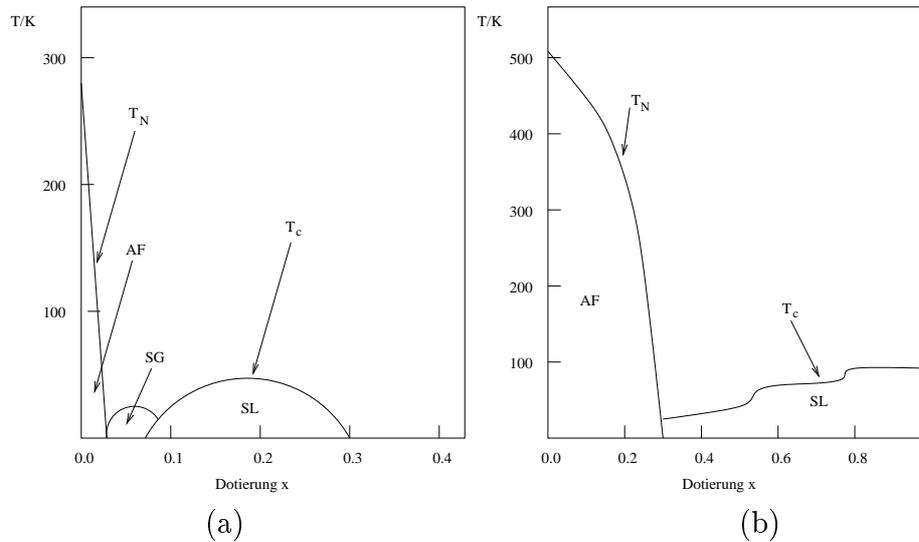


Abbildung 1.4: Phasendiagramm von (a) $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und (b) $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ nach [Bre95]. Erl uterung der Abk urzungen: AF=antiferromagnetische Phase, SL=supraleitende Phase, SG=Spinglas-Phase, T_N =N el-Temperatur, T_c =Kritische Temperatur.

gr ndet[Ful95].

Durch Dotierung der urspr nglichen Kuprat-Verbindungen kann metallisches oder supraleitendes Verhalten erreicht werden. Dies wird durch heterovalentes Substituieren erzielt, z.B. mit Strontium in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, oder durch Variation des Gesamt-Sauerstoffgehaltes, wie in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ [Bre95]. Die Dotierung f hrt dabei den CuO_2 -Ebenen zus tzliche Ladungstr ger zu. Abbildung 1.4 zeigt die Phasendiagramme von $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ und $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  ber Temperatur und Dotierung. Offensichtlich k nnen die Kuprat-HTSL, abh ngig von T und x , kontinuierlich auf die m glichen Phasen eingestellt werden. Da die Dotierung keine gro en strukturellen Ver nderungen der Materialien bewirkt, ist es naheliegend, den elektronischen Korrelationen eine bedeutende Rolle in diesen Systemen zuzusprechen [And97].

1.3 Das Hubbard- und *Extended*-Hubbard-Modell

Die strukturelle Komplexit t der HTSL-Materialien macht bei der Wahl einer mikroskopischen Beschreibung vereinfachende Annahmen unumg nglich. Wie im vorhergehenden Abschnitt angesprochen, wird es als vern nftig angesehen, da  die starken Kupferoxid-Bindungen und die geringe Kopplung der Kupferoxidebenen untereinander eine Beschr nkung des Hamilton-Operators auf Ebenen und

gekoppelte Ebenen rechtfertigen [Dag94]. Der Hamilton-Operator eines Systems von wechselwirkenden Elektronen lautet [Elk79]:

$$H = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (1.1)$$

ψ^{\dagger} erzeugt ein Elektron am Ort \mathbf{r} mit Spin σ und ψ vernichtet es entsprechend. Der Einteilchen-Hamiltonoperator in Ortsdarstellung wird von $h(\mathbf{r})$ repräsentiert:

$$h(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + u(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

mit dem Laplace-Operator Δ und dem periodischen Gitterpotential $u(\mathbf{r})$. Es wird angenommen, daß zwischen den Elektronen nur eine reine Coulomb-Abstoßung

$$v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (1.3)$$

auftritt. Durch Entwicklung nach Wannier- bzw. Bloch-Zuständen ergibt sich [Elk79, Fet71]:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijklm} \sum_{\sigma\sigma'} v_{ijklm} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}^{\dagger} c_{l\sigma'} c_{m\sigma} \quad (1.4)$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} v_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}. \quad (1.5)$$

Analog zu (1.1) sind hierbei $c_{i\sigma}^{\dagger}$ und $c_{i\sigma}$ die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von Wannier-Zuständen, bzw. $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ und $c_{\mathbf{k}\sigma}$ von Bloch-Zuständen. Das Matrixelement v_{ijklm} ist dabei

$$v_{ijklm} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_l(\mathbf{r}') \phi_m(\mathbf{r}). \quad (1.6)$$

Die um verschiedene Plätze zentrierten atomaren Wellenfunktionen ϕ zeigen untereinander einen geringen Überlapp, weshalb das intraatomare Matrixelement v_{iiii} stark dominiert. Die entscheidende Vereinfachung des Hubbard-Modells ist es nun, die Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf diesen Anteil zu beschränken und die Elektronenbewegung auf ein Hüpfen zwischen direkten Nachbarn zu reduzieren:

$$v_{ijklm} = U \delta_{ij} \delta_{il} \delta_{im} \quad t_{ij} = \begin{cases} -t, & \text{wenn } i \text{ und } j \text{ direkte Nachbarn sind} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (1.7)$$

Der Hamilton-Operator des Hubbard-Modells reduziert sich daher zu

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.8)$$

Die Klammern $\langle \dots \rangle$ unter dem Summenzeichen bedeuten dabei die Summation über die direkt benachbarten Plätze. Identifiziert man die die Gitterplätze mit den Kupferoxid-Zellen in den Kupratebenen, so liegt für diese mit dem Hubbard-Modell eine einfache mikroskopische Beschreibung vor. Jeder Gitterplatz entspricht dabei einem sogenannten Zhang-Rice-Singulett, das von maximal zwei Elektronen entgegengesetzten Spins besetzt werden kann [Zha88]. Die Coulombwechselwirkung dieser beiden Elektronen wird durch die lokale Wechselwirkung U beschrieben.

Bei dem zur Beschreibung von stark wechselwirkenden Elektronensystemen wie z.B. den Kupraten verwandten Hubbard-Modell aus Gleichung (1.8) dürfte es sich um die einfachste Darstellung handeln, an der das Zusammenspiel von kinetischer Energie, Coulomb-Wechselwirkung, Pauli-Prinzip und Bandstruktur studiert werden kann. Es beschränkt sich auf das Minimum an Bestandteilen, das notwendig ist, um sowohl bandartiges als auch lokalisiertes Verhalten in den passenden Grenzfällen zu beschreiben.

Um nun die längerreichweitige Coulomb-Wechselwirkung zu modellieren, werden im *Extended*-Hubbard-Modell weitere Potentialterme V_n hinzugenommen, die die Elektronen auf einem Platz an die jeweils n-ten Nachbarn koppeln. Das einfachste Modell mit längerreichweitiger Wechselwirkung besteht somit aus einer Kopplung nächster Nachbarn:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}. \quad (1.9)$$

Die freien Parameter t , U und V müssen allerdings noch durch Abschätzungen und den Vergleich mit dem Experiment festgelegt werden. Aus Gründen der Einfachheit werden alle Werte in Einheiten des Hüpfmatrixelements t angegeben. Als vernünftiger Wert für die lokale Coulombabstoßung in den Kupraten wird allgemein $U/t = 8$ angesehen [Bre95]. Dies ergibt sich aus dem Vergleich verschiedener Rechentechniken, wie dem QMC-Verfahren, der Lokalen-Dichte-Approximation (LDA) und der Exakten Diagonalisierung mit dem Experiment. Die erweiterte Wechselwirkung V wird in einer neueren Arbeit auf einen Wert zwischen $V/t = 2.6$ und $V/t = 0.37$ abgeschätzt [Sch98]. Dabei können auch andere Wechselwirkungen, wie z.B. mit Phononen, in die Quantifizierung von V und U mit eingehen.

Kapitel 2

Numerische Techniken

Zunächst soll eine Einführung in die theoretischen Grundlagen des großkanonischen Quanten-Monte-Carlo-Verfahrens gegeben werden, wobei der Einbau der Nächste-Nachbar-Wechselwirkung des *Extended*-Hubbard-Modells im Vordergrund steht. Die analytische Fortsetzung der dynamischen Daten aus der QMC-Simulation auf die reelle Frequenzachse soll kurz umrissen werden.

2.1 Das großkanonische Quanten-Monte-Carlo-Verfahren

Mit der QMC-Methode steht ein leistungsfähiges Verfahren zur Gewinnung statischer und dynamischer Korrelationsfunktionen zur Verfügung. Das hier erläuterte großkanonische QMC erlaubt die Simulation stark korrelierter fermionischer Vielteilchensysteme bei endlicher Temperatur. Prinzipiell ist dieses Verfahren stochastisch exakt, da es im Gegensatz zu Näherungsmethoden wie der Fluktuations-Austausch-Näherung (FLEX) [Hil98] die zu simulierenden Prozesse nicht einschränkt. Beschränkungen bestehen in der Praxis bezüglich der erreichbaren Systemgrößen (typisch 100 Gitterplätze) und der Temperaturen bei dotierten Systemen (typisch $T=t/3$).

2.1.1 Die Transformation der Zustandssumme

Berechnet werden soll der quantenmechanische Erwartungswert einer physikalischen Observablen \hat{A} bei endlicher Temperatur $T = 1/(k_B\beta)$:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\text{Tr} \hat{A} e^{-\beta(H-\mu\hat{N})}}{\text{Tr} e^{-\beta(H-\mu\hat{N})}}. \quad (2.1)$$

\hat{N} bezeichnet den Teilchenzahloperator $\hat{N} = \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}$. Da bei einem System mit N_s Plätzen 4^{N_s} Zustände zu berücksichtigen sind, ist die exakte Berechnung des Erwartungswertes $\langle \hat{A} \rangle$ nur bis zu einer Systemgröße von etwa 18 Plätzen möglich. Mit QMC wird nun ein Verfahren eingeführt, mit dem ohne exakte Kenntnis der Struktur des Phasenraums Aussagen über Erwartungswerte getroffen werden können. Die Zustandssumme des durch den Hamilton-Operator H bestimmten Systems berechnet sich wie folgt:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(H - \mu\hat{N})}. \quad (2.2)$$

Durch Diskretisierung von β in L gleich große Schritte $\Delta\tau = \frac{\beta}{L}$, sogenannte Zeitscheiben, läßt sich die Zustandssumme als Spur über ein Produkt schreiben. Die einzelnen Terme des Hamilton-Operators lassen sich nun unter Verwendung der Trotter-Suzuki-Formel separieren [Suz76]. Diese Beziehung lautet für zwei Operatoren H_1 und H_2 :

$$e^{-\Delta\tau(H_1+H_2)} = e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2} + \frac{\Delta\tau^2}{2} [H_1, H_2] + \mathcal{O}(\Delta\tau^3). \quad (2.3)$$

Da die Spur eines Kommutators Null ist, und bei der Produktbildung über die L Zeitscheiben eine Ordnung in $\Delta\tau$ wegfällt, wird insgesamt ein Gesamtfehler der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta\tau^2)$ in Kauf genommen:

$$Z = \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_t} e^{-\Delta\tau H_U} e^{-\Delta\tau H_V} e^{-\Delta\tau H_\mu} + \mathcal{O}(\Delta\tau^2). \quad (2.4)$$

Dabei wurden die einzelnen Terme des Hamilton-Operators wie folgt abgekürzt:

$$\begin{aligned} H_t &= -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) \\ H_U &= \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i,-\sigma} \\ H_V &= V \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \\ H_\mu &= -\mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Für die spätere Anwendung des Formalismus bedeutet dies, daß die Diskretisierung der Zeitscheiben hinreichend fein sein muß, um im Rahmen der Genauigkeit der Aussagen mit dem wahren Wert übereinzustimmen. Durch diskrete Hubbard-Stratonovich-Transformation [Hir83] können nun die Operatoren $n_{i\sigma} n_{j\sigma'}$ in den Wechselwirkungstermen H_U und H_V in bilineare Form gebracht werden, so daß im folgenden die Spur über die fermionischen Freiheitsgrade durchgeführt werden kann:

$$e^{-\Delta\tau U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=\pm 1} e^{\lambda_1 \alpha (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) - \frac{\Delta\tau U}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})}. \quad (2.6)$$

Setzt man die möglichen Besetzungszahlen ein

$$\begin{array}{cc|cc}
n_{i\uparrow} & n_{i\downarrow} & e^{-\Delta\tau U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}} & = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=\pm 1} e^{\lambda_1 \alpha (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) - \frac{\Delta\tau U}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} \\
0 & 0 & 1 & = 1 \\
1 & 0 & 1 & = \cosh(\lambda_1) e^{-\frac{\Delta\tau U}{2}} \\
0 & 1 & 1 & = \cosh(\lambda_1) e^{-\frac{\Delta\tau U}{2}} \\
1 & 1 & e^{-\frac{\Delta\tau U}{2}} & = e^{-\frac{\Delta\tau U}{2}},
\end{array}$$

so erhält man daraus eine Bedingung für den noch freien Parameter λ_1 :

$$\cosh(\lambda_1) = e^{\frac{\Delta\tau U}{2}} \quad (2.7)$$

oder

$$\lambda_1 = \operatorname{arcosh}\left(e^{\frac{\Delta\tau U}{2}}\right) = 2 \operatorname{artanh}\left(\sqrt{\tanh\left(\frac{\Delta\tau U}{4}\right)}\right). \quad (2.8)$$

Für H_V muß diese Transformation 8 mal durchgeführt werden, einmal für jede Kombination der Spins $(\sigma, \sigma') \in [(\uparrow\uparrow), (\uparrow\downarrow), (\downarrow\uparrow), (\downarrow\downarrow)]$ in $n_{i\sigma} n_{j\sigma'}$ und für jede Raumrichtung der Wechselwirkung. $\gamma_{\sigma\sigma'}$ und $\kappa_{\sigma\sigma'}$ sind dabei die Hilfsfelder in x -respektive y -Richtung, wie in Abbildung (2.1) dargestellt.

$$e^{-\Delta\tau V n_{i\sigma} n_{j\sigma'}} = \frac{1}{2} \sum_{\gamma=\pm 1} e^{\lambda_2 \gamma_{\sigma\sigma'} (n_{i\sigma} - n_{j\sigma'}) - \frac{\Delta\tau V}{2} (n_{i\sigma} + n_{j\sigma'})} \quad (2.9)$$

mit

$$\lambda_2 = 2 \operatorname{artanh}\left(\sqrt{\tanh\left(\frac{\Delta\tau V}{4}\right)}\right). \quad (2.10)$$

Setzt man diese Transformationen in die Zustandssumme 2.4 ein

$$\begin{aligned}
Z &= \operatorname{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_t} e^{-\Delta\tau H_U} e^{-\Delta\tau H_V} e^{-\Delta\tau H_\mu} + \mathcal{O}(\Delta\tau^2) \\
&= \operatorname{Tr} \prod_{l=1}^L \left\{ e^{-\Delta\tau H_t} \prod_i \left[\left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha=\pm 1} e^{\lambda_1 \alpha (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) - \frac{\Delta\tau U}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left(\frac{1}{2^8} e^{-4\Delta\tau (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} \right) \right. \\
&\quad \left. \sum_{\gamma_{\uparrow\uparrow} \dots \kappa_{\downarrow\downarrow}} e^{\lambda_2 n_{i\uparrow} (\gamma_{\uparrow\uparrow} + \gamma_{\uparrow\downarrow} + \kappa_{\uparrow\uparrow} + \kappa_{\uparrow\downarrow})} e^{\lambda_2 n_{i\downarrow} (\gamma_{\downarrow\uparrow} + \gamma_{\downarrow\downarrow} + \kappa_{\downarrow\uparrow} + \kappa_{\downarrow\downarrow})} \right. \\
&\quad \left. e^{-\lambda_2 n_{i+1\uparrow} (\gamma_{\uparrow\uparrow} + \gamma_{\downarrow\uparrow})} e^{-\lambda_2 n_{i+1\downarrow} (\gamma_{\uparrow\downarrow} + \gamma_{\downarrow\downarrow})} \right. \\
&\quad \left. \left. e^{-\lambda_2 n_{i+n_x\uparrow} (\kappa_{\uparrow\uparrow} + \kappa_{\downarrow\uparrow})} e^{-\lambda_2 n_{i+n_x\downarrow} (\kappa_{\uparrow\downarrow} + \kappa_{\downarrow\downarrow})} \right] e^{\Delta\tau \mu (n_{i\downarrow} + n_{i\downarrow})} \right\} \quad (2.11)
\end{aligned}$$

so lassen sich die Summen über alle Konfigurationen der bosonischen Hilfsfelder aus der Spur ziehen [End96].

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\gamma_{\uparrow\uparrow}\}} \dots \sum_{\{\kappa_{\downarrow\downarrow}\}} \operatorname{Tr} \prod_{l=1}^L \left\{ e^{-\Delta\tau H_t} \frac{1}{2^{9N}} \right.$$

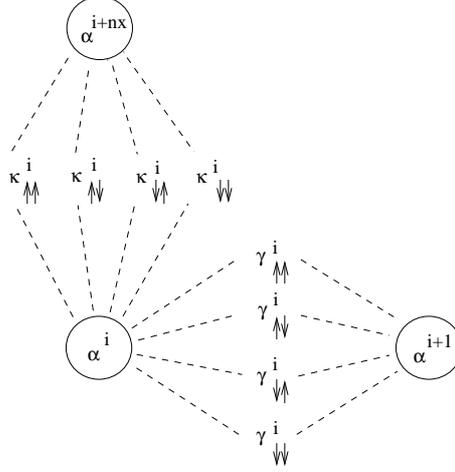


Abbildung 2.1: Die Hilfsfelder der Hubbard-Stratonovich-Transformation im *Extended*-Hubbard-Modell. Im Gegensatz zur rein lokalen Wechselwirkung U existieren die Felder der erweiterten Wechselwirkung zwischen den Gitterplätzen für jede Spinkombination und Raumrichtung.

$$\begin{aligned} & \times \prod_i \prod_{\sigma=\pm 1} \exp \left[n_{i\sigma} \left(\mu - \Delta\tau \left(\mu - \frac{1}{2}U - 2V \right) + \sigma \lambda_1 \alpha(l, i) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \lambda_2 (\gamma_{\sigma\uparrow}(l, i) + \gamma_{\sigma\downarrow}(l, i) - \gamma_{\uparrow\sigma}(l, i-1) - \gamma_{\downarrow\sigma}(l, i-1)) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \kappa_{\sigma\uparrow}(l, i) + \kappa_{\sigma\downarrow}(l, i) - \kappa_{\uparrow\sigma}(l, i-n_x) - \kappa_{\downarrow\sigma}(l, i-n_x) \right) \right] \} \quad (2.12) \end{aligned}$$

Faßt man die kinetischen und Wechselwirkungsbeiträge in Matrizen zusammen

$$K_{ij} = \begin{cases} -t & \text{für } i \text{ und } j \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.13)$$

$$A_{ij}^\sigma = \delta_{ij} \left\{ \Delta\tau \left(\mu - U/2 - 4V \right) + \sigma \lambda_1 \alpha(l, i) \right. \\ \left. + \lambda_2 (\gamma_{\sigma\uparrow}(l, i) + \gamma_{\sigma\downarrow}(l, i) - \gamma_{\uparrow\sigma}(l, i-1) - \gamma_{\downarrow\sigma}(l, i-1)) \right. \\ \left. + \kappa_{\sigma\uparrow}(l, i) + \kappa_{\sigma\downarrow}(l, i) - \kappa_{\uparrow\sigma}(l, i-n_x) - \kappa_{\downarrow\sigma}(l, i-n_x) \right\} \quad (2.14)$$

$$\mathbf{D}_l(\sigma) = e^{-\Delta\tau c_{i\sigma}^\dagger K_{ij} c_{j\sigma}} e^{c_{i\sigma}^\dagger A_{ij}^\sigma c_{j\sigma}}, \quad (2.15)$$

so kann die Zustandssumme in übersichtlicher Form geschrieben werden:

$$Z = \sum_{\{\alpha\}} \sum_{\{\gamma_{\uparrow\uparrow}\}} \dots \sum_{\{\kappa_{\downarrow\downarrow}\}} \text{Tr} \prod_{l=1}^L \frac{1}{2^{9N}} \prod_{\sigma=\pm 1} \mathbf{D}_l(\sigma). \quad (2.16)$$

Die Spur über die fermionischen Freiheitsgrade kann nun ausgeführt werden, wobei unter Verwendung der Identität

$$\text{Tr} e^{-c_i^\dagger A_{ij} c_j} e^{-c_i^\dagger B_{ij} c_j} = \det \left(\mathbf{1} + e^{-\mathbf{A}} e^{-\mathbf{B}} \right) \quad (2.17)$$

eine Determinante resultiert und die Zustandssumme nun ihre endgültige Form

$$Z = \frac{1}{2^{9NL}} \sum_{\{\alpha\}} \sum_{\{\gamma_{\uparrow\uparrow}\}} \dots \sum_{\{\kappa_{\downarrow\downarrow}\}} \prod_{\sigma=\pm 1} \det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \mathbf{B}^{L-1\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right) \quad (2.18)$$

bekommt. Zu Abkürzung wurden noch die Matrizen

$$\mathbf{B}_l(\sigma) = e^{\mathbf{A}^\sigma(l)} e^{\Delta\tau\mathbf{K}}. \quad (2.19)$$

eingeführt. Die verbleibende Summation ist nunmehr nur über die nicht-fermionischen Hilfsfeldvariablen $\{\alpha\}$, $\{\gamma_{\sigma\sigma'}\}$ und $\{\kappa_{\sigma\sigma'}\}$ auszuführen. Dennoch müssen die Summen theoretisch noch über alle Konfigurationen der Hilfsfelder ausgeführt werden. Für die Berechnung nicht-fermionischer, hochdimensionaler Summen und Integrale existieren allerdings adäquate Lösungsmöglichkeiten wie der Monte-Carlo-Algorithmus, der in Abschnitt 2.1.3 beschrieben ist.

2.1.2 Die Greensche Funktion

Im eigentlichen QMC-Algorithmus werden nicht Zustandssummen, sondern Greensche Funktionen berechnet. Die gleichzeitige Greensche Ein-Teilchen-Funktion ist definiert [Fet71, Dop91] als

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

Die Klammern $\langle \dots \rangle$ stehen hierbei für großkanonische Mittelwertbildung. Die gleichzeitige Greensche Funktion soll nun durch die im vorhergehenden Kapitel abgeleiteten Matrizen $\mathbf{B}^{1\sigma} \mathbf{B}^{2\sigma} \dots \mathbf{B}^{L\sigma}$ ausgedrückt werden. Der Operator $c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ läßt sich in einer hier leicht anwendbaren Form [Loh90] als

$$\begin{aligned} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} &= \left. \frac{\partial}{\partial h} e^{hc_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}} \right|_{h=0} \\ &= \left. \frac{\partial}{\partial h} \prod_{ab\sigma'} e^{hc_{a\sigma'}^\dagger O_{ab}^{\sigma'} c_{b\sigma'}} \right|_{h=0} \end{aligned} \quad (2.21)$$

schreiben. Die Matrix $O_{ab}^{\sigma'}$ besitzt nur ein von Null verschiedenes Element:

$$O_{ab}^{\sigma'} = \begin{cases} 1 & \text{für } a = i, b = j, \sigma' = \sigma \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (2.22)$$

Damit gilt für den großkanonischen Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle &= \delta_{ij} - \mathcal{G}_{ij}^\sigma(\tau, \tau) \\ &= \left. \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial h} \prod_{ab\sigma'} e^{-(\beta-\tau_m)\mathcal{H}} e^{hc_{a\sigma'}^\dagger O_{ab}^{\sigma'} c_{b\sigma'}} e^{-\tau_m\mathcal{H}} \right|_{h=0} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2^{9NL}} \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial h} \sum_{\{\gamma_{\uparrow\uparrow}\}} \cdots \sum_{\{\kappa_{\downarrow\downarrow}\}} \\
&\quad \times \prod_{\sigma'} \det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{m+1\sigma'} e^{h\mathbf{O}^{\sigma'}} \mathbf{B}^{m\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma'} \right) \\
&= \frac{1}{2^{9NL}} \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial h} \sum_{\{\gamma_{\uparrow\uparrow}\}} \cdots \sum_{\{\kappa_{\downarrow\downarrow}\}} \prod_{\sigma'} \prod_{\sigma''} \det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma''} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma''} \right) \\
&\quad \times \frac{\det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{m+1\sigma'} e^{h\mathbf{O}^{\sigma'}} \mathbf{B}^{m\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma'} \right)}{\prod_{\sigma''} \det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma''} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma''} \right)}, \tag{2.23}
\end{aligned}$$

oder kürzer

$$\delta_{ij} - \mathcal{G}_{ij}^\sigma(\tau, \tau) = \frac{1}{2^{9NL}} \frac{1}{Z} \sum_{\{\gamma_{\uparrow\uparrow}\}} \cdots \sum_{\{\kappa_{\downarrow\downarrow}\}} p_{\alpha_i(l)\dots\kappa_{\downarrow i}(l)} \left(\delta_{ij} - G_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m) \right). \tag{2.24}$$

Hierbei kommt der Größe

$$p_{\alpha_i(l)\dots\kappa_{\downarrow i}(l)} = \frac{1}{2^{9LN} Z} \prod_{\sigma''} \det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma''} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma''} \right) \tag{2.25}$$

die Aufgabe eines Gewichtes für eine Konfiguration von Hilfsfeldern zu.

$$\delta_{ij} - G_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m) = \frac{\partial}{\partial h} \frac{\prod_{\sigma'} \det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{m+1\sigma'} e^{h\mathbf{O}^{\sigma'}} \mathbf{B}^{m\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma'} \right)}{\prod_{\sigma''} \det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma''} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma''} \right)} \Bigg|_{h=0} \tag{2.26}$$

liefert die Funktion $G_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m)$ für eine spezielle Konfiguration von Ising-Spins $\{\alpha\}, \{\gamma\}$ und $\{\kappa\}$. Der Ausdruck 2.26 läßt sich mit Hilfe der Beziehung

$$\ln \det \mathbf{A} = \text{Tr} \ln \mathbf{A} \quad [\text{End96}] \tag{2.27}$$

noch erheblich vereinfachen:

$$\begin{aligned}
\delta_{ij} - G_{ij}^\sigma(\tau_m, \tau_m) &= \frac{\partial}{\partial h} \ln \prod_{\sigma'} \det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{m+1\sigma'} e^{h\mathbf{O}^{\sigma'}} \mathbf{B}^{m\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma'} \right) \Bigg|_{h=0} \\
&= \frac{\partial}{\partial h} \text{Tr} \sum_{\sigma'} \ln \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{m+1\sigma'} e^{h\mathbf{O}^{\sigma'}} \mathbf{B}^{m\sigma'} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma'} \right) \Bigg|_{h=0} \\
&= \text{Tr} \left(\left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma} \right)^{-1} \right. \\
&\quad \left. \times \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \cdots \mathbf{B}^{m+1\sigma} \mathbf{O}^\sigma \mathbf{B}^{m\sigma} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma} \right) \right) \\
&= \left[\mathbf{B}^{m\sigma} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma} \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \cdots \mathbf{B}^{1\sigma} \right)^{-1} \mathbf{B}^{L\sigma} \cdots \mathbf{B}^{m+1\sigma} \right]_{ij} \\
&= \left[\mathbf{1} + \left(\mathbf{B}^{m+1\sigma} \right)^{-1} \cdots \left(\mathbf{B}^{l\sigma} \right)^{-1} \left(\mathbf{B}^{1\sigma} \right)^{-1} \cdots \left(\mathbf{B}^{m\sigma} \right)^{-1} \right]_{ij}^{-1} \tag{2.28}
\end{aligned}$$

In Matrixschreibweise ergibt sich für die Funktion G_{ij}^σ also folgende Beziehung:

$$\mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m) = \left[\mathbf{1} + \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} \right]^{-1}. \quad (2.29)$$

Um nun auch dynamische Greensche Funktionen berechnen zu können, wird der Operator $c_{i\sigma}(\tau_l)$ durch Propagation aus dem Operator $c_{i\sigma}(\tau_{l-1})$ gewonnen. Dies läßt sich mit den oben definierten Matrizen $\mathbf{B}^{l\sigma}$ bewerkstelligen:

$$\begin{aligned} c_{i\sigma}(\tau_l) &= e^{i\Delta\tau(\tilde{H}_l - \mu\hat{N})} c_{j\sigma}(\tau_{l-1}) e^{-i\Delta\tau(\tilde{H}_l - \mu\hat{N})} \\ &= \sum_j \left(\mathbf{B}^{l\sigma} \right)_{ij} c_{i\sigma}(\tau_{l-1}) \\ &= \sum_j \left(\mathbf{B}^{l\sigma} \mathbf{B}^{l-1\sigma} \right)_{ij} c_{i\sigma}(\tau_{l-2}) \\ &= \sum_j \left(\mathbf{B}^{l\sigma} \mathbf{B}^{l-1\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right)_{ij} c_{i\sigma}(0). \end{aligned} \quad (2.30)$$

\tilde{H}_l bezeichnet hierbei den wechselwirkungsfreien Hamilton-Operator bei fester Konfiguration der Hilfsfelder auf der Zeitscheibe l . Die zeitabhängige Funktion $G_{ij}(\tau, 0)$ ergibt sich durch einfaches Einsetzen:

$$\begin{aligned} G_{ij}(\tau, 0) &= \langle c_{i\sigma}(\tau_l) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}} \\ &= \sum_r \left(\mathbf{B}^{l\sigma} \mathbf{B}^{l-1\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right)_{ir} \langle c_{r\sigma}(0) c_{j\sigma}^\dagger(0) \rangle_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

In der Summe steht nun eine gleichzeitige Greensche Funktion, die durch (2.29) ausgedrückt werden kann:

$$G_{ij}(\tau_l, 0) = \left(\mathbf{B}^{l\sigma} \mathbf{B}^{l-1\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \left[\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \mathbf{B}^{L-1\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right]^{-1} \right)_{ij}. \quad (2.32)$$

Mit Hilfe der Greenschen Funktion und des Wick'schen Theorems können alle dynamischen Größen dargestellt und somit in imaginärer Zeit berechnet werden [Pre96, End96]. Dabei ist entscheidend, daß sich das System für jede Konfiguration der Hilfsfelder $\{\alpha\}$, $\{\gamma_{\sigma\sigma'}\}$ und $\{\kappa_{\sigma\sigma'}\}$ wie ein System aus freien Teilchen verhält. Die Vielteilchenphysik wird erst durch die Summation über alle Hilfsfelder reproduziert.

2.1.3 Der Monte-Carlo-Algorithmus

Die Summation über alle Konfigurationen der Hilfsfelder $\{\alpha\}$, $\{\gamma_{\sigma\sigma'}\}$ und $\{\kappa_{\sigma\sigma'}\}$ soll nun mittels einer Monte-Carlo-Summation durchgeführt werden. Eine vollständige Behandlung des Algorithmus ist ausgesprochen platzfüllend und schon in vielen Arbeiten besprochen worden. Für detaillierte Beschreibungen wird deshalb auf die Referenzen [End96, Eve97, Ken95, Pre92] verwiesen und an dieser Stelle

auf die im Rahmen dieser Diplomarbeit durchgeführten Erweiterungen eingegangen.

Der in den Simulationen dieser Arbeit zur Anwendung kommende Algorithmus ist der *Heat Bath*-Algorithmus [End96, Ken95]. Bei dieser Methode ist die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Konfigurationen A und A' der Hilfsfelder gegeben durch

$$\begin{aligned} W(A \rightarrow A') &= \frac{p(A')}{p(A) + p(A')} \\ &= \frac{R}{1 + R}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

wobei das R das Verhältnis der Gewichte $p(A')/p(A)$ ist. Diese Übergangswahrscheinlichkeit erfüllt im besonderen die sogenannte *Detailed Balance* oder "Mikroskopische Reversibilität":

$$W(A \rightarrow A')p(A) = W(A' \rightarrow A)p(A'). \quad (2.34)$$

Die Menge der erzeugten Konfigurationen ist damit wie $p(A)$ verteilt. Daher ist

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle &= \frac{\sum_{\{A\}} \mathcal{O}_A p(A)}{\sum_{\{A\}} 1} \\ &= \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \mathcal{O}_k, \end{aligned} \quad (2.35)$$

wobei \mathcal{O}_k der Meßwert der Observablen \mathcal{O} in der k -ten Konfiguration ist. Wie man nun einzelne Konfigurationen vorschlägt, ist für die Korrektheit des Verfahrens prinzipiell nicht wichtig, solange sichergestellt ist, daß jede mögliche Konfiguration durch die gewählte Methodik erreichbar ist. Der einfachste Fall ist der *Single Spin Flip* [End96, Zac96], bei dem ein Isingspin, d.h. eine lokale Hilfsfeldvariable, umgedreht wird. Dieser Vorgang garantiert hohe Akzeptanzraten von 0.5, da das System nur sehr minimal verändert wird und deshalb die Übergangswahrscheinlichkeit hoch ist. Eine andere Möglichkeit ist der *Cluster Flip*, bei dem mehrere Spinflips gleichzeitig vorgeschlagen werden [Zac96]. In der vorliegenden Arbeit wurde ausschließlich mit dem *Single Spin Flip* gearbeitet.

Dreht man den normalen Isingspin α , der die lokale Wechselwirkung U entkoppelt, am Gitterplatz i auf der Zeitscheibe m um, so ändert sich ein Element der Matrix \mathbf{A}^σ aus Gleichung (2.13):

$$A_{ii}^\sigma \rightarrow A_{ii}^\sigma - 2\sigma\lambda_1\alpha(m, i). \quad (2.36)$$

Dies hat eine Änderung der Matrix $\mathbf{B}^m(\sigma)$ zur Folge, welche sich mit einer Hilfsmatrix

$$\Delta_{pq}^\sigma(m) = \left(e^{-2\sigma\lambda_1\alpha(m, i)} - 1 \right) \delta_{iq}\delta_{ip} \quad (2.37)$$

relativ einfach als

$$\mathbf{B}^m(\sigma) \rightarrow (\mathbf{1} + \Delta^\sigma(m)) \mathbf{B}^m(\sigma) \quad (2.38)$$

schreiben läßt. Für das Drehen eines Isingspins der Hilfsfelder der erweiterten Wechselwirkung wird die Prozedur ganz analog durchgeführt.

$$\begin{aligned} \gamma_{\sigma\sigma}(m, i) &\rightarrow -\gamma_{\sigma\sigma}(m, i) \\ A_{ii}^\sigma &\rightarrow A_{ii}^\sigma - 2\lambda_2 \gamma_{\sigma\sigma}(m, i) \\ A_{i+1, i+1}^\sigma &\rightarrow A_{i+1, i+1}^\sigma - 2\lambda_2 \gamma_{\sigma\sigma}(m, i) \\ \mathbf{B}^m(\sigma) &\rightarrow (\mathbf{1} + \Delta_1 + \Delta_2) \mathbf{B}^m(\sigma) \\ \Delta_1 \text{ } kl &= \left(e^{-2\lambda_2 \gamma_{\sigma\sigma}(m, i)} - 1 \right) \delta_{ki} \delta_{il} \\ \Delta_2 \text{ } kl &= \left(e^{2\lambda_2 \gamma_{\sigma\sigma}(m, i)} - 1 \right) \delta_{k, i+1} \delta_{i+1, l} \end{aligned} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{\sigma-\sigma}(m, i) &\rightarrow \gamma_{\sigma-\sigma}(m, i) - 2\gamma_{\sigma-\sigma}(m, i) \\ A_{ii}^\sigma &\rightarrow A_{ii}^\sigma - 2\lambda_2 \gamma_{\sigma-\sigma}(m, i) \\ A_{i+1, i+1}^{-\sigma} &\rightarrow A_{i+1, i+1}^{-\sigma} - 2\lambda_2 \gamma_{\sigma-\sigma}(m, i) \\ \mathbf{B}^m(\sigma) &\rightarrow (\mathbf{1} + \Delta_1) \mathbf{B}^m(\sigma) \\ \mathbf{B}^m(-\sigma) &\rightarrow (\mathbf{1} + \Delta_2) \mathbf{B}^m(-\sigma) \\ \Delta_1 \text{ } kl &= \left(e^{-2\lambda_2 \gamma_{\sigma-\sigma}(m, i)} - 1 \right) \delta_{ki} \delta_{il} \\ \Delta_2 \text{ } kl &= \left(e^{2\lambda_2 \gamma_{\sigma-\sigma}(m, i)} - 1 \right) \delta_{k, i+1} \delta_{i+1, l} \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \kappa_{\sigma\sigma}(m, i) &\rightarrow -\kappa_{\sigma\sigma}(m, i) \\ A_{ii}^\sigma &\rightarrow A_{ii}^\sigma - 2\lambda_2 \kappa_{\sigma\sigma}(m, i) \\ A_{i+n_x, i+n_x}^\sigma &\rightarrow A_{i+n_x, i+n_x}^\sigma - 2\lambda_2 \kappa_{\sigma\sigma}(m, i) \\ \mathbf{B}^m(\sigma) &\rightarrow (\mathbf{1} + \Delta_1 + \Delta_2) \mathbf{B}^m(\sigma) \\ \Delta_1 \text{ } kl &= \left(e^{-2\lambda_2 \kappa_{\sigma\sigma}(m, i)} - 1 \right) \delta_{ki} \delta_{il} \\ \Delta_2 \text{ } kl &= \left(e^{2\lambda_2 \kappa_{\sigma\sigma}(m, i)} - 1 \right) \delta_{k, i+n_x} \delta_{i+n_x, l} \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \kappa_{\sigma-\sigma}(m, i) &\rightarrow \kappa_{\sigma-\sigma}(m, i) - 2\kappa_{\sigma-\sigma}(m, i) \\ A_{ii}^\sigma &\rightarrow A_{ii}^\sigma - 2\lambda_2 \kappa_{\sigma-\sigma}(m, i) \\ A_{i+n_x, i+n_x}^{-\sigma} &\rightarrow A_{i+n_x, i+n_x}^{-\sigma} - 2\lambda_2 \kappa_{\sigma-\sigma}(m, i) \\ \mathbf{B}^m(\sigma) &\rightarrow (\mathbf{1} + \Delta_1) \mathbf{B}^m(\sigma) \\ \mathbf{B}^m(-\sigma) &\rightarrow (\mathbf{1} + \Delta_2) \mathbf{B}^m(-\sigma) \\ \Delta_1 \text{ } kl &= \left(e^{-2\lambda_2 \kappa_{\sigma-\sigma}(m, i)} - 1 \right) \delta_{ki} \delta_{il} \\ \Delta_2 \text{ } kl &= \left(e^{2\lambda_2 \delta \kappa_{\sigma-\sigma}(m, i)} - 1 \right) \delta_{k, i+n_x} \delta_{i+n_x, l} \end{aligned} \quad (2.42)$$

Mit den so veränderten \mathbf{B} -Matrizen lassen sich nun die Verhältnisse der Gewichte zweier Konfigurationen $R = \frac{p(A')}{p(A)}$ berechnen. Für eine Änderung im α -Feld findet man so [End96]

$$R^\sigma = \frac{\det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} (\mathbf{1} + \Delta^\sigma(m)) \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right)}{\det \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right)}$$

$$\begin{aligned}
&= \det \left(\mathbf{1} + \left(\mathbf{1} + \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right)^{-1} \mathbf{B}^{L\sigma} \dots \mathbf{B}^{m+1\sigma} \Delta^\sigma(m) \mathbf{B}^{m\sigma} \dots \mathbf{B}^{1\sigma} \right) \\
&= \det \left(\mathbf{1} + \left(\mathbf{1} - \mathbf{G}^\sigma(\tau_m, \tau_m) \right) \Delta^\sigma(m) \right). \tag{2.43}
\end{aligned}$$

Die Matrix Δ aus Gleichung (2.37) hat allerdings nur ein von Null verschiedenes Element, daher kann man die Matrix durch Entwicklung vereinfachen. Der Quotient der Gewichte wird damit zu

$$R = R^\dagger R^\downarrow \prod_\sigma \left(1 + (1 - G_{jj}^\sigma(\tau_m, \tau_m)) \Delta_{jj}^\sigma(m) \right). \tag{2.44}$$

Nach etwas aufwendigerer Rechnung ergibt sich für die γ -Felder bei einem Spinflip in $\gamma_{\sigma, -\sigma}$

$$\begin{aligned}
R^\sigma &= (1 + (1 - G_{ii}^\sigma) \Delta_{1\ ii}), \\
R^{-\sigma} &= \left(1 + \left(1 - G_{i+1, i+1}^{-\sigma} \right) \Delta_{2\ i+1i+1} \right) \tag{2.45}
\end{aligned}$$

und in $\gamma_{\sigma\sigma}$

$$\begin{aligned}
R^\sigma &= (1 + (1 - G_{ii}^\sigma) \Delta_{1\ ii}) \left(1 + \left(1 - G_{i+1, i+1}^\sigma \right) \Delta_{2, i+1i+1} \right) \\
&\quad - G_{i, i+1}^\sigma \Delta_{1, ii} G_{i+1, i}^\sigma \Delta_{2\ i+1i+1}, \\
R^{-\sigma} &= 1. \tag{2.46}
\end{aligned}$$

Die κ -Felder folgen vollkommen analog durch Einsetzen der Δ -Matrizen aus den Gleichungen (2.41) und (2.42).

Im eigentlichen Simulationslauf wird nun das Gitter auf allen Zeitscheiben und allen Gitterpunkten durchfahren. Dabei werden für alle Hilfsfelder Flipvorschläge gemacht. Solch ein Spinflip wird angenommen, wenn eine gezogene Zufallszahl kleiner ist als die Übergangswahrscheinlichkeit W .

2.1.4 Das Vorzeichenproblem

Das Quanten-Monte-Carlo-Verfahren ist in seiner Anwendbarkeit prinzipiell nur durch eine Tatsache limitiert: Das durch die Gleichung (2.25) definierte Gewicht $p_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}}$ ist nicht notwendigerweise positiv! Es kann negative oder, für komplexe Hamilton-Operatoren, auch komplexe Werte annehmen. Dies ist vor allem in dotierten Systemen und bei tiefen Simulationstemperaturen der Fall [End96]. Dem Vorzeichenproblem läßt sich Formal durch Betragsbildung Rechnung tragen. Für den reellen Fall gilt:

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &= \frac{\sum_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}} p_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}} \left| p_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}} \right| \text{Sign}_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}} A_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}}}{\sum_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}} p_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}} \left| p_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}} \right| \text{Sign}_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}}} \\
&\approx \frac{\sum_{k=1}^K A_k \text{Sign}_k}{\sum_{k=1}^K \text{Sign}_k}. \tag{2.47}
\end{aligned}$$

Die Größe $\text{Sign}_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}}$ ist das Vorzeichen des Gewichtes $p_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}}$. Zur Erzeugung der K Hilfsfeld-Konfigurationen wird somit $|p_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}}|$ verwendet, d.h. die Flipwahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$R = \left| \frac{p_{\{\alpha\}'\{\gamma\}'\{\kappa\}'}}{p_{\{\alpha\}\{\gamma\}\{\kappa\}}} \right|. \quad (2.48)$$

Das mittlere Vorzeichen $\langle \text{Sign} \rangle$ ist dabei stets reel und positiv, verhält sich jedoch wie $\exp(-\beta N)$ bei tiefen Temperaturen und großer Anzahl von Gitterplätzen. Wird dieses mittlere Vorzeichen zu klein, kann aufgrund der starken Fluktuationen von $A_k \text{Sign}_k$ nur noch mit enormem Aufwand an Rechenzeit simuliert werden.

2.2 Die Maximum Entropy-Methode

Wie schon in Abschnitt 2.1.2 beschrieben, können unter Verwendung der zeitabhängigen Matsubara-Funktion auch alle dynamischen Größen in imaginärer Zeit berechnet werden. Dies erlaubt einen direkten Vergleich der mit dem QMC-Verfahren gewonnenen dynamischen Information mit experimentellen Daten. Dieser Vergleich wird mit Hilfe des Spektraltheorems möglich, welches zum Beispiel für die spektrale Dichte folgende Gestalt hat:

$$G_{\mathbf{k}}(\tau_l) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\tau_l \omega}}{1 + e^{-\beta \omega}} A(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.49)$$

$G_{\mathbf{k}}(\tau_l)$ ist dabei die impulsabhängige Greensche Funktion, die sich durch Fouriertransformation aus der Greenschen Funktion im Ortsraum $G_{ij}(\tau_l)$ (Gleichung (2.32)) bilden läßt. Die Inversion von Gleichung (2.49) ist allerdings ein schlecht konditioniertes Problem und mit konventionellen numerischen Methoden nicht möglich. Der Grund hierfür liegt in dem exponentiellen Integralkern $e^{-\tau_l \omega} / (1 + e^{-\beta \omega})$, an der endlichen Anzahl von Stützstellen der Funktion $G_{\mathbf{k}}(\tau_l)$ (also der Anzahl der Zeitscheiben) und den statistischen Fehlern von $G_{\mathbf{k}}(\tau_l)$.

In der vorliegenden Arbeit wurde die Invertierung mittels eines von Prof. Dr. W. von der Linden entwickelten Programmes vorgenommen, das auf dem *Maximum Entropy*-Verfahren (MaxEnt-Verfahren) beruht [Lin95].

Die Grundlagen des *Maximum Entropy*-Algorithmus wurden schon in der Dissertation von H. Endres [End96] und in der Diplomarbeit von C. Gröber [Gro96] diskutiert. Eine ausführliche Beschreibung gibt die Dissertation von R. Preuss [Pre96]. Daher wird das Prinzip des MaxEnt-Verfahrens hier nur kurz erläutert.

Das Programm berechnet die Kurve $A(\omega)$, die die höchste Wahrscheinlichkeit $P(A(\omega)|G(\tau_l))$ bei gegebenen Datenpunkten $G(\tau_l)$ mit Fehlern $\sigma(\tau_l)$ besitzt. Mit-

tels des Bayesschen Theorems [Jay95] läßt sich diese Wahrscheinlichkeit zu

$$P(A(\omega)|G(\tau_l)) \propto e^{\alpha S - \chi^2/2} \quad (2.50)$$

bestimmen. Dabei ist, bei voneinander unabhängigen Daten,

$$\chi^2 = \sum_l \left(\frac{\sum_i K_{li} A(i) - G_{\tau_l}}{\sigma(\tau_l)} \right)^2. \quad (2.51)$$

K_{li} ist der diskretisierte Integrkern aus Gleichung (2.49):

$$K_{li} = \frac{e^{-\pi\omega_i}}{1 + e^{-\beta\omega_i}} \Delta\omega. \quad (2.52)$$

Der Entropieterm S in Gleichung (2.50) ist durch die Shannon-Jaynes-Entropie

$$S = \sum_i \left(A(i) - m_i - A(\omega_i) \ln \left(\frac{A(\omega_i)}{m_i} \right) \right) \quad (2.53)$$

gegeben. Man erkennt, daß der zweite Exponentialfaktor in Gleichung (2.50) dem klassischen Verfahren der χ^2 Minimierung [Pre92] entspricht. Der erste Faktor $\exp \alpha S$ trägt dem Prinzip Rechnung, daß man aus der Menge der Funktionen, die einen konventionellen χ^2 -Test bestehen würden, diejenige Kurve auswählt, die dem Vorwissen gegenüber am unbestimmtesten ist. Das Maß für die Unbestimmtheit gegenüber einer gegebenen Funktion m (*Default-Modell*) ist die oben definierte Entropie S .

α ist ein Regulierungsparameter, mit dem die Wahrscheinlichkeitsfunktion P abgetastet wird, um deren Maximum zu finden. Man startet den Algorithmus bei sehr großen α , was einer Kurve $A(\omega)$ gleich dem *Default-Modell* entspricht. α wird dann schrittweise verkleinert, bis das Maximum gefunden ist.

2.3 Verifikation der QMC-Ergebnisse

Um die korrekte Implementation der erweiterten Wechselwirkung zu bestätigen, wurde ein von Dipl. Phys. M. G. Zacher entwickeltes Programm zur exakten Diagonalisierung des Hamilton-Operators bei endlichen Temperaturen benutzt. Da dieses Programm für eindimensionale Systeme konzipiert war, wurde eine Erweiterung der Programmquellen auf dreidimensionale Systeme vorgenommen. Damit konnten exakte Ergebnisse für statische Größen auf bis zu 8 Plätzen erzielt werden. Das analoge System wurde bei gleichen Parametern mit dem QMC-Verfahren berechnet. Die QMC-Ergebnisse sollten nach Gleichung (2.4) eine systematische Abweichung proportional $\Delta\tau^2$ zeigen.

Abbildung 2.2 zeigt die systematische Abweichung der QMC-Werte von dem exakten Ergebnis. Der durch einen quadratischen Fit ermittelte Wert für $\Delta\tau = 0$ zeigt im Rahmen der Fehler sehr gute Übereinstimmung.

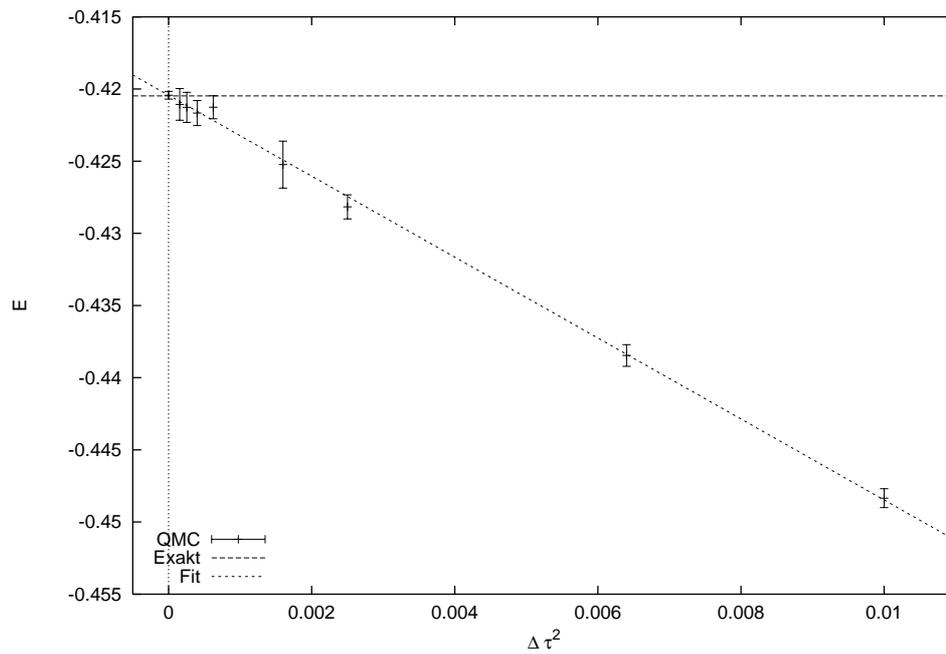


Abbildung 2.2: Quanten-Monte-Carlo-Berechnung der Gesamtenergie des *Extended*-Hubbard-Modells mit dem Parametersatz $\beta t = 2$, $U/t = 8$, $V/t = 1$, $\mu/t = 3.5$. Die bei verschiedenen Werten von $\Delta\tau$ gemessene Gesamtenergie zeigt einen systematischen Fehler proportional zu $\Delta\tau^2$. Bei $\Delta\tau = 0$ ist der durch einen quadratischen Fit ermittelte Wert eingezeichnet.

Kapitel 3

Das *Extended*-Hubbard-Modell bei Halbfüllung

In diesem Kapitel sollen die Eigenschaften des halbgefüllten *Extended*-Hubbard-Modells und ihre Abhängigkeit von der Stärke der Coulomb-Wechselwirkung untersucht werden. Einige einfache analytische Überlegungen zum Verhalten des *Extended*-Hubbard-Modells gehen dabei den Ergebnissen der QMC-Simulation voran. Zunächst soll durch einen störungstheoretischen Ansatz der Grundzustand des *Extended*-Hubbard-Modells untersucht werden (Abschnitt 3.1.1). Für den halbgefüllten Fall ist aus Überlegungen zum atomaren Limes des Modells ein Übergang von der antiferromagnetischen (“SDW”) in eine ladungsgeordnete Phase (“CDW”) für große V bekannt. Für beide Phasen soll die Störung des Grundzustandes durch die Elektronenbewegung diskutiert werden. Dabei wird eine qualitative Übereinstimmung mit den Simulationsdaten festgestellt. Für beide Phasen wird mittels einer Molekularfeldnäherung der Hamilton-Operator diagonalisiert (Abschnitt 3.1.2).

Die mit dem Quanten-Monte-Carlo-Verfahren simulierten Systeme sollen zunächst für schwache erweiterte Wechselwirkung unterhalb des abgeschätzten Phasenüberganges untersucht werden (Abschnitt 3.3.1). Dazu werden die Ein- und Zweiteilchenanregungen des EHM diskutiert und mit den Ergebnissen der analytischen Überlegungen verglichen. Dabei sind systematische Veränderungen in den Ein- und Zweiteilchenanregungen festzustellen.

Für stärkere Wechselwirkungen oberhalb eines kritischen Wertes V_c soll der Phasenübergang in die CDW-Phase beobachtet werden (Abschnitt 3.3.2). Die QMC-Ergebnisse zeigen dabei gute Übereinstimmung mit der Molekularfeldnäherung. Eine starke Abhängigkeit von der Ein- und Zweiteilcheneigenschaften von der erweiterten Wechselwirkung V kann beobachtet werden.

3.1 Analytische Näherungen

3.1.1 Störungstheorie zweiter Ordnung

Die störungstheoretische Behandlung des *Extended*-Hubbard-Modells bietet eine interessante Möglichkeit, den Einfluß der erweiterten Wechselwirkung V auf den Grundzustand abzuschätzen. Für das Hubbard-Modell $V = 0$ ist das Verfahren bekannt. Störungstheorie zweiter Ordnung führt dabei im Grenzfall großer lokaler Wechselwirkung U auf die Abbildung des Hubbard-Modells auf den Hamiltonoperator des antiferromagnetischen Heisenbergmodells [Nol92]. Es soll nun versucht werden, für das *Extended*-Hubbard-Modell eine ähnliche Lösung zu erreichen.

Es wird zunächst der atomare Grenzfall, also der Fall vollständig lokalisierter Elektronen, betrachtet. Der Hamiltonoperator des EHM lautet damit

$$H_0 = \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i,-\sigma} + V \sum_{\langle ij \rangle \sigma \sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}. \quad (3.1)$$

Der Operator der Elektronenbewegung

$$H_1 = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) \quad (3.2)$$

soll als Störung des Grundzustandes von H_0 behandelt werden und wird zunächst vernachlässigt. In Abhängigkeit von der erweiterten Wechselwirkung V lassen sich für H_0 zwei Grundzustände finden [Bor95]:

1. $V < V_c = U/4$: Das System befindet sich in einem Zustand, in dem sämtliche Elektronen gleichmäßig über das Gitter verteilt sind. Jeder Platz ist einfach besetzt. Die Grundzustandsenergie ist damit von der Zahl der Bindungen der erweiterten Wechselwirkung bestimmt, also von der Anzahl der Elektronen, die in der Reichweite der Wechselwirkung liegen. Die Grundzustandsenergie ist

$$E_{0,<} = 2NV. \quad (3.3)$$

2. $V > V_c$: Das System befindet sich in einem Zustand, in dem von den Ladungsträgern keine erweiterte Wechselwirkung wahrgenommen wird. Die einzelnen Plätze sind alternierend unbesetzt oder doppelt besetzt. Die Grundzustandsenergie ist also durch die Zahl der doppelt besetzten Plätze bestimmt:

$$E_{0,>} = U \frac{N}{2}. \quad (3.4)$$

Ein beliebiger Zustand des Systems $|dw\alpha\rangle$ ist somit bestimmt durch die Anzahl der Doppelbesetzungen d und erweiterten Wechselwirkungen w sowie einer Konfiguration der Elektronenspins α .

Es soll zunächst der Fall $V < V_c$ betrachtet werden. Störungstheorie erster Ordnung erfordert die Lösung der Säkulargleichung [Nol92]

$$\det \left({}^{(0)}\langle 00\alpha | H_1 | 00\alpha \rangle^{(0)} - E_{0,<}^{(1)} \delta_{\alpha\alpha'} \right) = 0. \quad (3.5)$$

Es ist leicht zu erkennen, daß das einmalige Anwenden des Operators H_1 einen doppelt besetzten und einen leeren Platz erzeugt. Das Matrixelement ${}^{(0)}\langle 00\alpha | H_1 | 00\alpha \rangle^{(0)}$ verschwindet also. Die Determinante in Gleichung (3.5) kann damit nie Null werden. Es gibt keine Energiekorrektur erster Ordnung.

Störungstheorie zweiter Ordnung erfordert die Lösung des Gleichungssystems [Nol92]

$$\sum_{\alpha} C_{\alpha} \left\{ \sum_{d,w,\gamma}^{d \neq 0, w \neq 2N} {}^{(0)}\langle 00\alpha' | H_1 | dw\gamma \rangle \langle dw\gamma | H_1 | 00\alpha \rangle^{(0)} \left(E_0^{(0)} - E_{d,w}^{(0)} \right)^{-1} - E_{0,<}^{(2)} \delta_{\alpha\alpha'} \right\} = 0. \quad (3.6)$$

Dies entspricht der Eigenwertgleichung eines effektiven Hamiltonoperators H_{eff} mit den Matrixelementen

$$\langle 00\alpha' | H_1 \sum_{d,w,\gamma}^{d \neq 0, w \neq 2N} \frac{|dw\gamma\rangle \langle dw\gamma|}{E_0^{(0)} - E_{d,w}^{(0)}} H_1 | 00\alpha \rangle = E_{2,<}^{(2)} \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (3.7)$$

Benutzt man, daß ${}^{(0)}\langle dw\alpha' | H_1 | 00\alpha \rangle^{(0)} \neq 0$ höchstens für $d = 1$ und $w = 2N - 1$, so ist die Energiedifferenz $E_0^{(0)} - E_{d,w}^{(0)} = E_0^{(0)} - E_{1,2N-1}^{(0)} = V - U$. Man kann also für Gleichung (3.7) weiterhin schreiben:

$$E_{2,<}^{(2)} \delta_{\alpha\alpha'} = -\frac{1}{U - V} \langle 00\alpha' | H_1 \left(\sum_{d,w,\gamma} |dw\gamma\rangle \langle dw\gamma| \right) H_1 | 00\alpha \rangle \quad (3.8)$$

$$= -\frac{1}{U - V} \langle 00\alpha' | H_1^2 | 00\alpha \rangle. \quad (3.9)$$

Das Matrixelement $-\frac{1}{U-V} \langle 00\alpha' | H_1^2 | 00\alpha \rangle$ ist nun [Nol92, Fra94] gleich der Grundzustandsenergie des Heisenberg-Antiferromagneten mit der Kopplung $J = 4t^2/(U - V)$, also:

$$E_{2,>}^{(2)} \delta_{\alpha\alpha'} = -4 \frac{t^2}{U - V} \cdot \kappa. \quad (3.10)$$

Für das eindimensionale Modell läßt sich der Faktor κ exakt zu $\ln(2)$ bestimmen [Hir84]. Im zweidimensionalen System haben numerische Rechnungen mittels QMC einen Wert von 0.585 ± 0.001 ergeben [Reg88]. Damit kann die gestörte Grundzustandsenergie $E_{0,<}$ angegeben werden:

$$E_{<} = N \left(2V - \frac{-4t^2}{U - V} \cdot \kappa \right) \quad (3.11)$$

Der Grundzustand des EHM mit $V < V_c$ ist also antiferromagnetisch geordnet. Eine Energieabsenkung gegenüber dem atomaren Grenzfall wird dabei zusätzlich durch ein virtuelles Hüpfen auf einen Nachbarplatz und zurück erreicht – dies entspricht der zweimaligen Anwendung des Störoperators H_1 . Effektiv wird dadurch eine Kopplung an den Nachbarspin eingeführt, die eine antiferromagnetische Ordnung bevorzugt.

Für den Fall $V > V_c$ läßt sich die Rechnung völlig analog abhandeln. Es ist aber zu beachten, daß Hüpfen auf einen Nachbarplatz zwar eine Energieabsenkung um U zur Folge hat, aber die Energie durch die Wechselwirkung mit den nächsten Nachbarn um $7V$ angehoben wird. Auch für den Fall $V > V_c$ gibt es keine Energiekorrektur erster Ordnung.

Die Energiekorrektur zweiter Ordnung ist

$$E_{2,>}^{(2)} \delta_{\alpha\alpha'} = -4 \frac{t^2}{7V - U}. \quad (3.12)$$

Die gestörte Grundzustandsenergie wird damit zu

$$E_{>} = N \left(\frac{U}{2} - \frac{4t^2}{7V - U} \right). \quad (3.13)$$

Abhängig von V wird die Phase mit der jeweils niedrigeren Energie aus $E_{>}$ und $E_{<}$ eingenommen. Dabei fällt auf, daß gegenüber dem atomaren Grenzfall die Energie $E_{>}$ für $V = U/7$ divergiert. Der Grundzustand $|E_{0,>}\rangle$ sollte also bereits bei $V > U/7$ eingenommen werden.

Abbildung 3.1 zeigt die Gesamtenergie E_0 eines 6×6 -Gitters bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 4$ für V -Werte, die den beiden oben unterschiedenen Fällen entsprechen. Im Vergleich mit QMC-Ergebnissen bei endlicher Temperatur gibt die störungstheoretische Näherung zumindest qualitativ eine richtige Lösung. Für $V < V_c$ steigt E_0 linear mit V an. Die mit dem Quanten-Monte-Carlo-Verfahren berechneten Werte liegen dabei systematisch unterhalb der analytischen Lösung. Die Energieabsenkung durch die Elektronenbewegung des Störoperators H_1 trägt also stärker zur Grundzustandsenergie bei, als dies in der Störungsrechnung berücksichtigt wurde. Für $V > V_c$ stimmen analytische Lösung und QMC-Ergebnis mit steigendem V zunehmend besser überein.

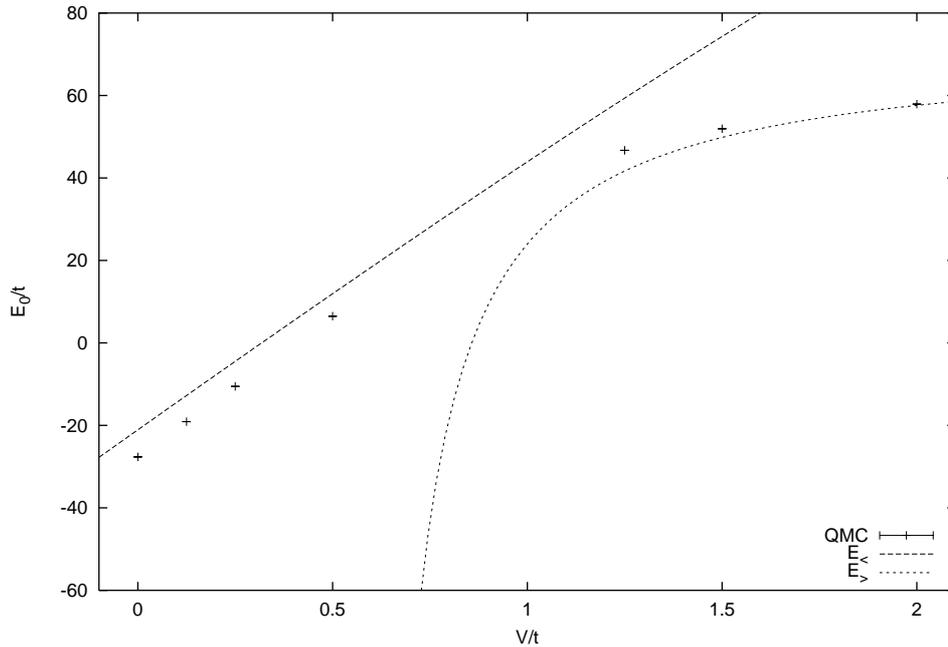


Abbildung 3.1: Vergleich der mit dem QMC-Verfahren berechneten Gesamtenergie bei endlicher Temperatur mit der Grundzustandsenergie in Störungstheorie zweiter Ordnung. Betrachtet wird ein 6×6 -Gitter bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 4$. Die Werte der erweiterten Wechselwirkung sind auf der x -Achse aufgetragen.

Der Vergleich der QMC-Ergebnisse für die kinetische Energie pro Platz mit den Störtermen zweiter Ordnung (Abbildung 3.2) ergibt eine relativ schlechte Übereinstimmung, wobei die Werte erheblich weiter abweichen als dies aus der Gesamtenergie zu erwarten wäre. Der Wert der Gesamtenergie pro Platz aus der QMC-Rechnung ergab $-0.77t$, der durch Näherung berechnete Wert ist $-0.59t$. Dagegen ist der Wert der kinetischen Energie pro Platz aus QMC $-1.30t$, weist also eine erhebliche Differenz auf. Es ist jedoch fraglich, ob eine Entsprechung der Störterme mit der kinetischen Energie überhaupt besteht.

3.1.2 Spin- und Ladungs-Dichte-Welle-Näherung

Wie im vorhergehenden Abschnitt gezeigt, lassen sich für das *Extended*-Hubbard-Modell bei Halbfüllung ein antiferromagnetisch spingeordneter und ein alternierend ladungsgeordneter Grundzustand finden. Es soll nun versucht werden, diese beiden Zustände in Form einer Spindichtewelle (SDW) und einer Ladungsdichtewelle (*Charge density wave*, CDW) durch eine Molekularfeldnäherung abzubilden. Dabei wird der Hamiltonoperator des *Extended*-Hubbard-Modells unter

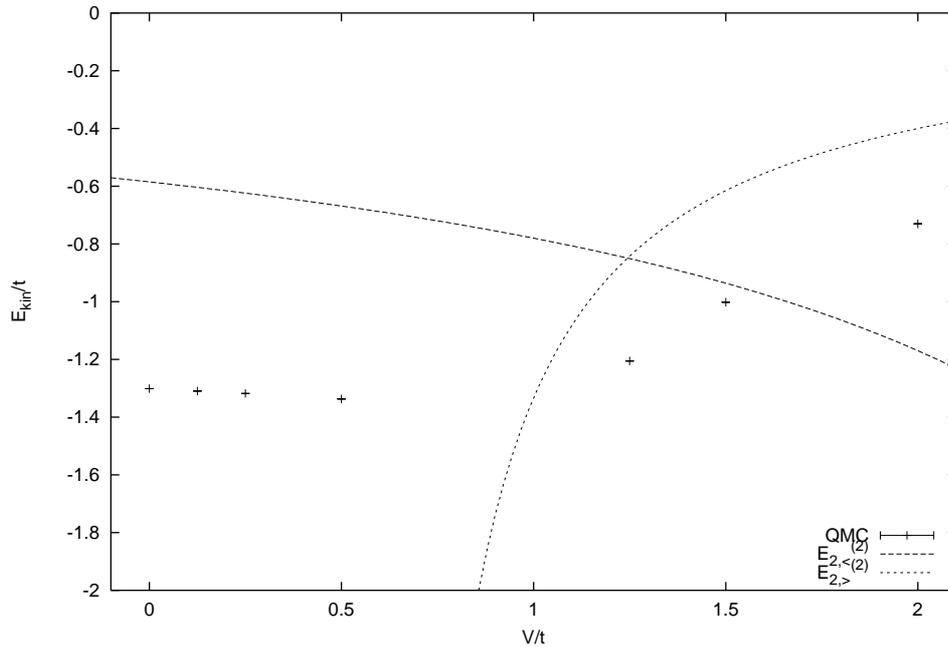


Abbildung 3.2: Vergleich der Störterme zweiter Ordnung mit den QMC-Daten der kinetischen Energie eines 6×6 -Gitter bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 4$.

Vernachlässigung von Fluktuationen so vereinfacht, daß eine anschließende Diagonalisierung möglich ist. Die hier vorgestellte Molekularfeldnäherung folgt einem ähnlichem Ansatz für das *Extended*-Hubbard-Modell mit längerreichweitigem Hüpfen in Referenz [Cha97].

Für das Hubbard-Modell wurde der SDW-Ansatz bereits eingehend untersucht. Detaillierte Studien der SDW-Hartree-Fock-Lösung [Sch89], wie auch der *Random-Phase-Approximation* des Spektrums der kollektiven Anregungen haben dabei gezeigt, daß dieser Ansatz auch für große Werte von U , wo Magnetisierung und Spin-Wellen-Dispersion des Heisenberg-Modells reproduziert werden, effektiv ist [Cha97].

Grob skizziert würde sich für die beiden in Abschnitt 3.1.1 erläuterten Grundzustände ein Bild wie in Abbildung 3.3 ergeben. Diesen beiden unterschiedlichen Sachverhalten soll nun im folgenden eine einfache analytische Form gegeben werden. Die Diagonalisierung des vollen Hamiltonoperator stellt ein im allgemeinen nicht exakt lösbares Problem dar. Die Bewegungsgleichung der Greenschen Funktion führt auf eine unendliche Reihe gekoppelter Gleichungen, deren Hierarchie an einer Stelle durchbrochen werden muß, um zu einer Lösung zu gelangen. Der einfachste Ansatz besteht darin, Operatorprodukte unter Vernachlässigung der

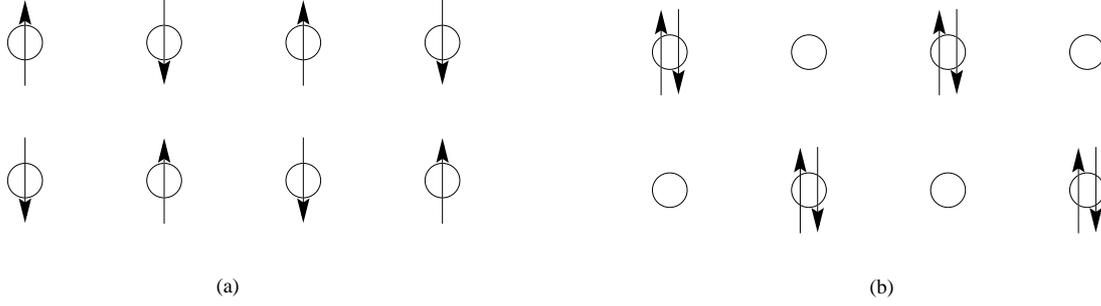


Abbildung 3.3: Skizziert Ladungs- und Spinverteilung für den SDW- (a) und CDW-Zustand (b).

Wechselwirkung von Fluktuationen zu linearisieren:

$$\begin{aligned} A &= \langle A \rangle + (A - \langle A \rangle) \\ AB &\approx A \langle B \rangle - B \langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Wendet man diese Näherung auf die Wechselwirkungsterme des *Extended*-Hubbard-Hamiltonoperators an, so erhält man einen wechselwirkungsfreien Molekularfeld-Operator

$$\begin{aligned} H_{MF} &= H_0 + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} [\langle n_{i\sigma} \rangle n_{i-\sigma} + \langle n_{i-\sigma} \rangle n_{i\sigma} - \langle n_{i\sigma} \rangle \langle n_{i-\sigma} \rangle] \\ &+ V \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} [\langle n_{i\sigma} \rangle n_{j\sigma'} + \langle n_{j\sigma'} \rangle n_{i\sigma} - \langle n_{i\sigma} \rangle \langle n_{j\sigma'} \rangle], \end{aligned} \quad (3.15)$$

wobei die jeweils letzten Terme beider Summen als Konstanten in den Hamilton-Operator eingehen und daher im weiteren unterdrückt werden. Die beiden in Abbildung 3.3 skizzierten Zustände werden nun anhand ihrer mittleren Teilchenzahlen charakterisiert [Cha97]. Man teilt nun das Gitter in zwei Untergitter, A und B, und macht folgenden Ansatz:

$$\langle n_{i\sigma} \rangle_{CDW} = \frac{1}{2} + \sigma \frac{m}{2} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} \quad [\text{Ful95}] \quad (3.16)$$

$$\langle n_{i\sigma} \rangle_{SDW} = \frac{1}{2} + \frac{p}{2} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i}. \quad (3.17)$$

\mathbf{R}_i sind dabei die Gittervektoren und $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ der reziproke Gittervektor des antiferromagnetischen Grundzustandes. Die Größen p und m beschreiben dabei die Ordnungsparameter des Zustandes. m ist die sogenannte *Staggered Magnetization* (alternierende Magnetisierung) [Ful95]. Sie ist ein Maß dafür, wie stark Antiferromagnetismus im System vorliegt. p ist die im CDW-Zustand analoge Größe, die die Stärke der alternierenden Ladungsordnung beschreibt.

Für m und p gilt:

$$m = \begin{cases} \langle n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow} \rangle, & \text{auf Untergitter A} \\ \langle n_{i,\downarrow} - n_{i,\uparrow} \rangle, & \text{auf Untergitter B} \end{cases} \quad (3.18)$$

$$p = \begin{cases} \langle n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow} \rangle, & \text{auf Untergitter A} \\ -\langle n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow} \rangle, & \text{auf Untergitter B} \end{cases} \quad (3.19)$$

Diese Beziehungen werden durch den Faktor $\exp(-i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i)$ in den Gleichungen (3.18) und (3.19) sichergestellt. Durch die oben beschriebene Unterteilung in zwei Untergitter verdoppelt sich die Einheitszelle und die korrespondierende Brillouin-Zone wird um die Hälfte reduziert [Ful95]. $\exp(-i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i)$ ist also +1 auf Untergitter A und -1 auf Untergitter B. Durch Einsetzen von (3.18) und (3.19) in (3.23) und Fouriertransformation

$$c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} c_{i\sigma} \quad (3.20)$$

$$c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} c_{i\sigma}^\dagger \quad (3.21)$$

$$(3.22)$$

läßt sich der Hamiltonoperator H_{MF} folgendermaßen schreiben

$$H_{MF} = \sum'_{\mathbf{k}\sigma} \left[\epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \right] + \sum'_{\mathbf{k}\sigma} \Delta_a \left[c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \right] \quad (3.23)$$

oder

$$H_{MF} = \sum'_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) & \Delta_a \\ \Delta_a & -\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Die gestrichene Summe bedeutet dabei die Summation über die reduzierte Brillouin-Zone. Die Nebendiagonalelemente wurden dabei wie folgt abgekürzt [Cha97]:

$$\Delta_{SDW} = -\sigma \frac{m}{2} U \quad (3.25)$$

$$\Delta_{CDW} = \left(\frac{U}{2} - 4V \right) p. \quad (3.26)$$

Mit Hilfe der unitären Transformation [Ful95]

$$\begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}\sigma} \\ v_{\mathbf{k}} & -u_{\mathbf{k}\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

kann der Hamiltonoperator H_{MF} schließlich diagonalisiert werden:

$$H_{MF} = \sum'_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}\sigma} - \beta_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \beta_{\mathbf{k}\sigma} \right). \quad (3.28)$$

Die jetzt diagonalen Energieeigenwerte $E_{\mathbf{k}}$ entsprechen den Eigenwerten der Hamilton-Matrix aus Gleichung (3.24):

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + \Delta_a^2}. \quad (3.29)$$

Die Amplituden der Transformation (3.27) sind durch

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} \right)} \\ v_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} \right)} \end{aligned} \quad (3.30)$$

gegeben. Im Grundzustand $|\Omega\rangle$ bei Halbfüllung ist das energetisch tiefliegende Valenzband vollständig besetzt und $|\Omega\rangle$ kann somit als

$$|\Omega\rangle = \prod'_{\mathbf{k}\sigma} \beta_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (3.31)$$

geschrieben werden. Über die Berechnung von m und p aus den Gleichungen (3.18) und (3.19) mit diesem Grundzustand, also $\langle m \rangle = \langle \Omega | m | \Omega \rangle$ und analog für p , erhält man eine selbstkonsistenten Beziehung für die Energielücke zwischen den Bändern:

$$1 = \frac{2\Gamma_a}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + \Delta_a^2}}. \quad (3.32)$$

Dabei gilt $\Gamma_{SDW} = \frac{U}{2}$ und $\Gamma_{CDW} = \frac{U}{2} - 4V$ für SDW- und CDW-Zustand. Die beiden Parameter Γ_{SDW} und Γ_{CDW} sind die einzigen Werte, über die die Wechselwirkungen U und V in die selbstkonsistente Berechnung der Bandlücke einfließen. Da V in der SDW-Näherung nicht vorkommt, sagt dieser Ansatz eine weitgehende Unabhängigkeit der Einteilchen-Anregungen von dieser Größe voraus.

Für die beiden oben beschriebenen Grundzustände der CDW- und SDW-Phase des *Extended*-Hubbard-Modells soll im folgenden ein Ausdruck für die spektrale Dichte abgeleitet werden. Für $T = 0$ ist die spektrale Dichte allgemein als [End96]

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \Theta(\omega) A^>(\mathbf{k}, \omega) + \Theta(-\omega) A^<(\mathbf{k}, \omega) \quad (3.33)$$

mit

$$A^>(\mathbf{k}, \omega) = \sum_l |\langle \Omega | c_{\mathbf{k},\uparrow} | l \rangle|^2 \delta(\omega - (\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_0)) \quad (3.34)$$

und

$$A^<(\mathbf{k}, \omega) = \sum_l |\langle l | c_{\mathbf{k},\uparrow} | \Omega \rangle|^2 \delta(\omega - (\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_l)) \quad (3.35)$$

gegeben. Die Summe \sum_l läuft dabei über alle Eigenzustände $|l\rangle$ des Hamilton-Operators H_{MF} aus Gleichung (3.28) mit den entsprechenden Eigenenergien \mathcal{E}_l . Durch Einsetzen der transformierten Operatoren aus Gleichung (3.27) in die Definition der spektralen Dichte folgt:

$$A^>(\mathbf{k}, \omega) = \sum_l \langle \Omega | u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}, \uparrow} + v_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}, \uparrow} | l \rangle \cdot \langle l | u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger | \Omega \rangle \delta(\omega - (\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_0)) \quad (3.36)$$

$$= \sum_l u_{\mathbf{k}}^2 |\langle \Omega | \alpha_{\mathbf{k}, \uparrow} | l \rangle|^2 \delta(\omega - (\mathcal{E}_l - \mathcal{E}_0)). \quad (3.37)$$

Der einzige Eigenzustand $|l\rangle$, für den

$$\langle \Omega | \alpha_{\mathbf{k}, \uparrow} | l \rangle \neq 0$$

gilt, ist $|\tilde{l}\rangle = \alpha_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger |\Omega\rangle$. Hierfür ist $\langle \Omega | \alpha_{\mathbf{k}, \uparrow} | \tilde{l} \rangle = 1$ und $\mathcal{E}_{\tilde{l}} - \mathcal{E}_0 = E_{\mathbf{k}}$. Also gilt für die Einzelbeiträge der spektralen Dichte

$$A^>(\mathbf{k}, \omega) = u_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}) \quad (3.38)$$

und analog

$$A^<(\mathbf{k}, \omega) = v_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega + E_{\mathbf{k}}). \quad (3.39)$$

Für die spektrale Dichte der SDW- und CDW-Phase in Molekularfeldnäherung gilt also:

$$A_{SDW/CDW}(\mathbf{k}, \omega) = u_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}) + v_{\mathbf{k}}^2 \delta(\omega + E_{\mathbf{k}}). \quad (3.40)$$

3.2 Stand der Forschung

Im Zusammenhang mit starken Elektronenkorrelationen gehört das zweidimensionale Hubbard-Modell wohl zu einem der am meisten diskutierten Modelle. Das Hubbard-Modell zeigt bei Halbfüllung und ausreichend niedrigen Temperaturen die Eigenschaften eines antiferromagnetischen Isolators, während bei Dotierung der Übergang in einen metallischen Zustand zu beobachten ist [Pre95, Pre96]. Dabei können die Daten der winkelaufgelösten Photoemissions-Spektroskopie durch QMC-Rechnungen qualitativ wie quantitativ recht gut wiedergegeben werden. Zum *Extended*-Hubbard-Modell mit längerreichweitiger Coulomb-Wechselwirkung sind bisher nur wenige Veröffentlichungen erschienen. Die meisten Arbeiten beschränken sich dabei auf eindimensionale Systeme. Einige für die im weiteren Verlauf betrachteten Systeme interessante Ergebnisse sollen hier kurz erwähnt werden.

In Abschnitt 3.1.1 wurde eine Näherung für den Grundzustand des EHM abgeleitet. Dabei war festzustellen, daß das EHM für Werte der Coulomb-Wechselwirkung V zwischen direkten Nachbarn unterhalb eines kritischen Wertes V_c effektiv durch das antiferromagnetische Heisenberg-Modell mit einer renormierten magnetischen Austauschwechselwirkung J beschrieben werden kann. Dieser Sachverhalt ist für eindimensionale System mit der Methode der exakten Diagonalisierung bereits eingehend untersucht worden [Ede96, Bri97]. Dabei zeigt sich, daß in einer Dimension die antiferromagnetische Ordnung bis zur CDW-Instabilität hin erhalten bleibt. Dadurch kann J bis zu unphysikalisch hohen Werten im Bereich des Hüpfmatrixelements t hin gesteigert werden. Für höhere räumliche Dimensionen ist dies jedoch wegen der höheren Koordinationszahl nicht möglich. Für diesen Bereich existieren dennoch experimentelle Fragestellungen, wie z.B. aus dem Bereich der Fullerene. Für undotiertes C_{60} liegen dabei Ergebnisse aus der Auger-Spektroskopie vor, die den Wert der lokalen Abstoßung auf $U \approx 1.5\text{eV}$ abschätzen [Lof92]. Analysen der Exzitonendispersion ergeben einen Wert von $U - V \approx 0.35\text{eV}$ [Jan95], was in Übereinstimmung mit anderen experimentellen Abschätzung steht [Bru93]. Eine Abschätzungen der Abschirmung in den Kuprate ergab für die Coulomb-Wechselwirkung zwischen direkten Nachbarn V Wert zwischen $V/t = 0.37$ und $V/t = 2.6$ bei einer lokalen Wechselwirkung von $U/t = 8$ [Sch98]. Diese Werte wurden durch eine Kombination von diagrammatischen Methoden und numerischen Rechnungen erzielt.

Der Übergang von der antiferromagnetisch geordneten SDW-Phase in die alternierend ladungsgeordnete CDW-Phase ist bisher nur für eindimensionale Systeme untersucht worden [Hir84, Mun97]. Hirsch fand dabei, daß dieser Übergang, zumindest für eindimensionale Systeme, ab einer lokalen Wechselwirkung von $U/t = 3$ erster Ordnung ist. Für die kritische Wechselwirkung des Überganges ist dabei eine Abweichung von dem kritischen Wert im atomaren Grenzfall zu beobachten.

3.3 QMC-Ergebnisse

3.3.1 Der Bereich schwacher Coulomb-Wechselwirkung: $V < V_c$ bei $U/t = 8$

In diesem Abschnitt sollen die Ergebnisse der Quanten-Monte-Carlo-Simulationen zum *Extended*-Hubbard-Modell für Wechselwirkungen $V \leq 0.5$ unterhalb des Überganges in die CDW-Phase bei Halbfüllung diskutiert werden. Eine kürzlich veröffentlichte Arbeit über die Abschirmung der Coulombwechselwirkung in den Kuprat-Supraleitern schätzt die erweiterte Wechselwirkung V des *Extended*-Hubbard-Modells auf einen Wert zwischen $V = 0.37t$ und $V = 2.6t$ ab [Sch98].

Die in diesem Abschnitt diskutierten Systeme liegen also an der unteren Grenze dieser Abschätzung. Daher sollten die Eigenschaften des EHM in diesem Bereich nur wenig von denen des Hubbard-Modells mit $V/t = 0$ abweichen. In die im vorhergehenden Kapitel besprochene SDW-Näherung geht die erweiterte Wechselwirkung gar nur als konstanter Energiebeitrag ein, beeinflusst die dynamischen Eigenschaften also nicht.

Zunächst soll die spektrale Dichte der mit dem QMC-Verfahren simulierten Systeme diskutiert werden.

Abbildung 3.4 zeigt die Entwicklung der Einteilchen-Spektraldichte mit Coulombwechselwirkung V von $V/t = 0$ zu $V/t = 0.5$ bei einer inversen Temperatur $\beta t = 5$ und einer lokalen Wechselwirkung von $U/t = 8$. Der Weg durch den Impulsraum ist durch die Hochsymmetriepunkte $\Gamma(\mathbf{k} = (0, 0))$, $M(\mathbf{k} = (\pi, 0))$ und $M(\mathbf{k} = (\pi, \pi))$ symbolisiert (siehe auch Anhang B). Dunklere Bereiche zeigen höheres spektrales Gewicht. Für das Hubbard-Modell mit $V/t = 0$ sind zwei schmale, niederenergetische Strukturen der Breite $\sim 2t$ oberhalb und unterhalb von $(\omega - \mu)/t = 0$ zu sehen, die von einer Reihe höherenergetischer Anregungen abgesetzt sind. Dies stimmt mit bereits existierenden Simulationen des Hubbard-Modells überein [Pre95, Gro96].

Auffällig ist, daß die hochenergetischen Peaks um den X-Punkt und die niederenergetischen Anregungen um den M-Punkt bei einer erweiterten Wechselwirkung $V = 0.5$ stark an Gewicht einbüßen oder verschwinden. Dabei ist unklar, ob dies ein Effekt der erweiterten Wechselwirkung ist oder durch numerische Probleme verursacht wird. Hohe Wechselwirkungspotentiale und niedrige Temperaturen können aufgrund des in Abschnitt 2.1.4 beschriebenen Vorzeichenproblems zu einer Verschlechterung der Auflösung einer QMC-Simulation beitragen [Gro96, End96]. Zudem muß zur Simulation des *Extended*-Hubbard-Modells von einem Rechenaufwand ausgegangen werden, der im Vergleich zum Hubbard-Modell neunmal höher liegt. Für die vorliegenden Systeme wurden mittlere Vorzeichen von 1.0 ($V/t = 0$), 0.835 ($V/t = 0.25$) und 0.564 ($V/t = 0.5$) festgestellt. Bei dem beiden letztgenannten Systemen kann also von einer möglichen Beeinträchtigungen in der Auflösung ausgegangen werden, was bei der weiteren Diskussion berücksichtigt werden muß. Dies betrifft vor allem die niederenergetische Anregung unterhalb der Energie $\omega = \mu$ am Γ -Punkt. Diese kann in den Simulationen mit $V/t = 0$ und $V/t = 0.5$ aufgelöst werden, nicht jedoch für $V/t = 0.25$. Bei genauerer Analyse der Peakpositionen zeigt sich aber, daß das Maximum der Intensität für das System (b) in Abbildung 3.4 deutlich zu $\omega = \mu$ hin verschoben ist und der angesprochene Peak im Rahmen der *Maximum Entropy*-Analyse mit dem höheren spektralen Gewicht vereinigt wurde.

Im vorhergehenden Abschnitt wurde ein Ausdruck für die spektrale Dichte im Rahmen einer Molekularfeldnäherung abgeleitet. Diese genäherte spektrale Dich-

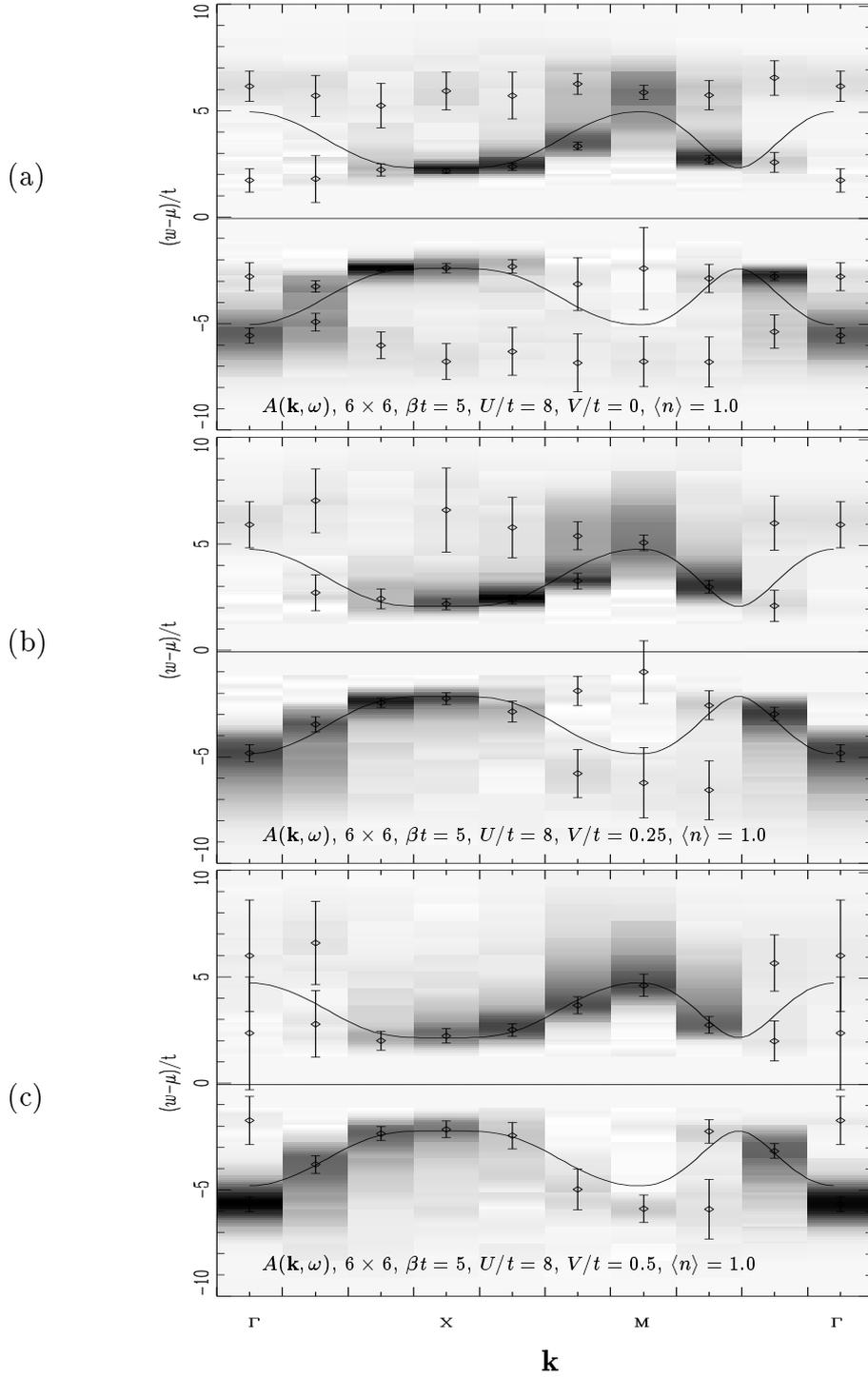


Abbildung 3.4: Einteilchen-Spektraldichte eines 6×6 -Gitters bei $\beta t = 5$ mit $U/t = 8$, $\langle n \rangle = 1.0$. Dunklere Bereiche zeigen höheres spektrales Gewicht. Der Weg durch den Impulsraum ist durch die Hochsymmetriepunkte symbolisiert: $\Gamma(\mathbf{k} = (0, 0))$, $X(\mathbf{k} = (\pi, 0))$ und $M(\mathbf{k} = (\pi, \pi))$. Die durchgezogene Linie beschreibt eine an die Maxima des spektralen Gewichtes angefitzte SDW-Näherung.

te $A(\mathbf{k}, \omega)$ soll nun mit den Ergebnisse der QMC-Simulation verglichen werden. Alle Systeme in Abbildung 3.4 zeigen eine Energielücke von $\sim 2.4t$. In der SDW-Näherung ist die Energielücke durch Gleichung (3.32) bestimmt. Die selbstkonsistente Lösung dieser Gleichung für eine lokale Wechselwirkung von $U/t = 8$ ergab eine Energielücke von $\Delta_{SDW} = 3.57$, was der in [Gro96] durchgeführten Berechnung entspricht. Dies ist jedoch ein zu großer Wert, der nicht in Übereinstimmung mit den QMC-Daten steht. Der Grund dafür liegt in der Vernachlässigung der Fluktuationen quadratischer Ordnung in Gleichung (3.23). Die QMC-Ergebnisse stellen aber, bis auf einen kontrollierbaren, statistischen Fehler, exakte Werte dar, in denen diese Fluktuationen berücksichtigt sind. Die Abweichung in der Größe der Energielücke wird also durch Vielteilcheneffekte verursacht, die in der einfachen Molekularfeldnäherung nicht enthalten sind. Um dennoch zu einer Aussage über die Güte der in der SDW-Näherung berechneten Bandstruktur zu kommen, wurde $A_{SDW}(\mathbf{k}, \omega)$ an die Maxima des spektralen Gewichtes der QMC-Ergebnisse quadratisch angefitet. Dieser Fit wird durch die durchgezogenen Linien in Abbildung 3.4 repräsentiert. Die durch den Fit ermittelten Werte sind in Tabelle 3.1 aufgelistet. Für das Hubbard-Modell ($V/t = 0$) wird die Spektrale Dichte auch

V/t	0.0	0.25	0.50
t_{fit}	1.11 ± 0.21	1.20 ± 0.08	1.18 ± 0.08
Δ_{fit}	2.38 ± 0.35	2.36 ± 0.16	2.45 ± 0.19
χ^2	4.42	1.71	1.29

Tabelle 3.1: Aus dem numerischen Fit an die Maxima des spektralen Gewichtes eines 6×6 -Gitters bei $\beta t = 5$ mit $U/t = 8$ und $V/t = 0, 0.25, 0.5$ gewonnene Parameter t und Δ (Vergleiche Abb.3.4). Der Wert von χ^2 ist pro Freiheitsgrad angegeben.

mit dem angefiteten Wert für die Energielücke Δ_{fit} und das Hüpfmatrixelement t_{fit} nur unvollständig wiedergegeben. Zwar werden qualitativ die Bereiche großen spektralen Gewichtes richtig beschrieben, d.h. der Bereich negativer Energien für $M \rightarrow \Gamma \rightarrow X$ und der Bereich positiver Energien für $X \rightarrow M$, eine Übereinstimmung im Rahmen der Fehler besteht jedoch nur für die niederenergetischen Anregungen um $(\omega - \mu)/t = 0$. Das System (c) aus Abbildung 3.4 entspricht der SDW-Näherung etwas besser. Vor allem der Bereich positiver Energien um den Γ -Punkt zeigt im Rahmen der Fehler gute Übereinstimmung. Wie Tabelle 3.1 zu entnehmen ist, stimmen die angefiteten Parameter t_{fit} und Δ_{fit} für verschiedene Werte der erweiterten Wechselwirkung V im Rahmen ihrer Fehler überein. Durch die SDW-Näherung kann also eine Entwicklung der Einteilchen-Spektraldichte mit der Coulomb-Wechselwirkung zwischen direkten Nachbarn nicht beobachtet werden, was bereits aus der Herleitung in Abschnitt 3.1.2 abzusehen war.

Insgesamt können mit der SDW-Näherung zwar die Maxima des spektralen Ge-

wichtiges qualitativ wiedergegeben werden, die niederenergetische Physik wird jedoch nicht ausreichend beschrieben. Dies steht in Übereinstimmung mit früheren Arbeiten dieses Lehrstuhls, die die Existenz kohärenter, niederenergetischer Strukturen in der Größenordnung der magnetischen Austauschwechselwirkung J nachweisen konnten [Pre95, Pre97]. Für das EHM läßt sich die quantitative Entwicklung dieser Strukturen wegen der oben angesprochenen Probleme nicht eindeutig beobachten. Daher sollen im folgenden noch einzelne Aspekte des Spektrums auf eine V -Abhängigkeit untersucht werden. Abbildung 3.5 zeigt die spek-

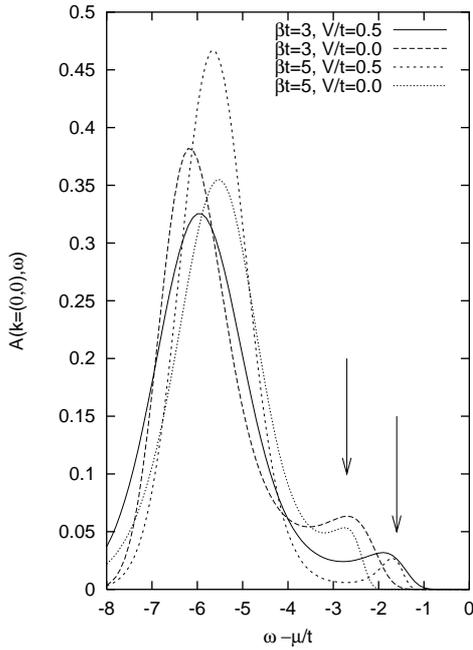


Abbildung 3.5: Spektrale Dichte $A(\mathbf{k} = (0, 0), \omega)$ der Systeme (a) und (c) aus Abbildung 3.4. Die gekennzeichneten Peaks haben für $\beta t = 3$ und $\beta t = 5$ konstante Positionen bei $\omega/t = -2.8$ und $\omega/t = -1.8$. Diese in V systematische Veränderung liegt allerdings noch im Rahmen der Fehler aus der *Maximum Entropy*-Analyse.

trale Dichte $A(\mathbf{k} = (0, 0), \omega)$ des Hubbard-Modells mit $V/t = 0$ und des *Extended*-Hubbard-Modells mit $V/t = 0.5$ bei einer lokalen Wechselwirkung $U/t = 8$ bei den inversen Temperaturen $\beta t = 3$ und $\beta t = 5$. Obwohl die in dieser Abbildung gekennzeichneten Peaks sich im Rahmen der Fehler überdecken (siehe auch Abbildung 3.4), zeigen sie eine systematische Abhängigkeit von der Stärke der erweiterten Wechselwirkung. Die angezeichneten Positionen dieser Anregung, $\omega/t = -2.8$ und $\omega/t = -1.8$, weisen eine Verschiebung um $\Delta\omega = 1 = 2 \cdot \Delta V$ auf. Der Peak am X-Punkt liegt für die hier diskutierten Systeme jedoch durchgehend bei $\omega/t = -2.2$. Das kohärente Band unterhalb von $(\omega - \mu)/t = 0$ zeigt also für $\Gamma \rightarrow X$ eine zu negativen Energien hin abfallende Tendenz, wenn eine erweiterte Coulomb-Wechselwirkung von $V/t = 0.5$ einbezogen wird. Für $V/t = 0.0$ beobachtet man genau die entgegengesetzte Steigung. Experimentelle Studien der winkelaufgelösten Photoemission von $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ zeigen jedoch die durch das EHM mit $V/t = 0.5$ beschriebene negative Steigung. Abbildung 3.6 zeigt die experimentellen Daten (links) im Vergleich mit den Peakpositionen des EHM.

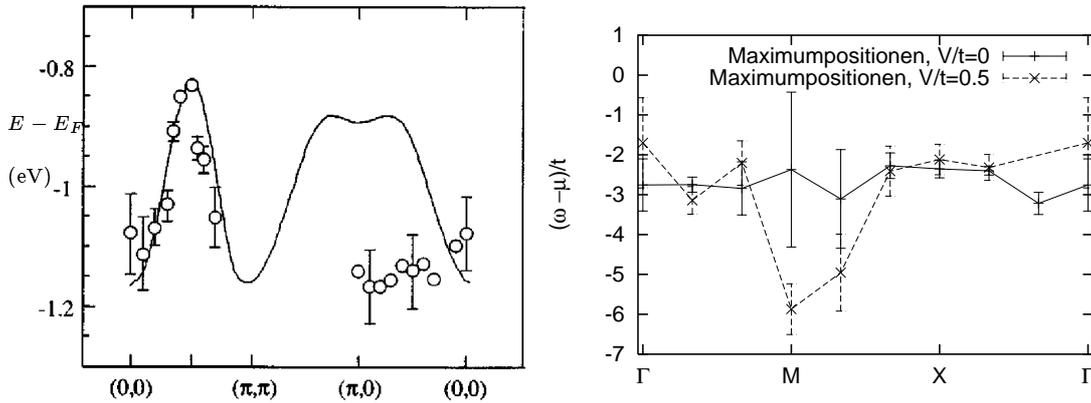


Abbildung 3.6: Links: Daten der winkelaufgelösten Photoemissionsspektroskopie von $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ [Wel95]. Die durchgezogene Linie repräsentiert die Dispersion des $t - J$ -Modells. Die experimentellen Daten werden durch dieses Modell im $\Gamma \rightarrow X$ nicht beschrieben. Rechts: Peakpositionen des Hubbard-Modells und des EHM mit $V/t = 0.5$. Das EHM beschreibt die Steigung der Dispersion qualitativ besser.

Im gegensatz zu der Dispersion des $t - J$ - und des Hubbard-Modells zeigt das EHM die qualitativ richtige Dispersion für $\Gamma \rightarrow M$. Das gleiche Verhalten ist dabei schon für das Hubbard-Modell mit längerreichweitigem Hüpfen bekannt [Gro98]. Für den Σ -Punkt $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$, bei dem in der experimentellen Studie eine Struktur bei einer Energie von 0.8eV gefunden wird, kann hier keine Aussage getroffen werden, da dieser Punkt auf einem 6×6 -Gitter nicht darstellbar ist. Eine quantitative Analyse bleibt also weitergehenden Studien auf größeren Gittern vorbehalten. Eine verbesserte Auswertung der Peakpostionen ist dabei zur Zeit am Lehrstuhl für Theoretische Physik I in Entwicklung. Sollte sich die Abhängigkeit der spektralen Dichte von längerreichweitigen Prozessen bestätigen, so können diese zur verbesserten Beschreibung der experimentellen Daten durch theoretische Modelle beitragen.

Die dynamische Spinsuszeptibilität $\chi_{ss}(\mathbf{k}, \omega)$ (Abbildung 3.7) der betrachteten Systeme zeigt eine scharfe, niederenergetische Anregung bei $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$, in der fast das gesamte Gewicht gebündelt ist. Über die verbleibenden Impulse verteilt sich ein Band schwach dispergierender Anregungen mit einer maximalen Anregungsenergie von ungefähr t bei $\mathbf{k} = (\pi, 0)$. In früheren Arbeiten des Lehrstuhls wurde bereits gezeigt, daß die Spinanregungen des Hubbard-Modells gut mit der Spinwellentheorie des Heisenberg-Antiferromagneten übereinstimmen [Pre96, Pre97]. Für das *Extended*-Hubbard-Modell sollte nach der in Abschnitt 3.1.1 beschriebenen Näherung für den Grundzustand ein ähnlicher Sachverhalt vorliegen. Es ist dabei zu beachten, daß für das EHM die Austauschwechselwirkung J durch die

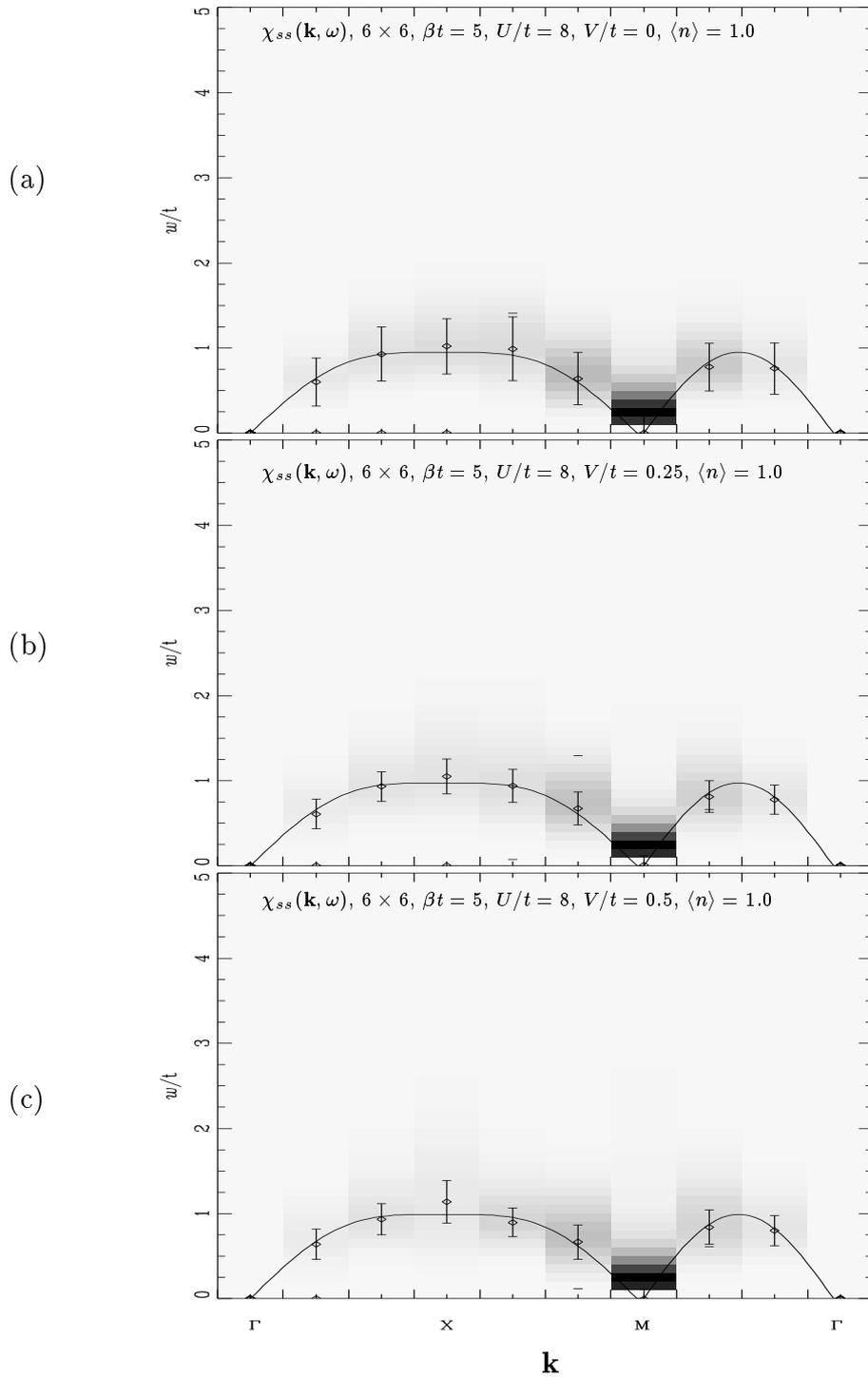


Abbildung 3.7: Spinsuszeptibilität $\chi_{ss}(\mathbf{k}, \omega)$ für ein $6 \times 6 \times 1$ -Gitters bei $\beta t = 5$ mit $U/t = 8, \langle n \rangle = 1.0$. Die Werte für V betragen von oben nach unten $V = 0, 0.25, 0.5$

erweiterte Wechselwirkung renormiert wird (Gleichung (3.11)). Diese Änderung in J ist jedoch für die hier betrachteten Systeme bis $V = U/16$ äußerst gering:

$$\frac{\Delta J}{J} = \frac{U}{U - V} - 1 \approx 7\%. \quad (3.41)$$

Die Spinwellendispersion ist gegeben durch

$$\omega_{sw} = 2J \sqrt{1 - \frac{1}{4}(\cos(q_x) + \cos(q_y))^2} \quad [\text{Pre97}]. \quad (3.42)$$

Mittels dieser Beziehung wurde J an die Spinanregungen für das EHM angefitet (Abb. 3.7). Der Spinwellendispersion ist dabei durch die durchgezogene Linie beschrieben. Die mit einem χ^2 -Fit ermittelten Werte für J sind in Tabelle 3.2 aufgelistet. Wie für das Hubbard-Modell werden auch für das EHM die Spinan-

V/t	0	0.25	0.5
J	0.48 ± 0.01	0.49 ± 0.01	0.50 ± 0.01
χ^2	0.0475	0.124	0.238

Tabelle 3.2: Angefitete Werte für die magnetische Austauschwechselwirkung J aus Gleichung (3.42) an die Spinanregungen $\chi_{ss}(\mathbf{k}, \omega)$ aus Abbildung 3.7. Der Wert für χ^2 ist pro Freiheitsgrad angegeben.

regungen gut durch die Spinwellendispersion beschrieben. Die mit dem χ^2 -Fit ermittelte Austauschwechselwirkung J zeigt einen leichten Anstieg von ca. 5% und entspricht damit in etwa den oben beschriebenen Erwartungen. Interessant ist die gute Übereinstimmung des Wertes von J mit dem in Störungstheorie zweiter Ordnung abgeleiteten $J = 4t^2/(U - V)$. Dieser ist zwar aus Rechnungen der exakten Diagonalisierung für den Grundzustand bestätigt [Ede96], eine Bestimmung aus dem Hubbard-Modell bei endlicher Temperatur mit dem QMC-Verfahren ist jedoch in der Literatur bisher nicht bekannt.

Abbildung 3.8 zeigt die impulsaufgelösten Spin- und Ladungs-Strukturfaktoren für die drei oben diskutierten Systeme. Die Strukturfaktoren entsprechen den in imaginärer Zeit gleichzeitig gemessenen Suszeptibilitäten. Diese Größen indizieren, wie stark Antiferromagnetismus bzw. alternierende Ladungsordnung ausgeprägt sind. Beide Strukturfaktoren zeigen mit zunehmenden Wert für V und β einen Anstieg am M-Punkt $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ (Tabelle 3.3). Für den Spin-Strukturfaktor bewegt sich dieser in der Größenordnung von 4% bei $\beta t = 3$ und 6% bei $\beta t = 5$, so daß die antiferromagnetische Ordnung aus Sicht dieser Größe in dem erwarteten Rahmen entwickelt. Der Ladungs-Strukturfaktor zeigt für bei beide betrachteten Temperaturen einen Anstieg um ca. 12%. Eine Doppelbesetzung in $[1, 1]$ -Richtung der Gittervektoren kann also deutlich leichter eingenommen werden.

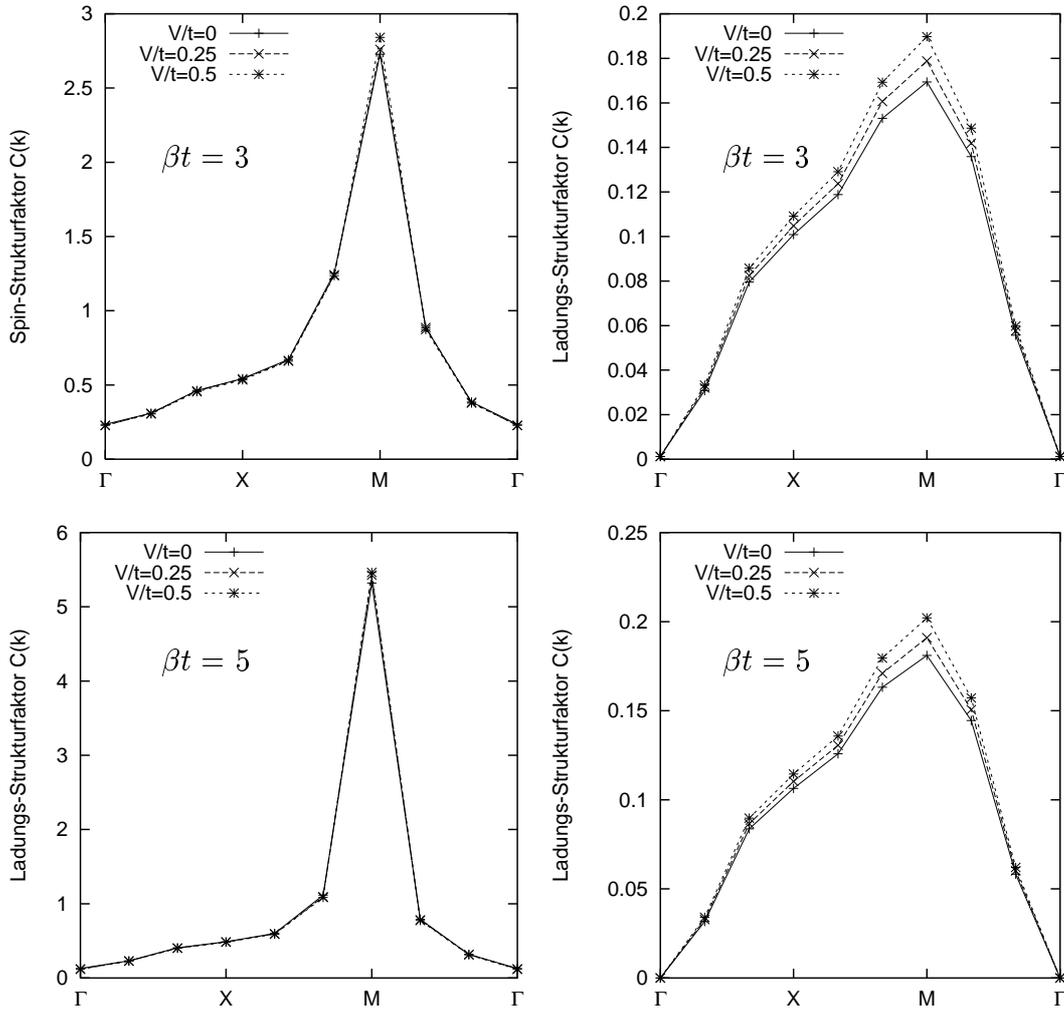


Abbildung 3.8: Gleichzeitiger Spin- und Ladungs-Strukturfaktor des EHM auf einem 6×6 -Gitter mit einer lokalen Wechselwirkung von $U/t = 8$ bei Halbfüllung für $V/t = 0.0, 0.25$ und 0.5 . Sowohl $S(\mathbf{k})$ als auch $C(\mathbf{k})$ zeigen mit zunehmender inverser Temperatur und zunehmender Wechselwirkung V einen Anstieg.

V/t	0	0.25	0.5
$S((\pi, \pi)) \beta t = 3$	2.73 ± 0.02	2.76 ± 0.02	2.84 ± 0.03
$S((\pi, \pi)), \beta t = 5$	5.32 ± 0.05	5.43 ± 0.05	5.46 ± 0.06
$C((\pi, \pi)) \beta t = 3$	0.16940 ± 0.00003	0.17879 ± 0.00005	0.18971 ± 0.00008
$C((\pi, \pi)) \beta t = 5$	0.18106 ± 0.00004	0.19100 ± 0.00005	0.20206 ± 0.00007

Tabelle 3.3: Spin- und Ladungs-Strukturfaktor des EHM bei Halbfüllung am M-Punkt

Abbildung 3.9 zeigt den Vergleich der Spin- und Ladungs-Strukturfaktoren eines 6×6 -Gitters mit denen eines 8×8 -Gitters bei Halbfüllung und Dotierung. Dabei sind nur sehr kleine *Finite Size*-Effekte festzustellen. Die Differenzen zwischen den einzelnen Größen betragen dabei $\Delta S((\pi, \pi)) = 0.091 \pm 0.041$ und $\Delta C((\pi, \pi)) = 0.00026 \pm 0.00008$ für die halbgefüllten und $\Delta S((\pi, \pi)) = 0.00055 \pm 0.01531$ und $\Delta C((\pi, \pi)) = 0.0013 \pm .0003$ für die dotierten Systeme. Für ein wirkliches *Finite Size Scaling* liegen allerdings nicht genügend Systeme unterschiedlicher Größe vor.

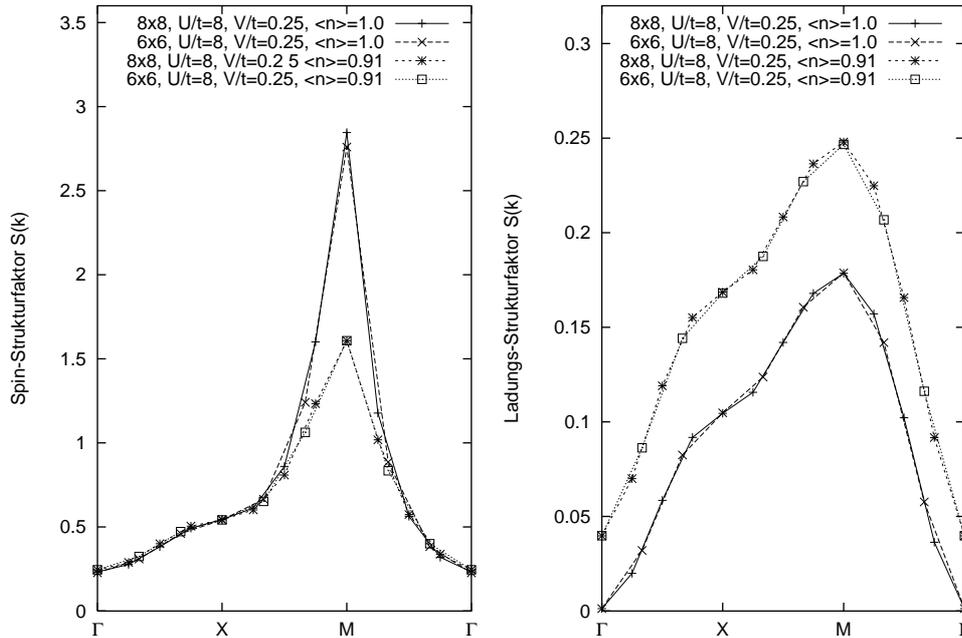


Abbildung 3.9: Vergleich von Spin- und Ladungs-Strukturfaktoren eines 6×6 -Gitters und eines 8×8 -Gitters bei $\beta t = 3$, $U/t = 8$, $V/t = 0.25$. Die Kurven für Systeme unterschiedlicher Größe zeigen nur sehr geringe Abweichungen. Die sogenannten *Finite Size*-Effekte dürften nach den vorliegenden Daten, zumindest für die inverse Temperatur $\beta t = 3$, vernachlässigbar klein sein.

Die dynamische Ladungssuszeptibilität $\chi_{cc}(\mathbf{k}, \omega)$ des Hubbard-Modell ($V/t = 0$) zeigen (Abb. 3.7), wie schon in früheren Arbeiten des Lehrstuhls berichtet [Pre96], eine Energielücke von $\sim U/2$. Das Hauptgewicht liegt auf den M-Punkt. Im Gegensatz zur Spinsuszeptibilität wird bei der Ladungssuszeptibilität $\chi_{cc}(\mathbf{k}, \omega)$ eine leichte Veränderung des Peaks bei $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ zu niedrigeren Energien beobachten. Die Peakpositionen und ihre Fehler sind in Tabelle 3.4 zusammengefasst. Dabei zeigt sich aber, daß im Rahmen der Fehler keine Veränderung festzustellen ist.

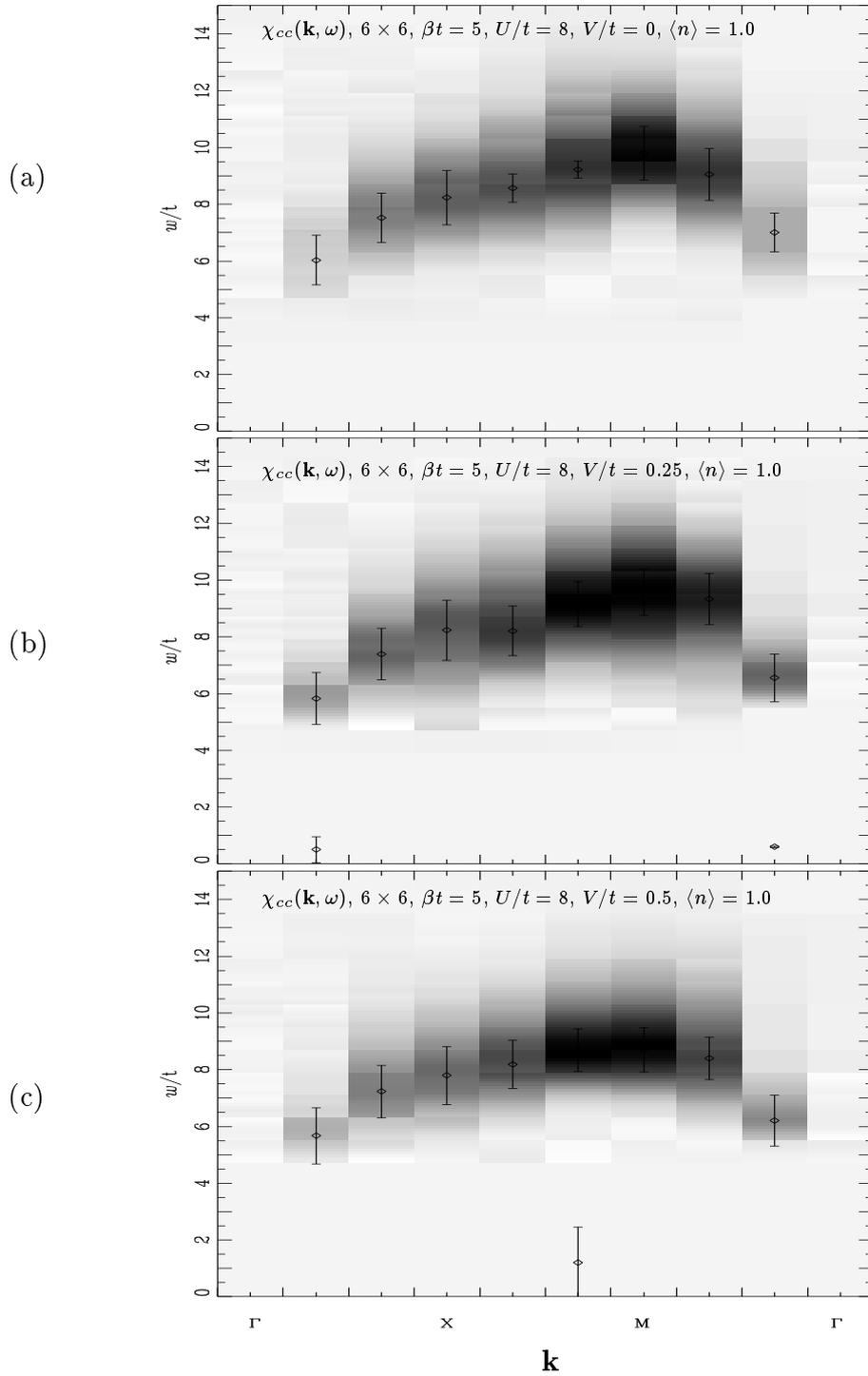


Abbildung 3.10: Ladungssuszeptibilität $\chi_{cc}(\mathbf{k}, \omega)$ für ein $6 \times 6 \times 1$ -Gitters bei $\beta t = 5$ mit $U/t = 8$, $\langle n \rangle = 1.0$. Die Werte für V betragen von oben nach unten $V = 0, 0.25, 0.5$.

V/t	0.0	0.25	0.50
$\chi_{ss}(\mathbf{k} = (\pi, \pi), \omega)$	9.88 ± 0.95	9.54 ± 0.81	8.94 ± 0.78

Tabelle 3.4: Peak-Positionen der Ladungssuszeptibilität $\chi_{cc}(\mathbf{q}, \omega)$ bei $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ für verschiedene V .

3.3.2 Der SDW-CDW-Übergang bei $U/t = 4$

Im vorherigen Abschnitt wurde das *Extended*-Hubbard-Modell für kleine Werte der erweiterten Wechselwirkung V bis $V = U/16$ behandelt. Die Ergebnisse der QMC-Simulation zeigten dabei nur eine geringe Abhängigkeit der spektralen Dichte $A(\mathbf{k}, \omega)$ und der Spin- und Ladungssuszeptibilitäten von V . Wie in den Abschnitten 3.1.1 und 3.1.2 gezeigt, ist neben dem antiferromagnetischen noch ein ladungsgeordneter Zustand im EHM oberhalb eines kritischen Wertes V_c zu erwarten.

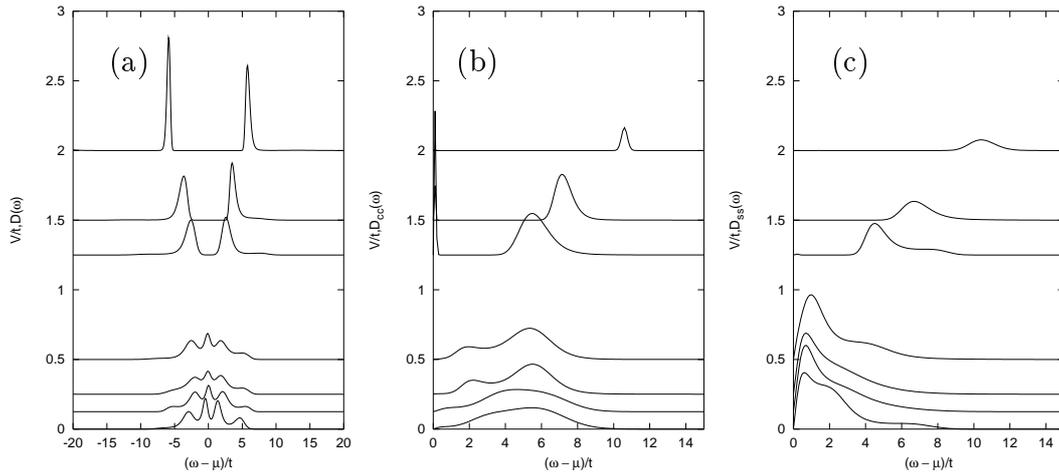


Abbildung 3.11: Zustandsdichten ober- und unterhalb des Übergangs in die CDW-Phase. (a): Einteilchen-Zustandsdichten, (b): Ladungs-Zustandsdichten. (c): Spin-Zustandsdichten.

In diesem Abschnitt soll das *Extended*-Hubbard-Modell auch für $V > V_c$ untersucht werden. Die Eigenschaften des Modells ändern sich dabei in vielfältiger Weise. Um diesen Vorgang nicht noch durch hohe Potentiale und damit mit einem zusätzlichen Vorzeichenproblem zu belasten, wurde für die hier betrachteten Systeme eine lokale Wechselwirkung von $U/t = 4$ gewählt. Die erweiterte Wechselwirkung wurde zunächst von $V/t = 0$ bis $V/t = 0.5$ gesteigert, also bis zur Hälfte des kritischen Wertes im atomaren Grenzfall $V_c = U/4$. Dabei zeigte sich,

V/t	1.25	1.5	2.0
t_{Fit}	1.18 ± 0.01	1.192 ± 0.01	1.20 ± 0.01
Δ_{Fit}	1.99 ± 0.02	3.21 ± 0.01	5.49 ± 0.01
χ_{Fit}^2	0.133	0.067	0.025
$2\Delta_{QMC}(\mathbf{k} = (\pi, 0))$	4.02 ± 0.50	6.43 ± 0.36	10.96 ± 0.32
Δ_{SK}	2.48	3.57	5.69

Tabelle 3.5: Parameter t_{Fit} und Δ_{Fit} des Fits der CDW-Näherung an die spektrale Dichte eines 6×6 -Gitters bei $\beta t = 3$ und $U/t = 4$ für $V/t = 1.25, 1.5, 2.0$.

daß selbst die hier betrachteten, halbgefüllten Systeme unter einem starken Vorzeichenproblem leiden, sobald man in die Nähe von V_c kommt. Für einen Wert von $V/t = 0.5$ lag das Vorzeichen bereits bei 0.60, wobei für jede weitere Erhöhung von V die Simulation mit numerischen Fehlern abgebrochen werden mußte. Simulationen mit $V/t > V_c$ zeigen ein stabiles Vorzeichen, das mit steigendem V gegen 1.0 konvergiert, wie aus Anhang A zu entnehmen ist. Eine Zeitreihenanalyse der Größe $\sum_i (-1)^i n_i$ zeigte, daß sich in der QMC-Simulation das System ständig in einem der beiden äquivalenten CDW-Minima aufhielt und dort fluktuierte.

Abbildung 3.11 (a) zeigt die Einteilchen-Zustandsdichte des *Extended-Hubbard-Modells* in der CDW- und SDW-Phase. Während das EHM für $U/t = 4$ und $\beta t = 3$ auf einem 6×6 -Gitter unterhalb von V_c keine Lücke in der Zustandsdichte aufweist, sind in der CDW-Phase oberhalb von V_c zwei stark separierte Peaks ohne jede weitere Struktur zu sehen. Die Energielücke nimmt mit der erweiterten Wechselwirkung V nahezu linear zu. Interessant ist dabei, daß die Zustandsdichte in der SDW-Phase bis an die Phasengrenze auch bei hohen Werten von V stabil bleibt. Dies ist auch in der Ladungs- und Spin-Zustandsdichte zu beobachten (Abbildung 3.11 (b) und (c)).

Die Entwicklung der Einteilchen-Spektraldichte in Abhängigkeit von V ist in Abbildung 3.12 zu sehen. Dabei zeigt sich deutlich die Ausbildung der Energielücke, die mit steigender Wechselwirkung V stark zunimmt. Die durchgezogene Linie repräsentiert die CDW-Näherung, wobei das Hüpfmatrixelement t und der Gap-Parameter Δ_{CDW} angefitet wurden. Die Ergebnisse des Fits sind in Tabelle 3.5 aufgetragen. Zudem wurden die Energielücke $2\Delta_{QMC}$ direkt aus den QMC-Daten am X-Punkt entnommen. Angefitete und direkt entnommene Werte zeigen eine ausgezeichnete Übereinstimmung. Der nach Gleichung 3.32 selbstkonsistent berechnete Wert Δ_{SK} stimmt im Rahmen der Fehler nicht mit den aus der QMC-Simulation entnommenen Werten überein, wobei die Abweichung mit zunehmendem V deutlich kleiner wird. Die Werte für die direkt aus den QMC-Daten entnommene Energielücke $\Delta_{QMC}(\mathbf{k} = (\pi, 0))$ und der selbstkonsistent berechnete Gap Δ_{SC} sind in Abbildung 3.13 aufgetragen.

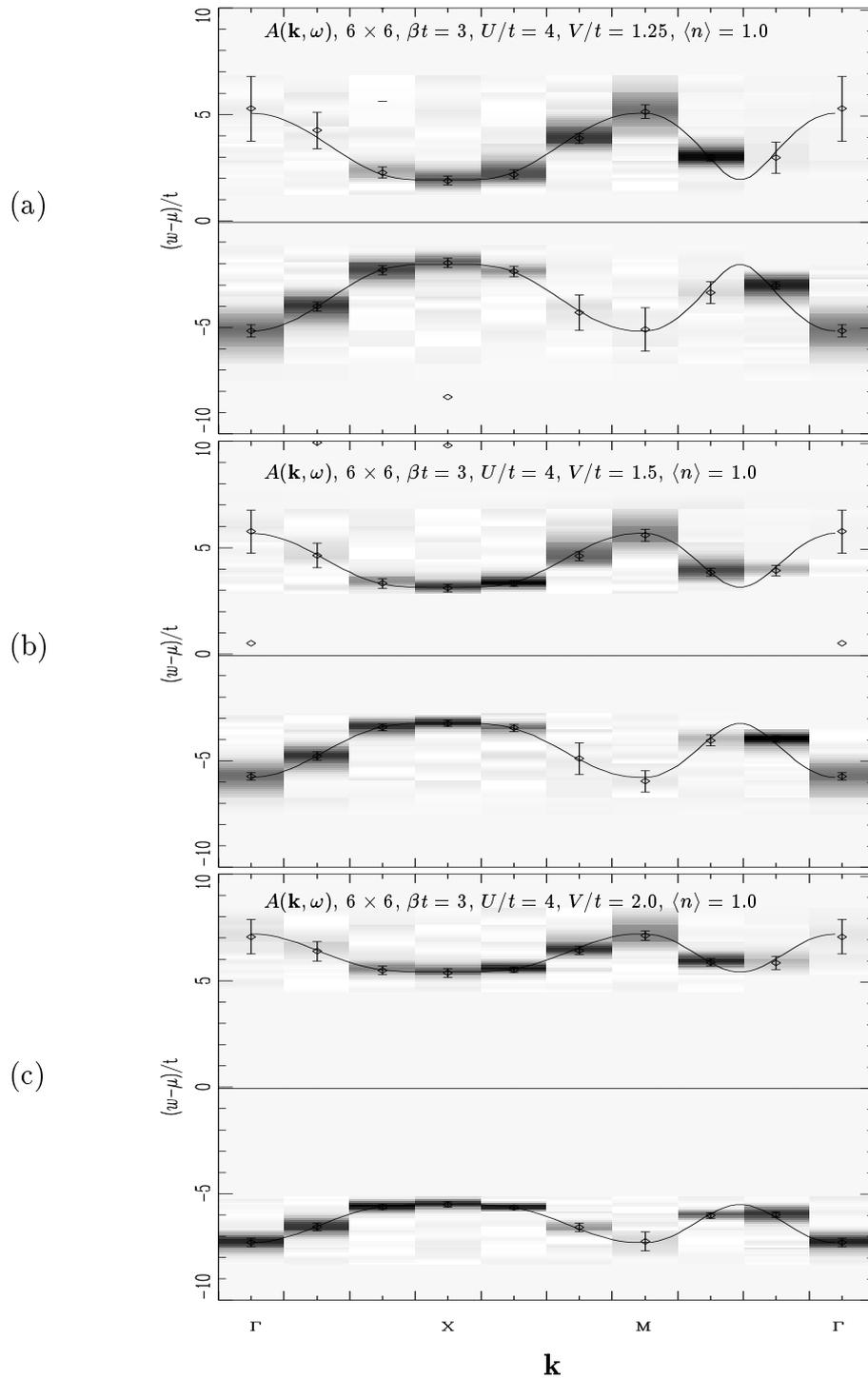


Abbildung 3.12: Einteilchen-Spektraldichte eines 6×6 -Gitters bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 4$, $\langle n \rangle = 1.0$. Die Werte für V betragen von oben nach unten $V = 1.25$ (a), 1.5 (b), 2.0 (c). Die durchgezogene Linie entspricht der quadratisch angefitzten CDW-Näherung (siehe auch Tab. 3.5).

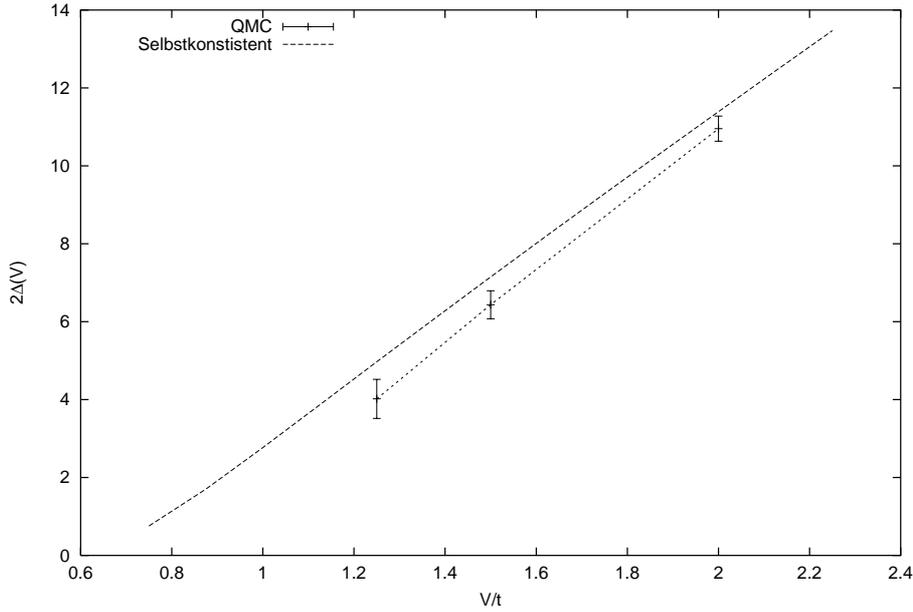


Abbildung 3.13: QMC-Werte und selbstkonsistente Berechnung des CDW-Gaps eines 6×6 -Gitter mit $U/t = 4$ bei $\beta t = 3$ für verschieden Werte von V/t . Die selbstkonsistent errechneten Werte für die Energielücke zeigen, im Gegensatz zum Fall $V < V_c$, eine erheblich bessere Übereinstimmung, was darauf hindeutet, daß in der CDW-Phase Fluktuationen eine untergeordnete Rolle spielen.

Die gute Übereinstimmung der QMC-Daten mit der in CDW-Näherung berechneten spektralen Dichte sowie die geringen Abweichungen der selbstkonsistenten Energielücke legen die Annahme nahe, daß die CDW-Phase des *Extended-Hubbard-Modells* mit der einfachen Molekularfeldnäherung recht gut beschrieben wird. Die in der CDW-Näherung vernachlässigten Fluktuationen müssen also für $V > V_c$, im Gegensatz zum SDW-Ansatz bei $V \ll V_c$, eine untergeordnete Rolle spielen.

Die Spinsuszeptibilität des halbgefüllten EHM in der CDW-Phase (Abbildung 3.14) zeigt ein Band zusammenhängender Peaks der Breite $\sim 2t$. Dieses weist eine ausgeprägte Energielücke auf, die ungefähr der Einteilchen-Energielücke entspricht. Eine niederenergetische Anregung am M-Punkt fehlt hier völlig. Das System zeigt also keine antiferromagnetische Ordnung mehr. Geht man von einem CDW-ladungsgeordneten Zustand aus (Abbildung 3.3 (a)), so muß zur Erzeugung einer Spinanregung eine Doppelbesetzung aufgebrochen und ein Elektron von einem auf das andere Untergitter verschoben werden. Dies ist mit dem Energieaufwand der Größe Δ_{CDW} verbunden. Die starke Unterdrückung des Antiferromagnetismus in der CDW-Phase ist auch in den Spin-Struktur Faktoren $S(\mathbf{k})$ in

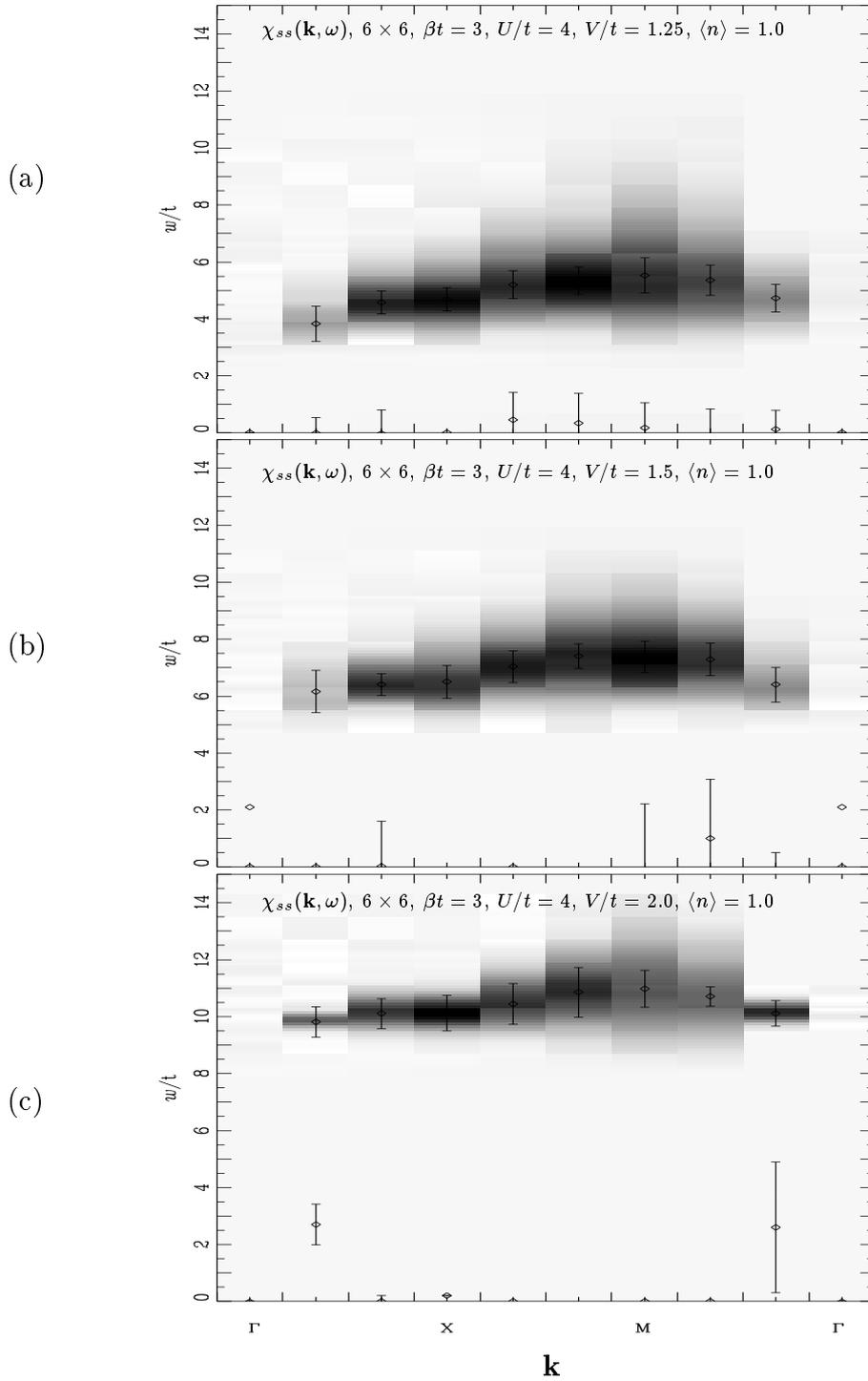


Abbildung 3.14: Spinsuszeptibilität $\chi_{ss}(\mathbf{k}, \omega)$ eines 6×6 -Gitters bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 4$, $\langle n \rangle = 1.0$. Die Werte für V betragen von oben nach unten $V/t = 1.25$, 1.5 , 2.0

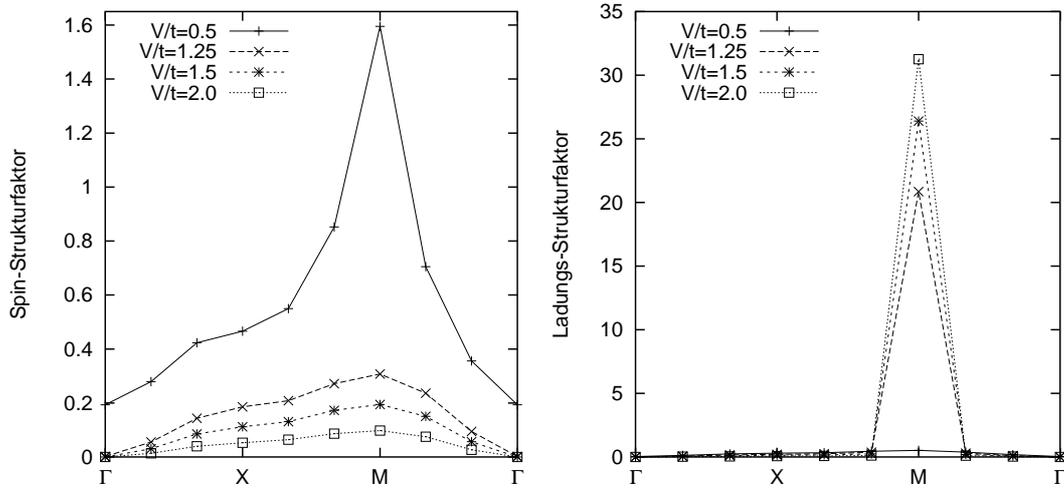


Abbildung 3.15: Gleichzeitiger Spin- und Ladungs-Strukturfaktor des EHM bei Halbfüllung für den Parametersatz $\beta t = 3$, $U/t = 4$. Aus Gründen der Übersicht wurde für $V < V_c$ nur der Wert $V/t = 0.5$ abgebildet.

Abbildung 3.15 deutlich zu sehen. Während das EHM in der SDW-Phase das für die antiferromagnetische Ordnung charakteristische Verhalten mit dem höchsten Wert von $S(\mathbf{k} = (\pi, \pi)) = 1.60$ zeigt, sinkt dieser Wert in der CDW-Phase bis unter 0.1 für $V/t = 2$. Völlig gegenläufiges Verhalten zeigt dabei der Ladungs-Strukturfaktor $C(\mathbf{k})$. Dieser liegt in der SDW-Phase selbst für hohe Werte der erweiterten Wechselwirkung von $V/t = 0.5$ bei höchstens 0.16 ($\mathbf{k} = (\pi, \pi)$), während in der CDW-Phase ein rapides Anwachsen bis auf $C(\mathbf{k} = (\pi, \pi)) = 31.27$ zu beobachten ist. Die Werte für alle sonstigen Impulse \mathbf{k} liegen dabei unterhalb von 1. Die alternierende Ladungsordnung ist also sehr stark ausgeprägt und wird kaum durch Fluktuationsprozesse gestört. Sie entspricht also im Wesentlichen den in der CDW-Näherung gemachten Annahmen. Dies steht in guter Übereinstimmung mit den oben beschriebenen Beobachtungen zur spektralen Dichte.

Abbildung 3.16 zeigt die dynamische Ladungssuszeptibilität $\chi_{cc}(\mathbf{k}, \omega)$ der oben diskutierten Systeme in der CDW-Phase. Die scharf gepeakte, niederenergetische Anregung am M-Punkt ist aller Wahrscheinlichkeit nach ein Artefakt der *Maximum Entropy*-Analyse und entspricht einem Überbleibsel einer Anregung bei $\omega \equiv 0$, die jedoch im Spektrum der retardierten Zweiteilchenfunktionen nicht sichtbar sein sollte. Die anderen Anregungspeaks bilden ein zusammenhängendes Band, daß eine Energielücke von der Größe des Einteilchengaps aufweist. Die Breite des Bandes nimmt dabei von $\sim 2t$ bei $V/t = 1.25$ bis $\sim 1t$ bei $V/t = 2.0$ ab.

Um die Entwicklung der Spin- und Ladungs-Eigenschaften über den SDW-CDW-

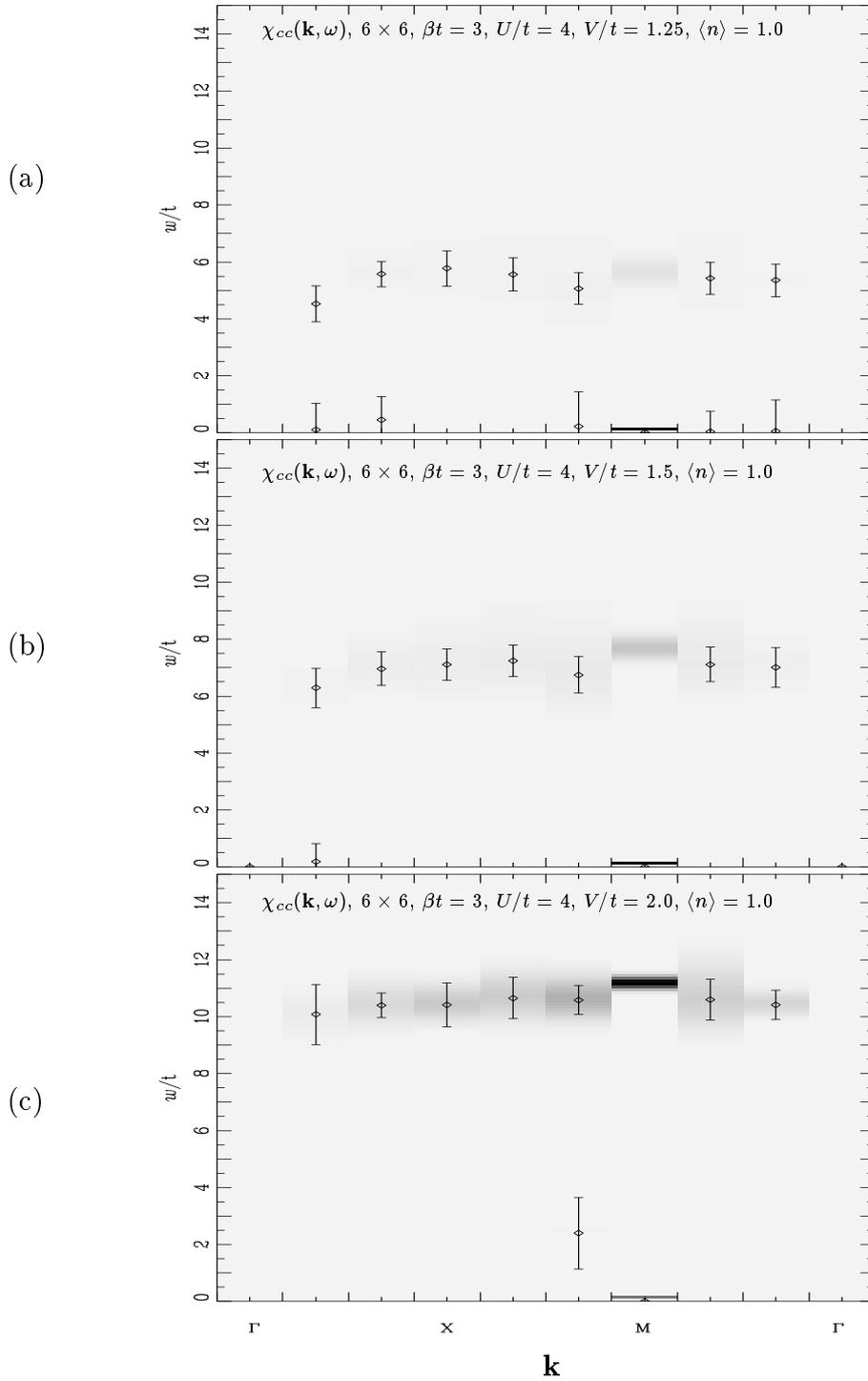


Abbildung 3.16: Ladungssuszeptibilität $\chi_{cc}(\mathbf{k}, \omega)$ eines 6×6 -Gitters bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 4$, $\langle n \rangle = 1.0$. Die Werte für V betragen von oben nach unten $V = 1.25$, 1.5 , 2.0

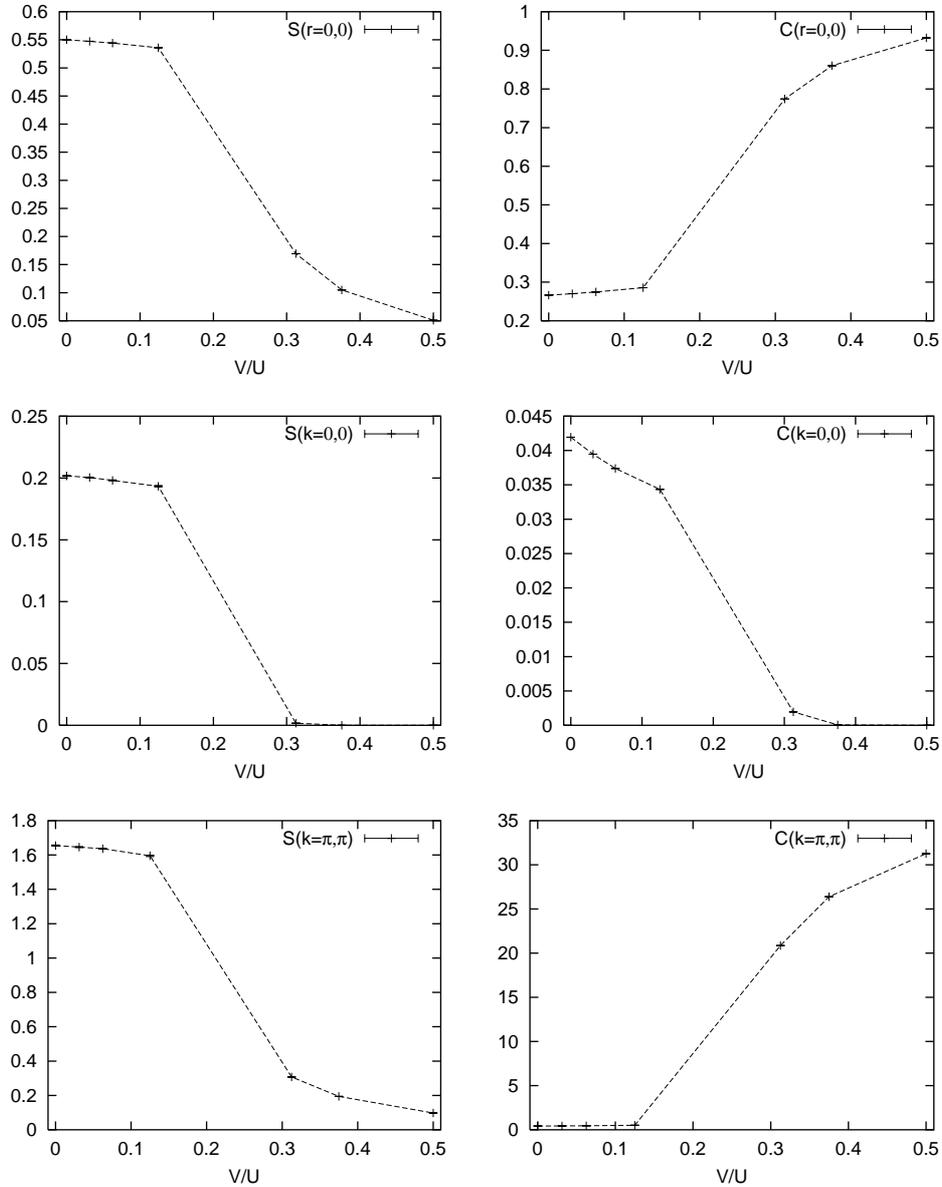


Abbildung 3.17: Gleichzeitiger Spin- und Ladungs-Struktur-faktoren an den Punkten $\mathbf{r} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (0, 0)$ und $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ oberhalb und unterhalb des SDW-CDW-Phasenüberganges. Die Systemparameter sind analog zu den vorhergehend besprochenen Simulationen (6×6 , $U/t = 4$, $\beta t = 3$).

Phasenübergang noch einmal deutlich zu machen, sind in Abbildung 3.17 die Spin- und Ladungs-Strukturfaktoren an ausgesuchten Punkten als Funktion der Größe V/U aufgetragen. Interessant ist vor allem, daß alle betrachteten Größen im Bereich $V/U < 0.25$ ein nahezu konstantes Verhalten zeigen, während für höhere Werte von V/U eine sprunghafte Änderung zu sehen ist. Die antiferromagnetisch geordnete SDW-Phase zeigt also eine ausgeprägte Stabilität gegen den Einfluß einer Coulomb-Wechselwirkung zwischen direkten Nachbarn. Dies steht in Übereinstimmung mit Untersuchungen des eindimensionalen *Extended-Hubbard-Modells* [Ede96] mit der Methode der exakten Diagonalisierung.

3.3.3 Attraktive Wechselwirkung zwischen direkten Nachbarn

Der in den vorhergehenden Abschnitten beobachtete Einfluß der repulsiven erweiterten Wechselwirkung auf die Eigenschaften des Hubbard-Modells legt eine Überprüfung dieser Veränderungen im Bereich attraktiver Wechselwirkung nahe. Die Simulation eines solchen EHM dient dem Zweck, die generelle Bedeutung der Coulomb-Wechselwirkung im EHM zu zeigen.

Abbildung 3.18 (a) zeigt die spektrale Dichte des halbgefüllten *Extended-Hubbard-Modells* auf einem 6×6 -Gitter mit $\beta t = 3$, $U/t = 8$ und $V/t = -0.5$. Wie auch für die in den vorhergehenden Kapiteln betrachtete repulsive Wechselwirkung zwischen direkten Nachbarn zeigt sich die spektrale Dichte in den Hauptmerkmalen stabil gegen V . Veränderungen treten auf kleiner Skala und am Rande der Auflösbarkeit auf. Wie schon in Abschnitt 3.3.1 soll die spektrale Dichte am Γ -Punkt eingehender untersucht werden. Abbildung 3.19 zeigt die spektrale Dichte $A(\mathbf{k} = (0, 0), \omega)$ unterhalb der Energie $\omega = \mu$ für repulsive ($V/t=0.5$), verschwindende ($V/t=0$) und attraktive ($V/t=-0.5$) erweiterte Wechselwirkung. Die in Abbildung 3.5 für repulsives V beobachtete Verschiebung des Peaks nahe des Fermi-Niveaus $\omega = \mu$ setzt sich dabei im Bereich anziehender Wechselwirkung deutlich fort.

Auch die dynamische Ladungs- und Spinsuszeptibilität (Abbildung 3.18 (b) und (c)) zeigen sich in den Hauptmerkmalen stabil gegen eine attraktive erweiterte Wechselwirkung. Die Spinsuszeptibilität $\chi_{ss}(\mathbf{k}, \omega)$ weist die für antiferromagnetische Ordnung typische Spinwellendispersion des Heisenberg-Antiferromagneten auf (Vergleiche Abbildung 3.7). Der Spin-Strukturfaktor $S(\mathbf{k})$ (Abbildung 3.20) ist am M-Punkt im Vergleich zum Hubbard-Modell ($V/t = 0$) leicht vermindert. Die Werte für $S(\mathbf{k} = (\pi, \pi))$ sind 2.73 ± 0.02 für $V/t = 0$ und 2.66 ± 0.02 für $V/t = -0.5$. Der dominante Peak an diesem Punkt belegt jedoch die antiferromagnetische Ordnung. Etwas stärker als für $S(\mathbf{k})$ sind die Veränderungen im Ladungs-Strukturfaktor $C(\mathbf{k})$. Die Wert am repräsentativen M-Punkt betragen

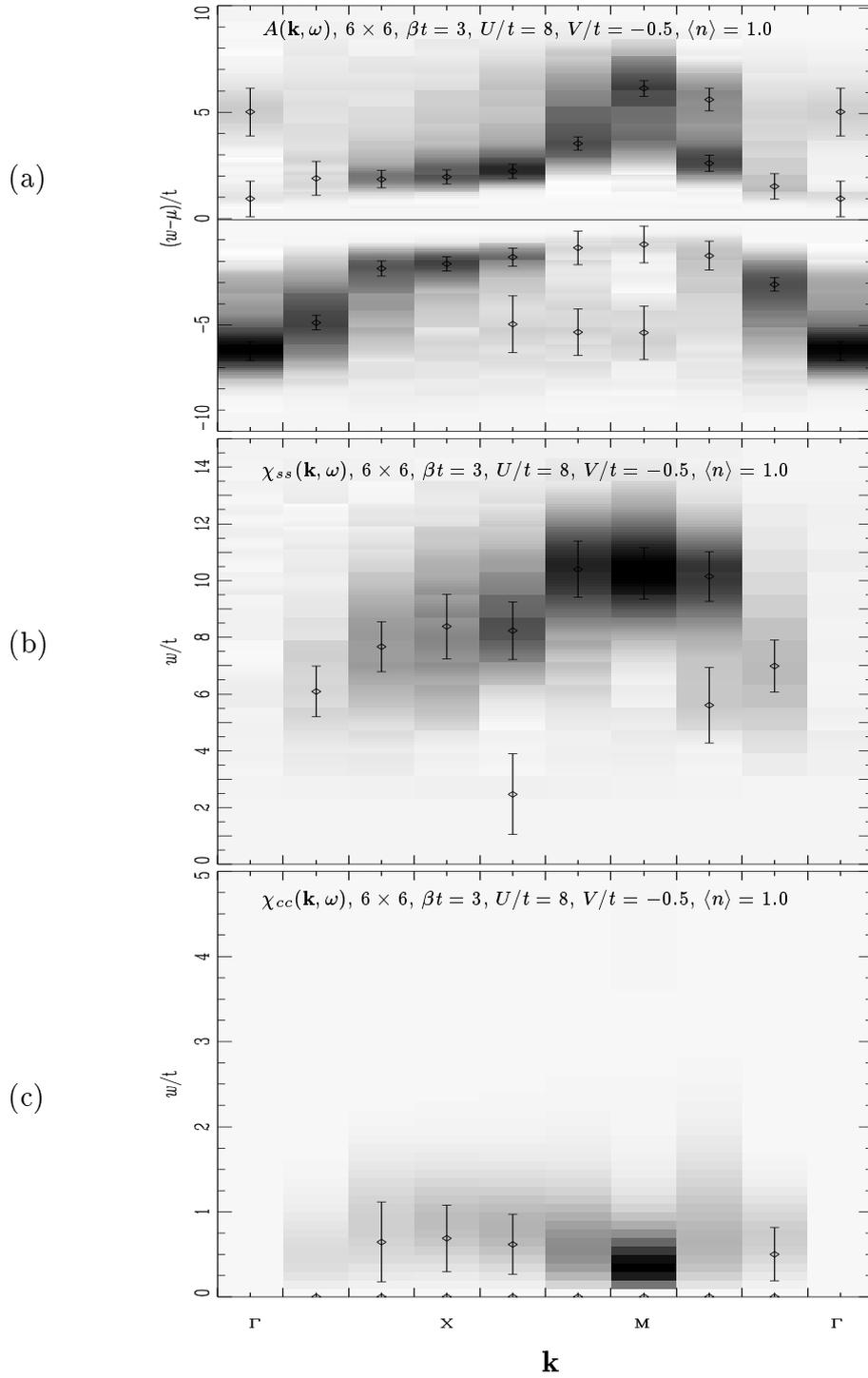


Abbildung 3.18: Spektrale Dichte, Spin- und Ladungssuszeptibilität eines 6×6 -Gitter bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 8$, $V/t = -0.5$ mit $\langle n \rangle = 1.0$.

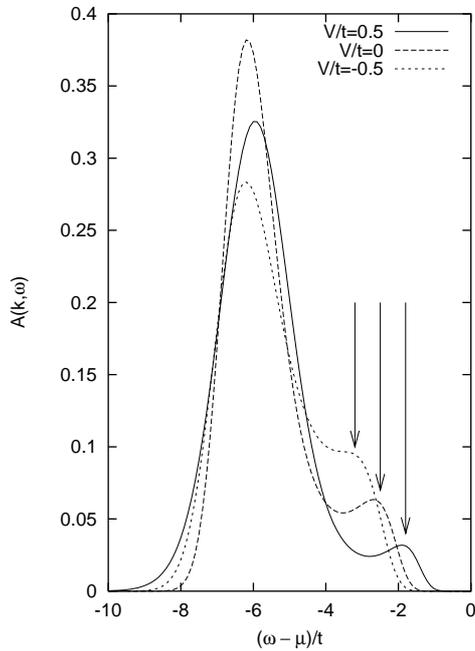


Abbildung 3.19: Vergleich der spektralen Dichte $A(\mathbf{k} = (0, 0), \omega)$ des halbgefüllten *Extended-Hubbard-Modells* für repulsive und attraktive erweiterte Wechselwirkung bei einer lokalen Wechselwirkung von $U/t = 8$ und einer inversen Temperatur von $\beta t = 3$. Die für repulsives V beobachtete Verschiebung des Peaks nahe $\omega = \mu$ setzt sich in den Bereich attraktiver Wechselwirkung fort.

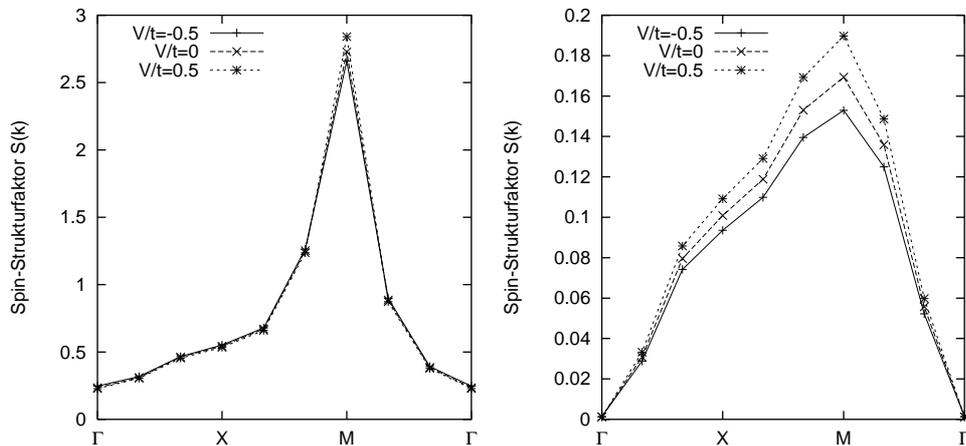


Abbildung 3.20: Vergleich des impulsaufgelösten Spin- und Ladungsstrukturfaktors für repulsive und attraktive erweiterte Wechselwirkung.

0.16940 ± 0.00003 für $V/t = 0$ und 0.15294 ± 0.00005 für $V/t = -0.5$. Beide Strukturfaktoren zeigen für $V < 0$ die bereits im Bereich der repulsiven erweiterten Wechselwirkung gefundenen Tendenzen.

Kapitel 4

Das dotierte *Extended-Hubbard-Modell*

Der dotierte Bereich ist für die Beschreibung der Kuprate von besonderem Interesse, da hier für ausreichend tiefe Temperaturen die Supraleitung einsetzt (siehe Kapitel 1, Abschnitt (1.2)). Oberhalb der kritischen Temperatur wird experimentell mit der Dotierung ein Metall-Isolator-Übergang beobachtet. Dabei werden Kupferoxid-Ebenen Ladungsträger entnommen (Lochdotierung) oder zugeführt (Elektronendotierung). Im Experiment wird dies z. B. durch heterovalente Substitution oder Änderung des Gesamtsauerstoffgehaltes erreicht, während in der QMC-Simulation das chemische Potential μ auf einen geeigneten Wert gesetzt wird.

Es sollen im folgenden Dotierungen von 9-10% bei verschiedenen Werten der erweiterten Wechselwirkung V betrachtet werden. Da die Simulation von dotierten Systemen mit einem starken Vorzeichenproblem belastet ist, waren dabei nur Temperaturen von $T = 0.33$ bzw. $\beta t = 3$ möglich.

4.1 Das dotierte EHM in der SDW-Phase

Für den Bereich schwacher Coulombwechselwirkung wurden zwei Systeme mit einer Dotierung von etwa 10% simuliert. Dabei gelang die Einstellung der mittleren Teilchenzahl nicht so genau, daß exakt die gleiche Dotierung erreicht werden konnte. Die Simulationen weisen zudem ein mit der Stärke der Wechselwirkung V zunehmendes Vorzeichenproblem auf. So beträgt das mittlere Vorzeichen der Simulation eines 6×6 -Gitters mit $U/t = 8$ und $V/t = 0.25$ bei $\beta t = 3$ nur 0.35. Für $V/t = 0.5$ reduziert es sich gar auf 0.17. Die daraus resultierende schlechte Konvergenz mußte mit erhöhtem Rechenaufwand ausgeglichen werden.

Die Zustandsdichte des *Extended*-Hubbard-Modells für verschiedene V ist in Abbildung 4.1 aufgetragen. Es zeigt sich ein scharfer Peak um $(\omega - \mu)/t = 0$ für alle betrachteten Stärken der Wechselwirkung V . Abbildung 4.2 zeigt die spek-

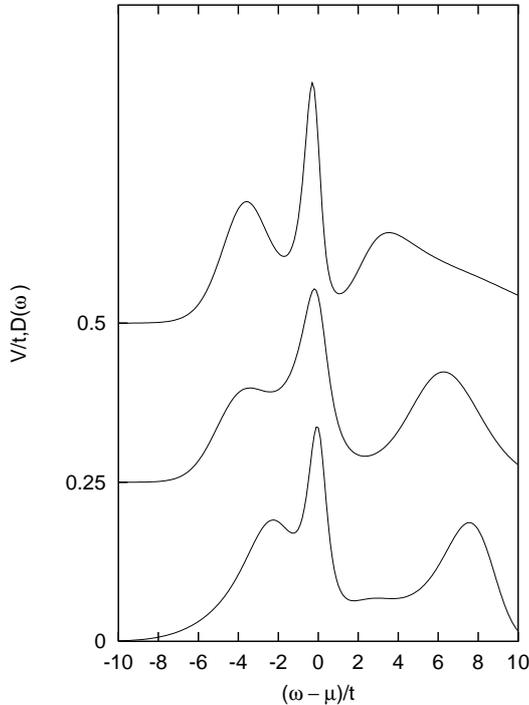


Abbildung 4.1: Zustandsdichte eines 6×6 -Gitters, $\beta t = 3$ und $U/t = 8$. Bei $(\omega - \mu)/t = 0$ zeigt sich bei allen Systemen ein ausgeprägter Peak.

trale Dichte des *Extended*-Hubbard-Modells für erweiterte Wechselwirkung V/t von 0, 0.25 und 0.5. Für jeden dieser Werte zeigt sich ein schmales, kohärentes Band um den Wert $(\omega - \mu)/t = 0$ der Breite $\sim 2t$. Dies ist qualitativ konform mit den experimentellen Daten, die ein solches Band mit der Breite $1eV$ für den normalleitenden Zustand beschreiben [She95]. Weiterhin ist für alle Systeme ein breiter, inkohärenter Hintergrund zu sehen. Wie schon bei Halbfüllung ist der niederenergetische Peak, den das Hubbard-Modell $V/t = 0$ für negative Energien am Γ -Punkt $\mathbf{k} = (0, 0)$ aufweist, für $V/t = 0.25$ nicht aufzulösen. Dies ist unter den schlechten Simulationsbedingungen (Vorzeichen-Problem!) leicht denkbar.

In einer kürzlich veröffentlichten Arbeit [Pre97] wurde eine gute Übereinstimmung der mit dem Quanten-Monte-Carlo-Verfahren berechneten spektralen Dichte mit den Daten der winkelaufgelösten Photoemissions-Spektroskopie [Mar96] festgestellt. Für schwache Dotierungen von etwa 7% bei $\beta t = 4$ wird dabei im Einklang mit den experimentellen Daten am X-Punkt eine flache Struktur in einer Entfernung von etwa J unterhalb des Fermi-Niveaus beobachtet, die dieses von $X \rightarrow \Gamma$ nicht durchstößt. Das Band knickt dabei zu negativen Energien hin ab. Für nahezu optimale Dotierungen wird das Fermi-Niveau von $\Gamma \rightarrow M$ und von $M \rightarrow X$ durchstoßen.

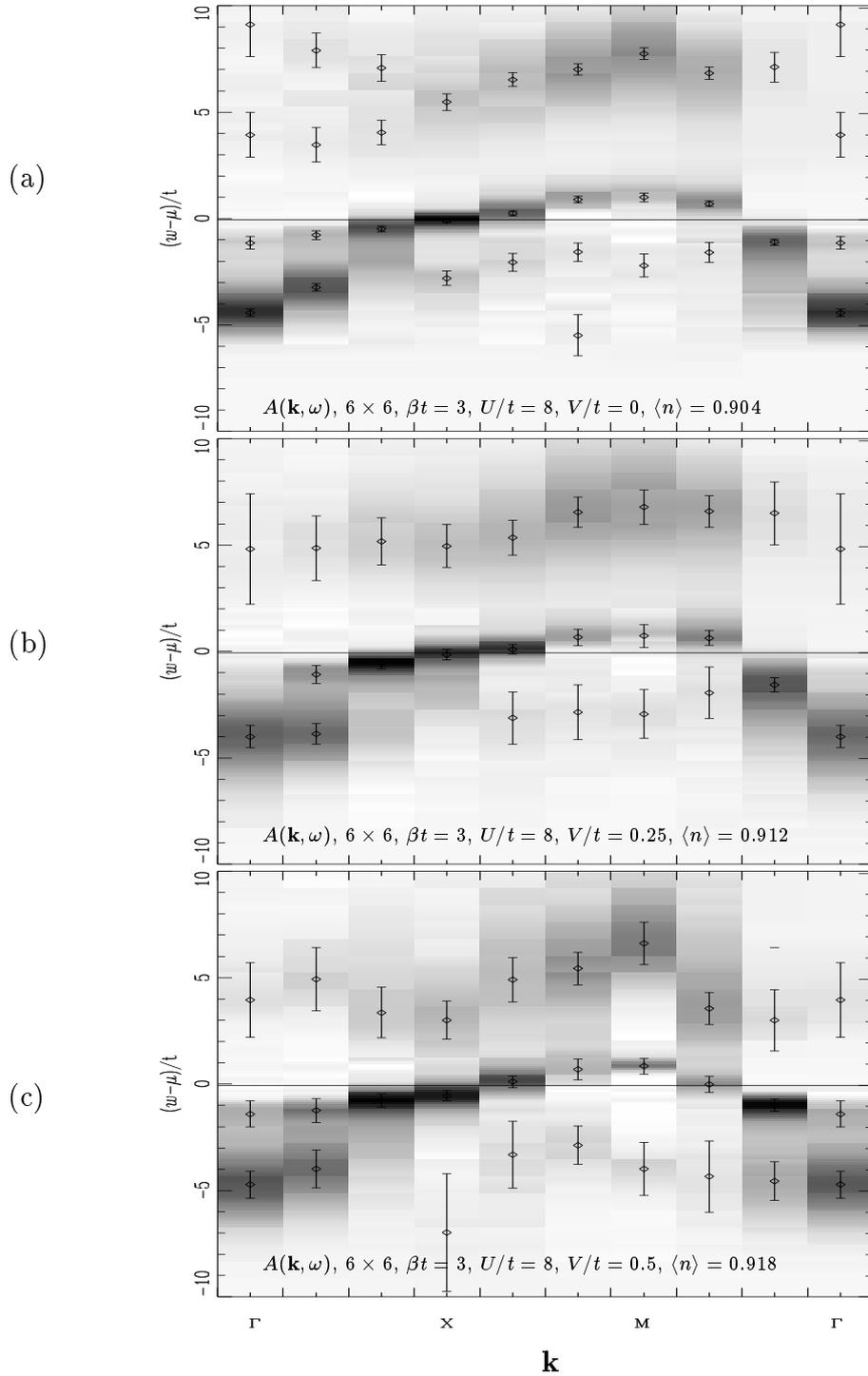


Abbildung 4.2: Spektrale Dichte $A(\mathbf{k}, \omega)$ für ein 6×6 -Gitter bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 8$ $V/t = 0.0, 0.25, 0.5$ von oben nach unten, $\langle n \rangle \approx 0.91$

Das *Extended*-Hubbard-Modell soll nun darauf hin überprüft werden, ob zumindest eine qualitative Übereinstimmung mit den experimentellen Daten bei Dotierung gefunden werden kann. Abbildung 4.3 zeigt den Vergleich der experimentellen Bandstruktur mit dem in der QMC-Simulation für $V/t = 0.5$ berechneten Spektrum. Dargestellt sind die Maxima des spektralen Gewichtes für die kohärente Struktur nahe des Fermi-Niveaus. Qualitativ ist dabei eine Übereinstimmung mit den experimentellen Daten für schwache Dotierung (obere Linie) festzustellen. Im Experiment wie auch in der QMC-Simulation wird das Fermi-Niveau etwa bei $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ und in der Nähe des X-Punktes $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ durchstoßen. Die flache Struktur am X-Punkt ist aufgrund der in der Simulation vorliegenden begrenzten Impulsaufösung auf einem 6×6 -Gitter nicht vollständig wiedergegeben. In Übereinstimmung mit [Pre97] liegt das Maximum des spektralen Gewichtes an diesem Punkt jedoch bei $\sim J$ unterhalb des Fermi-Niveaus.

Qualitativ zeigen sich keine Unterschiede in der spektralen Dichte für verschiedene Werte der erweiterten Wechselwirkung. Wie schon bei den Halbfüllungseigenschaften dieser Systeme diskutiert, ist die relevante Energieskala bei den vorliegenden Systemparametern wahrscheinlich zu groß, um eine Änderung der Größenordnung $V = U/16$ aufzulösen. Für stärkere V tendiert das *Extended*-Hubbard-Modell jedoch schon zu der in Abschnitt (3.3.2) beschriebenen CDW-Phase. Diese Nähe des Phasenüberganges trägt schon bei Halbfüllung zu einer Verstärkung des Vorzeichenproblems bei, so daß eine Untersuchung des EHM für tiefere Temperaturen und/oder größere V enorm erschwert wird.

Abbildung 4.4 zeigt die Spinsuszeptibilität des EHM für die diskutierten Wechselwirkungen. Im Gegensatz zu den bei der inversen Temperatur $\beta t = 5$ diskutierten, halbgefüllten Systemen läßt sich die Spinwellendispersion bei $\beta t = 3$ und einer Dotierung von 10% nicht mehr eindeutig beobachten. Die starke Konzentration des Gewichtes auf eine niederenergetische Anregung am M-Punkt ($\mathbf{k} = (\pi, \pi)$) ist jedoch ein Indiz für die antiferromagnetische Spinordnung in diesen Systemen, die qualitativ also erhalten bleibt. Dies wird auch durch die Spin-Strukturfaktoren gestützt, die in Abbildung 4.5 dargestellt sind. Die Werte für $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ sind mit Fehlern gesondert in Tabelle 4.1 aufgelistet. Wie schon bei den halbgefüllten Systemen ist eine Zunahme mit steigendem V außerhalb der Fehler zu beobachten. Sie beträgt ca. 8%. Im Vergleich mit den halbgefüllten Systemen verliert der Spin-Strukturfaktor am M-Punkt allerdings stark an Gewicht. Im Zusammenhang mit der dynamischen Spinsuszeptibilität verliert also die antiferromagnetische Ordnung bei Dotierung deutlich an Stärke (siehe z. B. auch Abb. 3.9).

Die Ladungsanregungen des *Extended*-Hubbard-Modells zeigen ein breites Anregungsspektrum mit einer maximalen Energie am M-Punkt $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$. Die im Falle der Halbfüllung festgestellte Energielücke ist nicht mehr zu beobachten. Dies entspricht den Aussagen, die in Referenz [Pre96] getroffen werden. Allerdings nimmt die Breite des Spektrums mit steigender erweiterter Wechselwirkung V et-

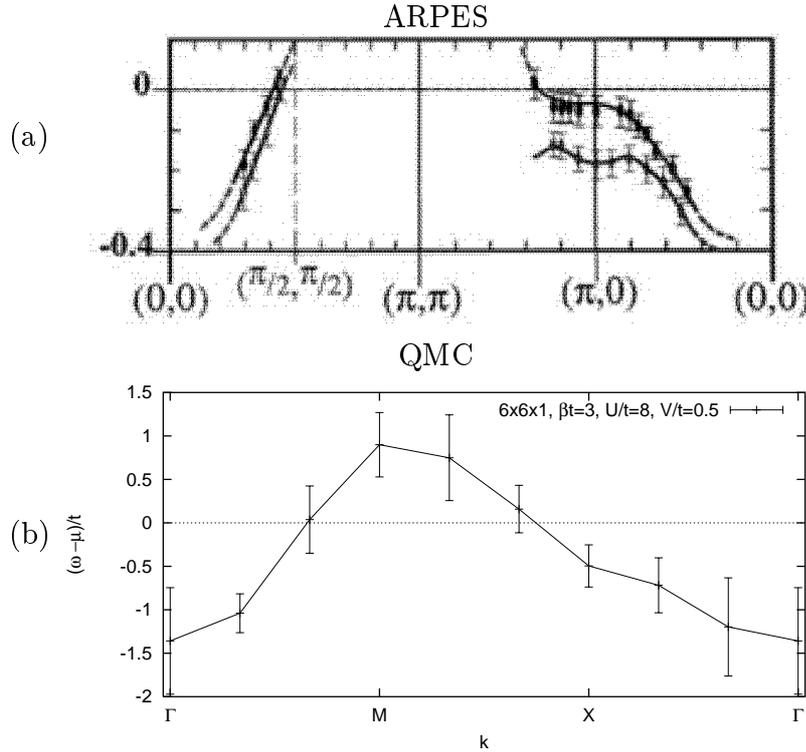


Abbildung 4.3: Vergleich der spektralen Dichte der QMC-Simulation des EHM mit den Daten der winkelaufgelösten Photoemissions-Spektroskopie (ARPES) [Mar96]. Die obere Kurve in (a) zeigt die Photoemissionsdaten bei maximaler Dotierung. Diese stimmen zumindest qualitativ mit den Ergebnissen der Simulation des EHM (b) bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 8$, $V/t = 0.5$ und einer Dotierung von etwa 9% überein.

was ab. Im Rahmen der Fehler ist dieser Effekt jedoch nicht eindeutig.

Abbildung 4.7 zeigt den Ordnungsparameter der $d_{x^2-y^2}$ -Supraleitung $\langle \Delta \Delta^\dagger \rangle$ gemessen in gleichzeitiger imaginärer Zeit und aufgetragen über die Dotierung für verschiedene V . Die Messung entspricht dabei einer Mittelung über alle Abstände, kann also die Entwicklung der sogenannten *Off diagonal long range order* nur in der *Finite size*-Entwicklung zeigen. Dennoch können Tendenzen in den Paarbildungsprozessen auch bei konstanter Gittergröße verdeutlicht werden. Mit zunehmendem repulsivem V zeigt sich danach eine Unterdrückung von Paarbildungsprozessen während eine attraktive Wechselwirkung zwischen direkten Nachbarn diese verstärkt. Die in Abbildung 4.7 eingezeichneten Linien dienen der Kennzeichnung zusammengehöriger Punkte und sollen keinen funktionalen Zusammenhang beschreiben.

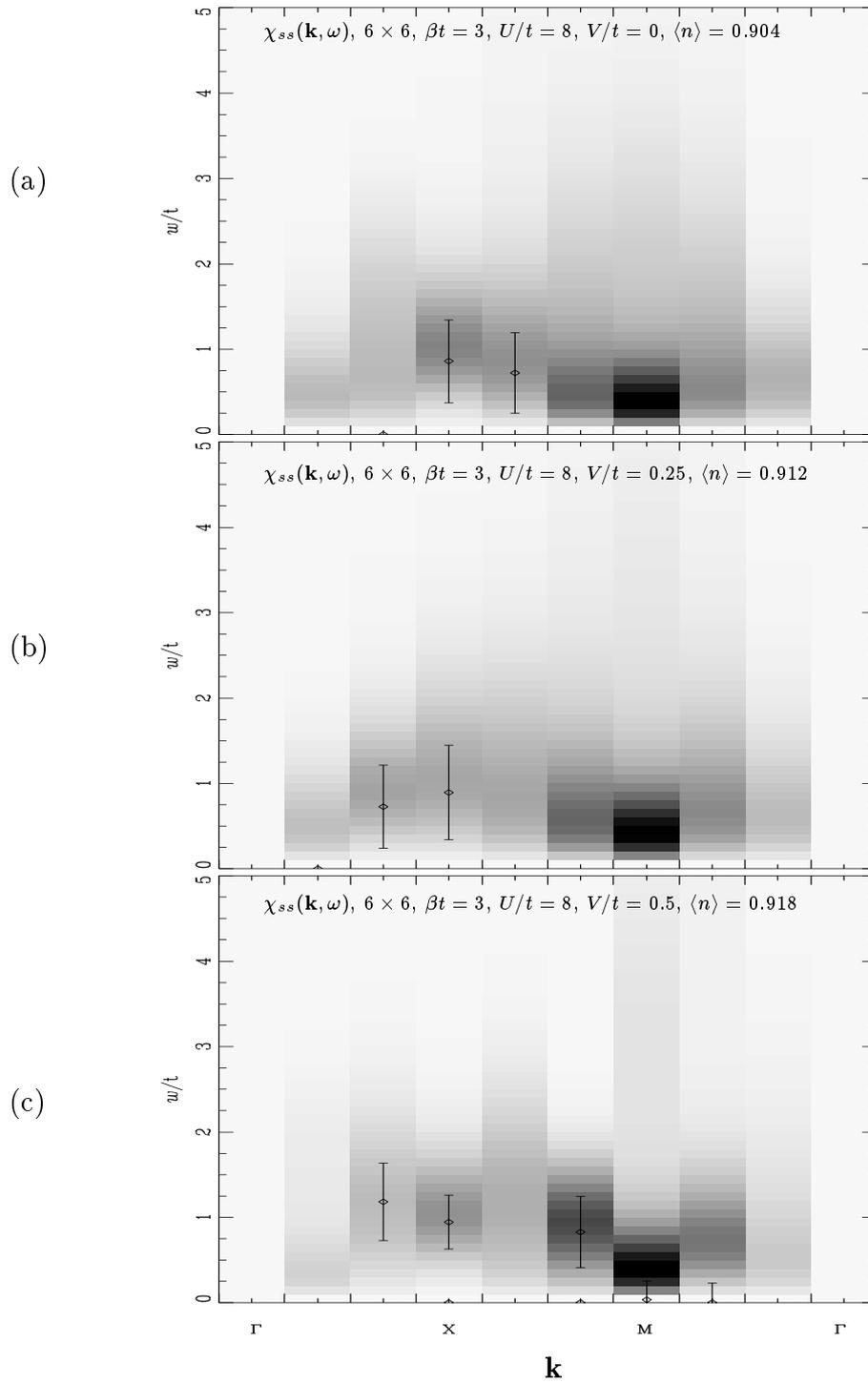


Abbildung 4.4: Spinsuszeptibilität $\chi_{ss}(\mathbf{k}, \omega)$ für ein 6×6 -Gitter bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 8$ $V/t = 0.0, 0.25, 0.5$ von oben nach unten, $\langle n \rangle \approx 0.91$

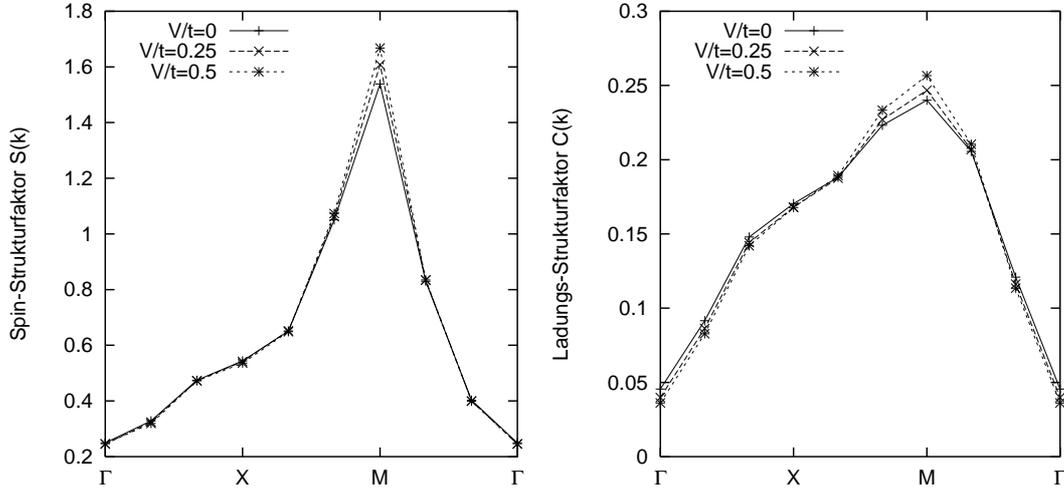


Abbildung 4.5: Gleichzeitiger Spin- und Ladungs-Strukturfaktor des EHM bei einer Dotierung von ca. 9%. Während $S(\mathbf{k})$ gegenüber dem halbgefüllten System deutlich reduziert ist, zeigt $C(\mathbf{k})$ ein mit der Dotierung ansteigendes Verhalten (siehe auch Abb. 3.8).

V/t	0.0	0.25	0.5
$S(\mathbf{k} = (\pi, \pi))$	1.54 ± 0.01	1.61 ± 0.01	1.67 ± 0.01
$C(\mathbf{k} = (\pi, \pi))$	0.24010 ± 0.00008	0.24673 ± 0.00013	0.25668 ± 0.00030

Tabelle 4.1: Gleichzeitiger Spin- und Ladungs-Strukturfaktor des EHM bei einer Dotierung von ca. 9 % am M -Punkt.

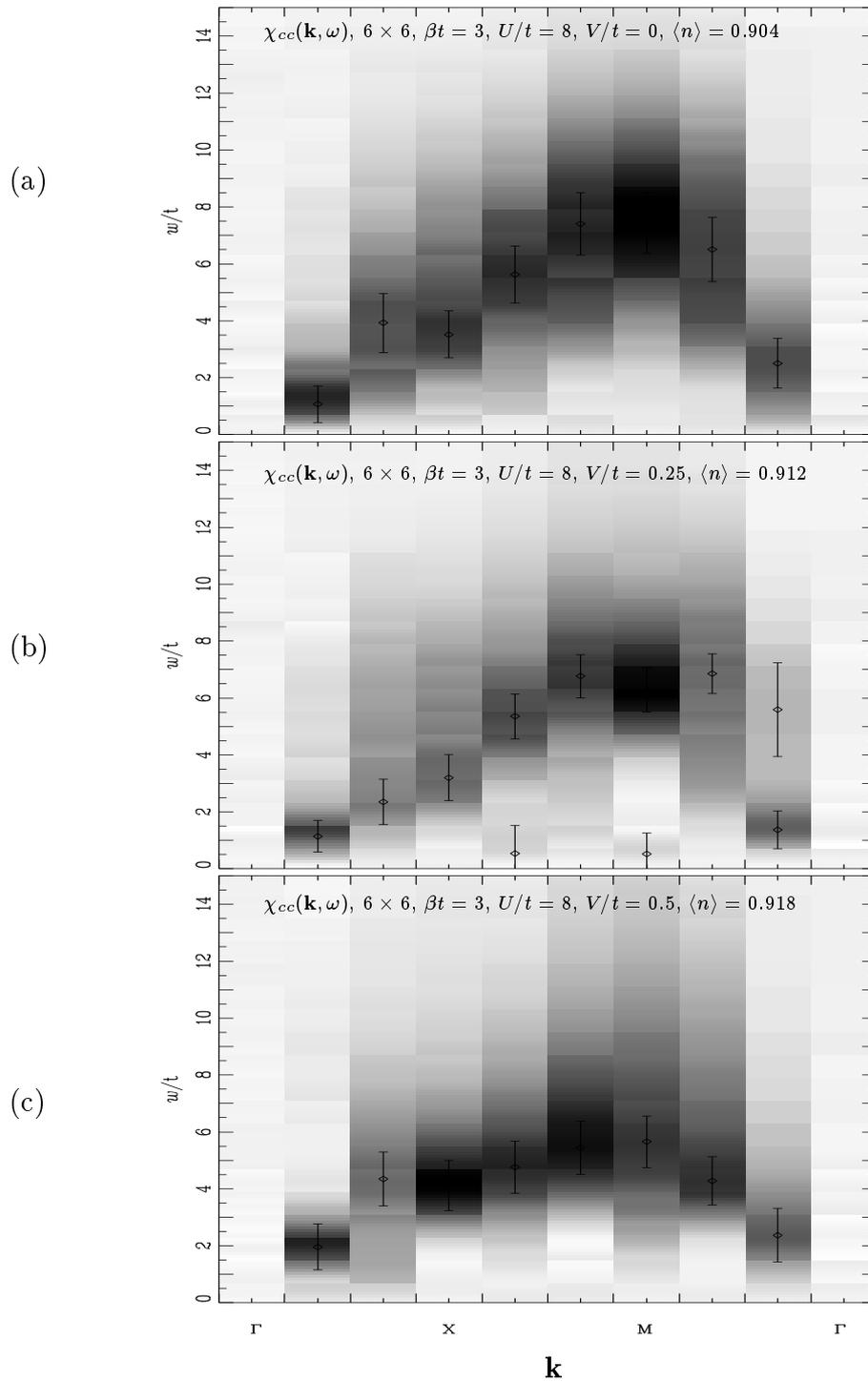


Abbildung 4.6: Ladungssuszeptibilität $\chi_{cc}(\mathbf{k}, \omega)$ für ein 6×6 -Gitter bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 8$ $V/t = 0.0, 0.25, 0.5$ von oben nach unten, $\langle n \rangle \approx 0.91$

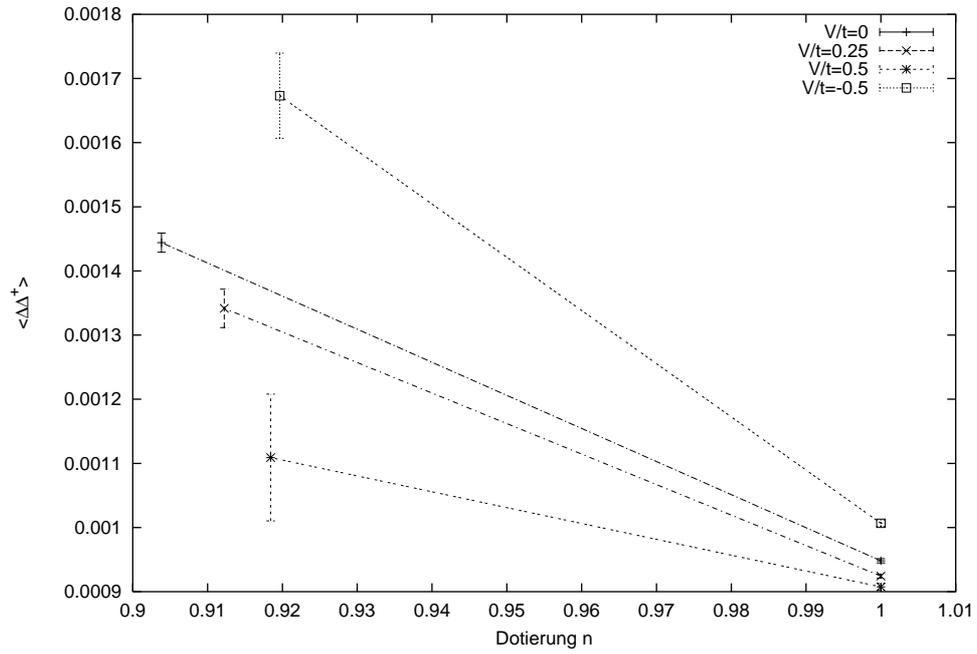


Abbildung 4.7: Ordnungsparameter der $d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Supraleitung $\langle \Delta \Delta^\dagger \rangle$ gemessen in gleichzeitiger imaginärer Zeit. Diese Größe entspricht einer Mittelung über alle Abstände. Die Linien dienen zur Kennzeichnung zusammengehöriger Punkte und stellen keinen funktionalen Zusammenhang dar.

4.2 Das dotierte EHM in der CDW-Phase

In Abschnitt (3.3.2) wurde das halbgefüllte *Extended*-Hubbard-Modell in der CDW-Phase beschrieben. Im Gegensatz zu den Systemen mit geringer erweiterter Wechselwirkung $V \sim J$ zeigte sich dabei ein wenig von Fluktuationen beeinflusster Isolator. Ebenso wie für den SDW-CDW-Phasenübergang im Zweidimensionalen System ist eine Untersuchung des dotierten EHM in der CDW-Phase mit QMC-Methoden in der Literatur bisher nicht bekannt. Daher wurde für das Halbgefüllte System (c) aus Abbildung 3.12 ($\beta t = 3$, $U/t = 4$, $V/t = 2$) eine Simulation mit einer Dotierung von 10% durchgeführt. Interessant ist dabei vor allem, ob die Dotierung des Systems zu einer Verminderung der stark ausgeprägten alternierenden Ladungsordnung und damit zu einer Zunahme von Fluktuationen führt. In Abschnitt 3.3.2 konnte gezeigt werden, daß Fluktuationen im halbgefüllten CDW-Zustand eine untergeordnete Rolle spielen.

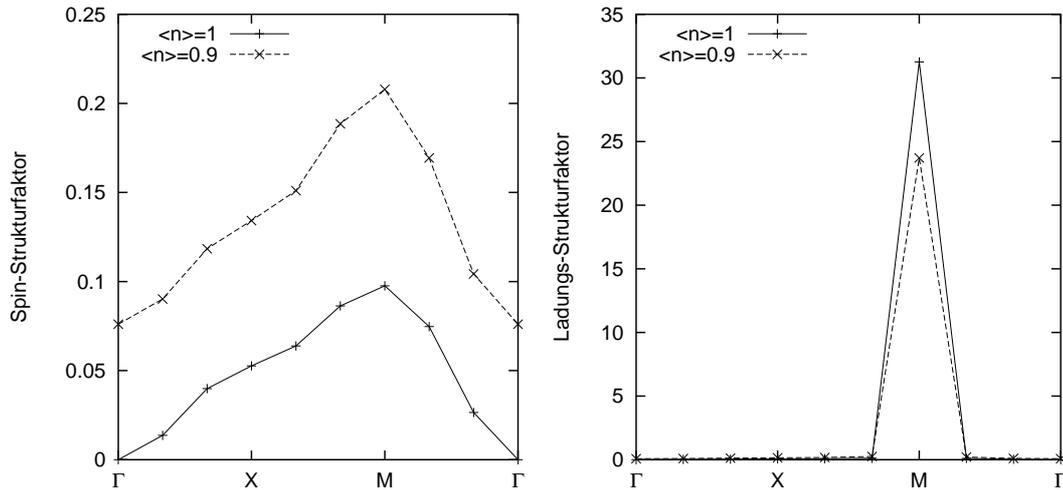


Abbildung 4.8: Spin- und Ladungs-Strukturfaktor des EHM auf einem 6×6 -Gitter bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 4$ und $V/t = 2$ bei Füllungen von 1.0 und 0.9.

Spektrale Dichte, Spin -und Ladungssuszeptibilität des dotierten EHM in der CDW-Phase sind in Abbildung 4.9 zu sehen. Die spektrale Dichte zeigt dabei ein $\sim 2t$ breites Band, das auch bei Dotierung noch vollständig unterhalb der Energie $\omega = \mu$ verläuft. Für das EHM in der SDW-Phase war hier eine Struktur zu beobachten, die das Fermi-Niveau kreuzte, also metallisches Verhalten zeigt. Bei dem hier diskutierten System liegt noch immer die charakteristische Dispersion der Molekularfeld-Näherung aus dem halbgefüllten System vor (siehe auch Abb. 3.12). Im Bereich positiver Energien verläuft dabei eine Reihe inkohärenter Anregungen mit einer Gesamtbreite von $\sim 5t$. Im Gegensatz zum halbgefüll-

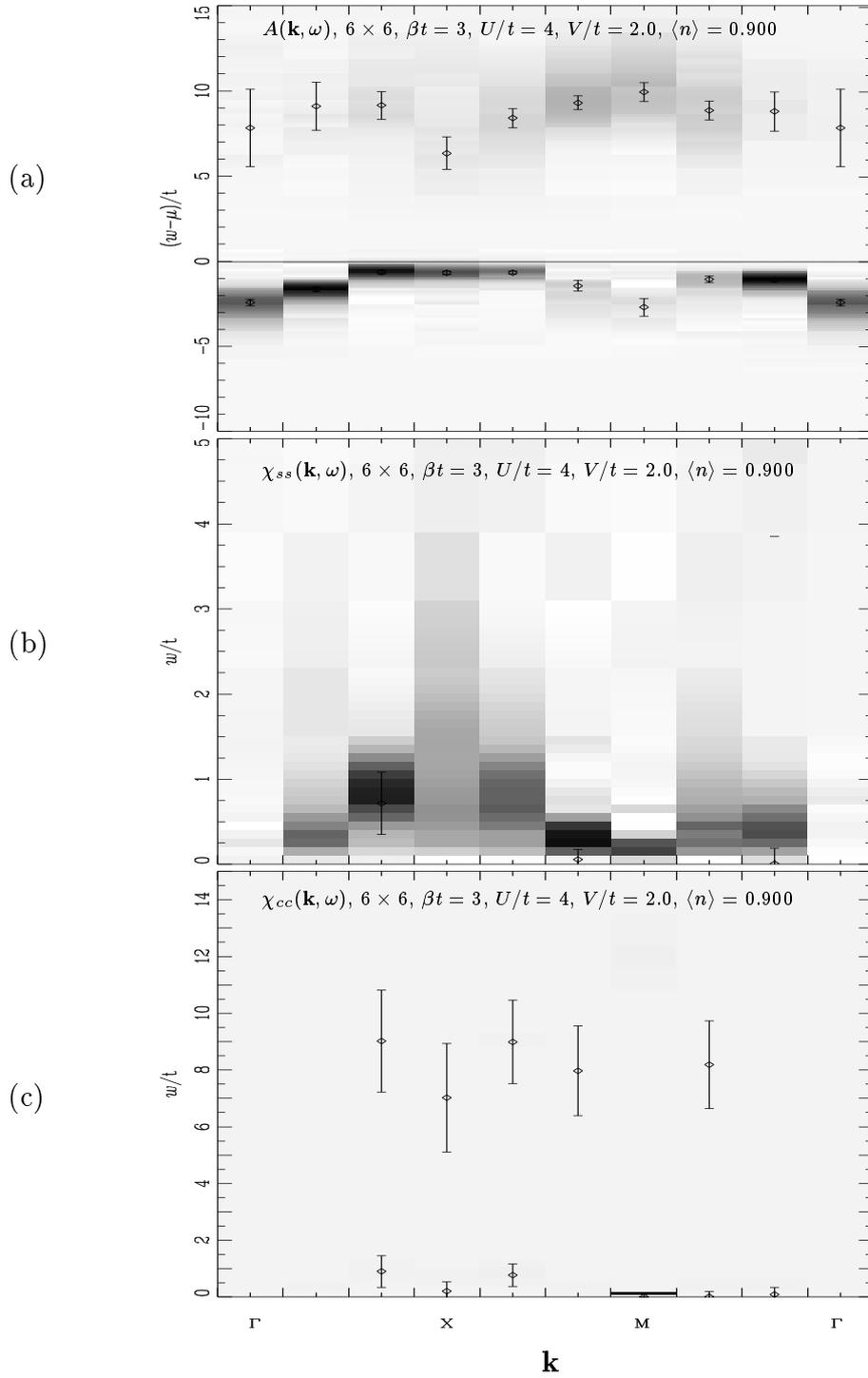


Abbildung 4.9: Spektrale Dichte, Spin- und Ladungssuszeptibilität eines 6×6 -Gitter bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 4$ $V/t = 2.0$ mit $\langle n \rangle \approx 0.90$.

ten System weist die dynamische Spinsuszeptibilität $\chi_{ss}(\mathbf{k}, \omega)$ (Abbildung 3.12 (b)) niederenergetische Anregungen mit dem Hauptgewicht auf dem M -Punkt auf, die ein der Spinwellendispersion ähnliche Struktur bilden. Dies deutet darauf hin, daß spinangeregte Zustände aufgrund der verminderten Elektronendichte wieder vermehrt eingenommen werden können. Der Spin-Strukturfaktor $S(\mathbf{k})$ am M -Punkt (Abbildung 4.8) steigt im Vergleich zum halbgefüllten System auf mehr als den doppelten Wert. Aus dem Ladungs-Strukturfaktor $C(\mathbf{k})$ läßt sich auf eine trotz der Dotierung anhaltend starke alternierende Ladungsordnung schließen. $C(\mathbf{k})$ wird dabei von dem Wert am M -Punkt dominiert. Die dynamische Ladungssuszeptibilität $\chi_{cc}(\mathbf{k}, \omega)$ zeigt sich gegenüber dem halbgefüllten System kaum verändert. Die Interpretation dieses Systems ist äußerst schwierig, da sich die unphysikalisch gewählten Parameter in den für die Physik der Kuprate irrelevanten Eigenschaften widerspiegeln. Die Betrachtung eines solchen Extremfalles kann daher nur akademischer Natur sein.

4.3 Das dotierte EHM bei attraktivem V

Analog zu der in Abschnitt 3.3.3 behandelten attraktiven Wechselwirkung im EHM soll hier das entsprechende System bei Dotierung vorgestellt werden. Simuliert wurde ein 6×6 -Gitter bei einer inversen Temperatur von $\beta t = 3$ mit einer lokalen Wechselwirkung $U/t = 8$ und attraktiver erweiterter Wechselwirkung von $V/t = -0.5$. Die Dotierung beträgt 8%. Abbildung 4.10 zeigt die spektrale Dichte, die Spin- und die Ladungssuszeptibilität dieses Systems. Wie für eine repulsive erweiterte Wechselwirkung bleibt auch hier die schmale, das Fermi-Niveau kreuzende Struktur des Hubbard-Modells in der spektralen Dichte erhalten (Abb. 4.10 (a)). Auch die Spin- und Ladungssuszeptibilität zeigen durch die attraktive Wechselwirkung keine relevanten Veränderungen (Abb. 4.10 (b) und (c)). Bemerkenswert ist der in Abbildung 4.7 eingezeichnete, stark erhöhte Wert des Ordnungsparameters der $d_{x^2-y^2}$ -Wellen-Supraleitung für das dotierte System bei attraktiver erweiterter Wechselwirkung.

Bei sehr stark attraktiven Wechselwirkungen V ($V \approx -U/3$) tritt im EHM Phasenseparation auf. Ein solches System wurde bei $U/t = 4$ zur Überprüfung eines von Prof. C. L. Henley vorgeschlagenen, exakt $SO(5)$ -Symmetrischen Modells simuliert [Hen98]. Wegen der Natur der Phasenseparation sind diese Simulationen jedoch numerisch schwierig und ergeben bisher keine eindeutige Aussage.

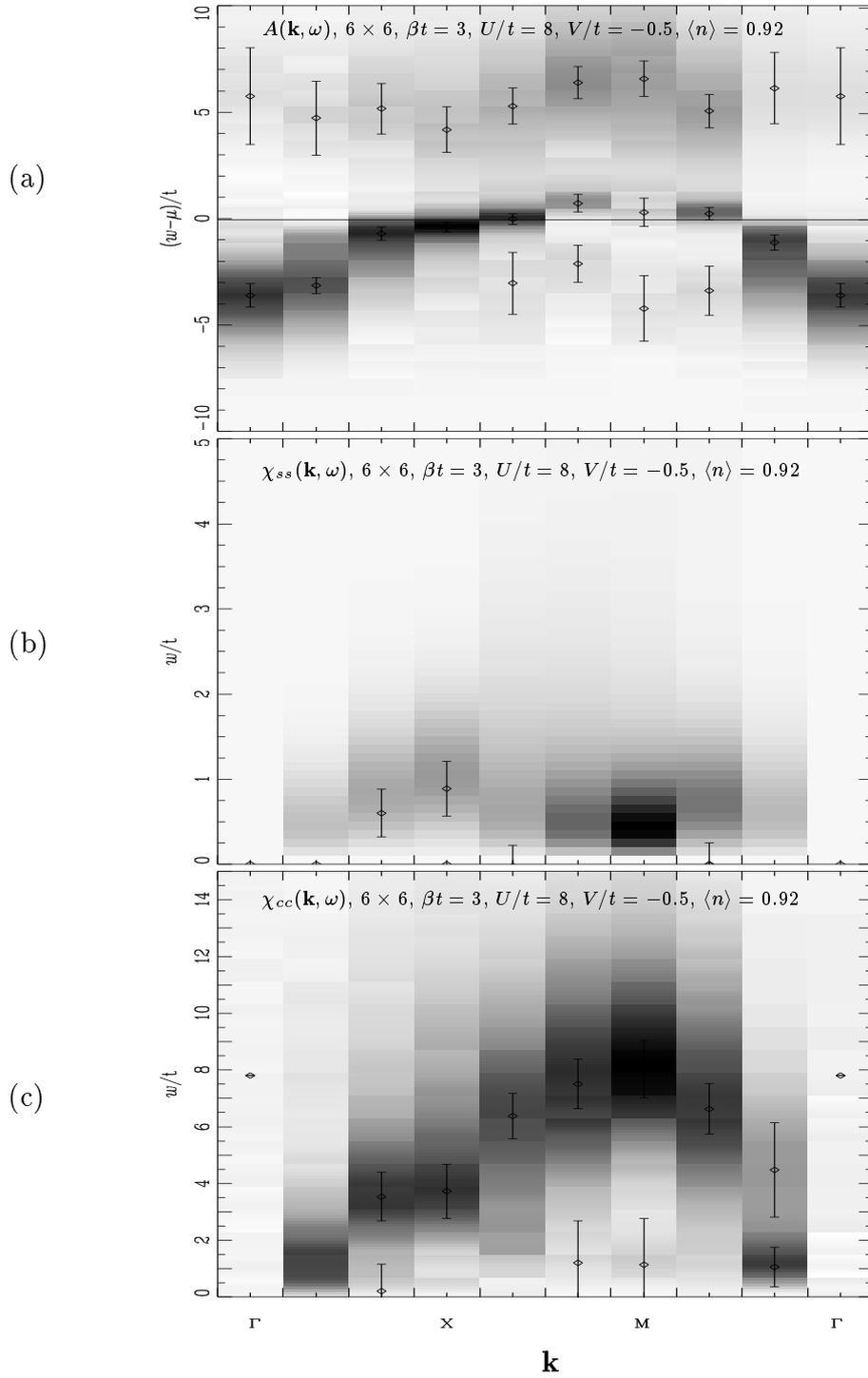


Abbildung 4.10: Spektrale Dichte, Spin- und Ladungssuszeptibilität eines 6×6 -Gitter bei $\beta t = 3$ mit $U/t = 8$ $V/t = -0.5$ mit $\langle n \rangle = 0.92$.

Kapitel 5

Das *Extended*-Hubbard-Modell in zwei Ebenen

Für die eigentliche Supraleitung der Kuprate ist die Kopplung der Kupferoxidebenen essentiell. Das Hubbard-Modell kann in zwei Dimensionen einen Kosterlitz-Thouless-artigen Phasenübergang, nicht aber *Off diagonal long range order* aufweisen. Dies wurde, den Argumenten von Mermin und Wagner folgend, rigoros gezeigt [Su98]. Auch kann die Kopplung der Ebenen die Sprungtemperatur stark beeinflussen [Dar96]. Wie schon in Abschnitt 1.2 beschrieben kommen die verschiedenen Arten der Kuprate in ein- bis dreilagigen Strukturen vor. Dabei ist besonders bemerkenswert, daß die höchsten Sprungtemperaturen bei dreilagigen Kupraten vorgefunden werden. Bisher ist jedoch ungeklärt, welche Rolle die Lagenstruktur für die Entwicklung hoher Sprungtemperaturen spielt (siehe auch Abschnitt 5.3). Im folgenden Kapitel soll das *Extended*-

Verbindung	Tl ₂ Ba ₂ CuO ₆	Tl ₂ CaBa ₂ Cu ₂ O ₈	Tl ₂ Ca ₂ Ba ₂ Cu ₃ O ₁₀
n_p	1	2	3
T_c/K	85	105	125

Tabelle 5.1: Sprungtemperatur T_c in Abhängigkeit von der Anzahl der Kupferoxid-Lagen n_p am Beispiel einer Tallium-Verbindung (nach [Cyr92]).

Hubbard-Modell für gekoppelte Ebenen untersucht werden. Es folgt zunächst analog den oben diskutierten Systemen eine Betrachtung der Ein- und Zweiteilcheneigenschaften. Die Einteilcheneigenschaften sollen dabei vor allem auf die Existenz einer Aufspaltung der Bandstruktur zwischen $A(\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0), \omega)$ und $A(\mathbf{k} = (k_x, k_y, \pi), \omega)$ überprüft und diese, wenn möglich, quantifiziert werden. Eine Analyse der Kohärenz des Zwischenebenenentunnelns zwischen den Ebenen schließt sich daran an.

Zur Simulation gekoppelter *Extended*-Hubbard-Ebenen muß der Hamilton-Operator (1.9) um einen Term erweitert werden, der die Elektronenbewegung zwischen den Ebenen repräsentiert. Analog zum Hüpfen in der Ebene können die Elektronen sich dabei nur zu einem direkt benachbarten Platz der anderen Ebene fortbewegen. Der Hamilton-Operator des *Extended*-Hubbard-Modells in zwei gekoppelten Ebenen lautet damit

$$\begin{aligned}
H = & -t \sum_{\langle ij \rangle_{\parallel \sigma}} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - t_{\perp} \sum_{\langle ij \rangle_{\perp \sigma}} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \\
& + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle_{\parallel}} \sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}.
\end{aligned} \tag{5.1}$$

Das Hüpfmatrixelement t_{\perp} beschreibt das Hüpfen zwischen nächsten Nachbarn $\langle ij \rangle_{\perp}$ verschiedener Ebenen.

Die Simulation gekoppelter Ebenen unter Einbeziehung einer erweiterten Coulombwechselwirkung erwies sich in der Durchführung als äußerst schwierig. Wie schon in für das einlagige EHM in den Kapiteln 3 und 4 erläutert, wirkt sich die erweiterte Wechselwirkung V , vor allem bei Dotierung, erheblich auf die Stabilität der Simulation aus. Daher gelang es mit vertretbarem Aufwand an Rechenzeit nicht, eine Simulation des dotierten *Extended*-Hubbard-Modells in gekoppelten Ebenen für eine inverse Temperatur von $\beta t = 3$ durchzuführen.

Bisherige Untersuchungen von Systemen gekoppelter Ebenen mit numerischen Methoden beschränken sich bisher weitgehend auf die Diskussion statischer Werte [Het94, Sca94, San95]. Die Untersuchung dynamischer Größen wie der spektralen Dichte ist nur aus wenigen Studien mit der Quanten-Monte-Carlo-Methode [Gro96] und der Fluktuations-Austausch-Näherung [Gra96, Gra97, Lie95] bekannt. Alle bisherigen Studien vernachlässigen dabei die längerreichweitige Coulomb-Wechselwirkung. Diese könnte jedoch, wenn auch in anderer als der hier angewandten Form, für die Hochtemperatur-Supraleitung eine entscheidende Rolle spielen [Leg98].

5.1 Einteilchen-Anregungen

In diesem Abschnitt soll die spektrale Dichte gekoppelter *Extended*-Hubbard-Ebenen für den halbgefüllten und dotierten Fall betrachtet werden. Im Gegensatz zu den rein zweidimensionalen Systemen ist für die gekoppelte Ebenen in der Literatur bisher keine Analyse der impuls aufgelösten Einteilchen-Anregungen mit dem QMC-Verfahren bekannt. Abbildung 5.1 zeigt die spektrale Dichte zweier gekoppelter *Extended*-Hubbard-Ebenen bei Halbfüllung. Simuliert wurde ein $6 \times 6 \times 2$ -Gitter bei der inversen Temperatur $\beta t = 2$ für $U/t = 8$ mit $V/t = 0.0$ und

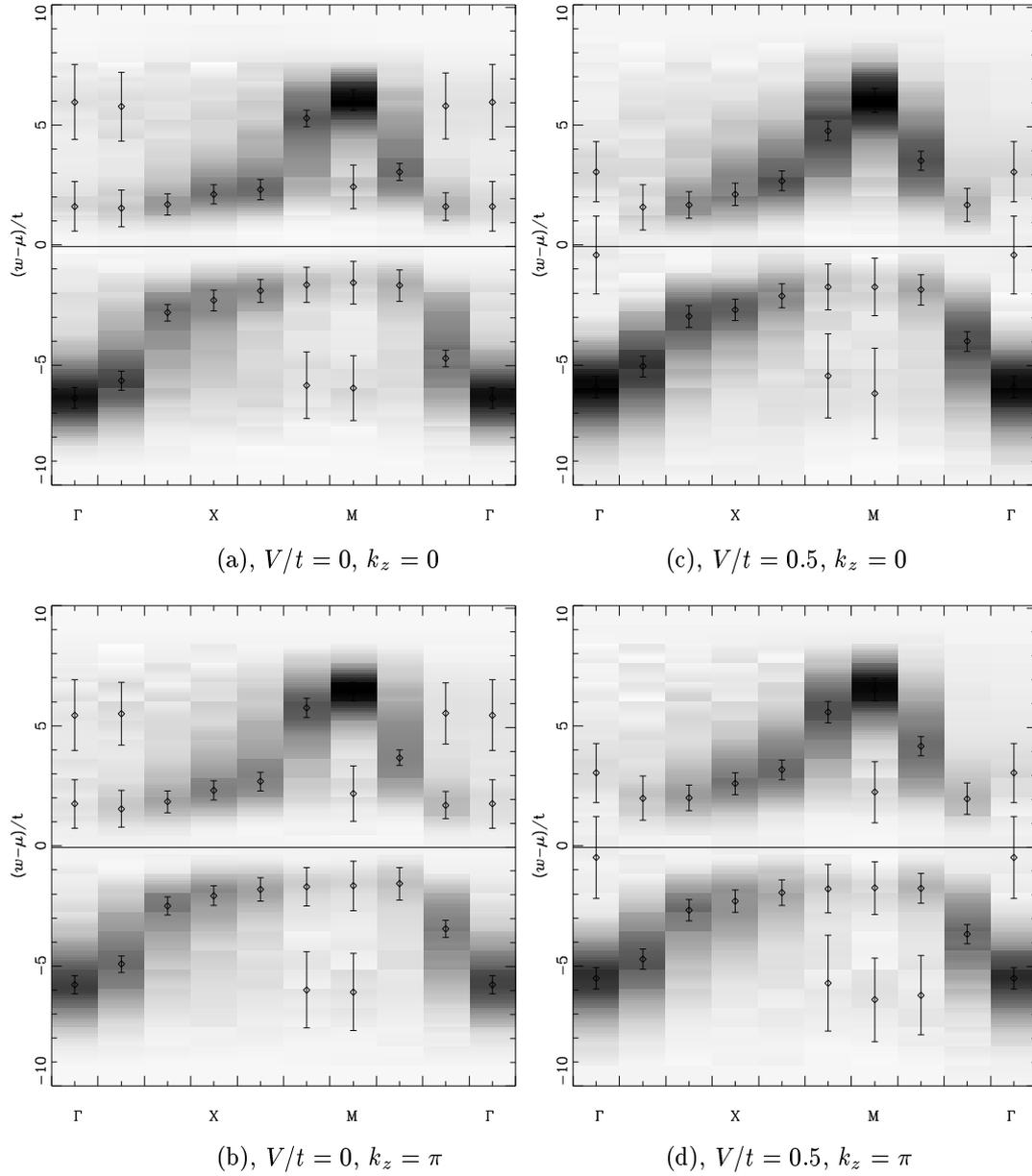


Abbildung 5.1: Spektrale Dichte eines halbgefüllten $6 \times 6 \times 2$ -Gitters bei $\beta t = 2$ mit $U/t = 8$ und $t_{\parallel}/t = 0.3$. (a): $V/t = 0.0, k_z = 0$, (b): $V/t = 0.0, k_z = \pi$, (c): $V/t = 0.5, k_z = 0$, (d): $V/t = 0.5, k_z = \pi$.

$V/t = 0.5$. Das Zwischenebenen-Hüpfmatrixelement t_{\perp} wurde dabei analog zu einer früheren Arbeit des Lehrstuhls [Gro96] auf $t_{\perp} = 0.3t$ gesetzt.

Die in Abschnitt 3.3.1 beschriebenen, schmalen niederenergetischen Strukturen um $\omega = \mu$ lassen sich in der spektralen Dichte der gekoppelten Ebenen nicht vollständig auflösen. Dies betrifft vor allem die Bereiche um den Γ -Punkt für $\omega < \mu$. Abbildung 5.2 zeigt die spektrale Dichte des Hubbard-Modells ($V/t = 0$) am Γ -Punkt für $\mathbf{k}_z = 0$ und $\mathbf{k}_z = \pi$. Obwohl am Γ -Punkt spektrales Gewicht im gekennzeichneten Bereich $\omega - \mu = -2t$ vorhanden ist, besitzt dieser Peak zu wenig Signifikanz für eine Darstellung durch MaxEnt. Durch gesteigerten Rechenaufwand ist hier aber eine Verbesserung möglich. Die schmale kohärente Struktur

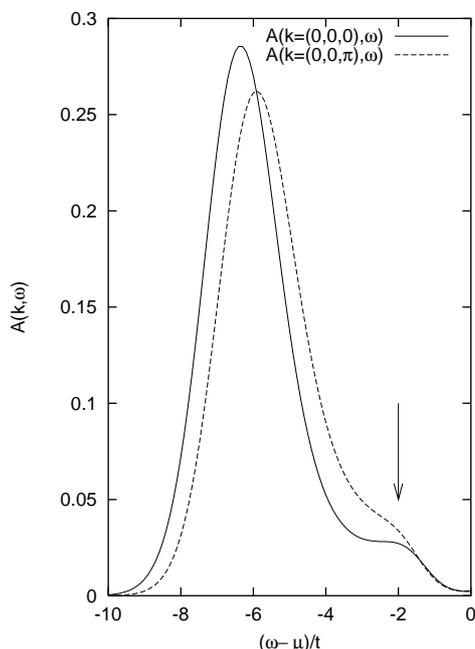


Abbildung 5.2: Spektrale Dichte $A(\mathbf{k} = (0, 0, 0), \omega)$ und $A(\mathbf{k} = (0, 0, \pi), \omega)$ des Hubbard-Modells für $U/t = 8$ bei $\beta t = 2$. Die gekennzeichneten Peaks können durch die *Maximum-Entropy*-Methode nicht mehr vollständig aufgelöst werden.

ist in gekoppelten Ebenen und auch bei einer inversen Temperatur von $\beta t = 2$ also durchaus noch vorhanden. Wegen der angesprochenen Auflösungsprobleme können diese Anregungen hier jedoch nicht diskutiert werden. Zwischen X- und M-Punkt erstreckt sich dagegen eine sehr ausgeprägte Struktur bei $\omega - \mu \approx -2t$, die in dieser Deutlichkeit am M-Punkt bei den einlagigen Systemen bei der inversen Temperatur $\beta t = 5$ aus Abschnitt 3.3.1 nicht zu beobachten war. Ein Vergleich mit Referenz [Gro96] zeigt, daß diese Anregungen im Hubbard-Modell bei $\beta t = 10$ überhaupt nicht zu sehen sind. Die referenzierte Simulation wurde dabei auch mit einer lokalen Wechselwirkung von $U/t = 8$ durchgeführt, allerdings auf einem $8 \times 8 \times 2$ -Gitter. Dennoch liegt ein direkter Vergleich nahe. Demnach sollte es sich bei den Peaks bei $\omega - \mu \approx -2t$ um den M-Punkt um stark temperaturabhängige Anregungen handeln, die für hohes β zumindest stark an spektralem Gewicht verlieren. Ein systematischer Einfluß der erweiterten Wechselwirkung V

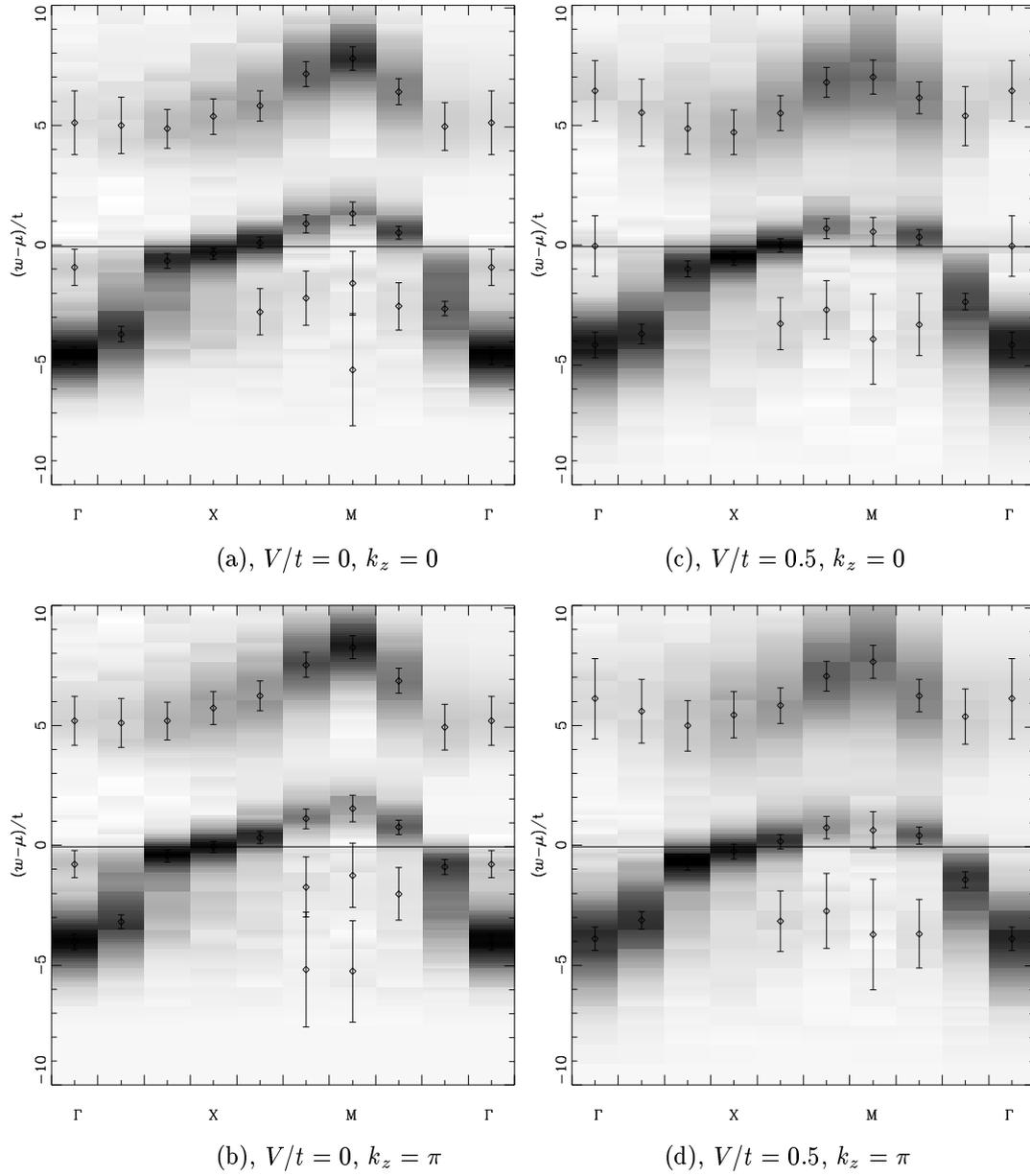


Abbildung 5.3: Spektrale Dichte eines dotierten $6 \times 6 \times 2$ -Gitters bei $\beta t = 2$ mit $U/t = 8$ und $t_{\parallel}/t = 0.3$. (a): $V/t = 0.0, k_z = 0$, (b): $V/t = 0.0, k_z = \pi$, (c): $V/t = 0.5, k_z = 0$, (d): $V/t = 0.5, k_z = \pi$. Die Dotierung beträgt 10% für das Hubbard-Modell und 9% für das EHM mit $V/t = 0.5$.

auf die spektrale Dichte des halbgefüllten EHM kann jedoch nicht festgestellt werden. Die Peaks der System mit $V/t = 0$ und $V/t = 0.5$ sind im Rahmen der Fehler klar identisch. Belegbare Tendenzen innerhalb der Fehlerbalken wie bei den einlagigen Systemen sind nicht festzustellen. Daher muß auf weitergehende Studien verwiesen werden.

Die spektrale Dichte des dotierten *Extended*-Hubbard-Modells in gekoppelten Ebenen für eine Temperatur von $\beta t = 2$ ist in Abbildung 5.3 zu sehen. Die Dotierung beträgt dabei 10% für das Hubbard-Modell (links) und 9% für das EHM (rechts). Analog zu den einlagigen Systemen aus Abschnitt ist ein Band der Breite $\sim 2t$ zu sehen, das die Energie des chemischen Potentials kreuzt ($X \rightarrow M$ und $M \rightarrow \Gamma$). Von besonderem Interesse ist die ausgedehnte, flache Struktur des unteren Hubbard-Bandes in der Nähe der Energie $\omega - \mu = 0$ am X-Punkt. Dieser "Sattelpunkt" wird in der Literatur für zweilagige Materialien eingehend diskutiert. Grund der Diskussion ist eine mögliche Aufspaltung des Spektrums nahe des Fermi-Niveaus in ein bindendes und ein antibindendes Band, die experimentell nicht eindeutig geklärt ist. Daher soll die Aufspaltung der spektralen Dichte im nachfolgenden Abschnitt eingehender untersucht werden.

5.2 Die Aufspaltung der Bandstruktur

Die flache Struktur nahe $\omega = \mu$ am X-Punkt ist seit einiger Zeit Teil einer intensiven Diskussion über die Rolle von viellagigen Strukturen in Hochtemperatur-Supraleitern. Dabei liegen viele unterschiedliche und sich teilweise widersprechende Vorhersagen und Interpretationen vor [Lie95]. Ein mögliches Szenario ist dabei, daß Supraleitung durch elektronische Korrelationen unterstützt wird, die das Einteilchentunneln zwischen den Ebenen stark unterdrücken sollen, während das Paartunneln nicht beeinflusst wird [And97] (siehe auch 5.3). Durch winkel aufgelöste Photoemission-Spektroskopie des Energiespektrums nahe der Fermi-Energie von zweilagigen Materialien könnte diese Frage nach der Natur der bindenden und antibindenden Bänder nahe des Fermi-Niveaus grundsätzlich beantwortet werden. Die Ergebnisse hierzu sind allerdings widersprüchlich. Im folgenden sollen die Resultat experimenteller und numerischer Studien kurz beschrieben und mit den Ergebnissen dieser Arbeit verglichen werden.

5.2.1 Stand der Forschung

Von der lokalen Dichte-Näherung (*Local density approximation*, LDA) wird für die Bandstruktur von $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ eine Aufspaltung am X-Punkt von $\sim 0.8\text{eV}$ in der Nähe der Fermi-Energie vorhergesagt. Da beim Übergang vom halbgefüllten Iso-

lator zum dotierten Metall die Vielteilcheneffekte weniger dominant [Gro96] sind und die LDA längerreichweitige Korrelationen nur unvollkommen berücksichtigt, können für große Dotierungen die experimentellen Spektren recht gut wiedergegeben werden. Allerdings werden die Bänder von der LDA im allgemeinen um den Faktor 2 bis 5 breiter vorhergesagt, als dies im Experiment beobachtet wird [She95].

Die Fluktuations-Austausch-Näherung (FLEX) bestätigt die Aufspaltung der spektralen Dichte [Lie95]. Dabei wurden neben dem Hüpfmatrixelement zwischen nächsten Nachbarn, t (0.5eV), auch die t' ($-0.3t$) und t'' ($0.2t'$) für längerreichweitiges Hüpfen im Hamilton-Operator berücksichtigt. Für das Zwischenebenen-Hüpfmatrixelement wurde $t_{\perp} = 0.15$ gewählt. Die Berechnung wurde für eine Temperatur von 150K durchgeführt. Der festgestellte Wert beträgt $\sim 0.04\text{eV}$ am X-Punkt. Für ein unkorreliertes Modell beträgt die Aufspaltung $2t_{\perp}$, in diesem Fall 0.3eV. Es wird also eine deutliche Reduktion auf ca. 13% des ursprünglichen Wertes durch Vielteilchen-Effekte festgestellt. Eine ähnlich Studie, die aber erweiterte Hüpfprozesse vernachlässigt [Gra96, Gra97] findet ein erheblich weniger stark reduzierte Aufspaltung von $\sim t_{\perp}$.

Auch eine Analyse der Bandstruktur von gekoppelten Ebenen mit dem QMC-Verfahren zeigt eine Aufspaltung der Bandstruktur [Gro96]. Diese wird mit 0.24 ± 0.21 in Einheiten des Hüpfmatrixelements angegeben. Der Messung liegt dabei eine Simulation eines $8 \times 8 \times 2$ -Gitters bei einer inversen Temperatur von $\beta t = 3$ zugrunde. Die Ebenen wurden über ein Hüpfmatrixelement von $t_{\perp} = 0.3t$ gekoppelt. Die Dotierung des Systems betrug 12%.

Aus den numerischen Methoden läßt sich also zusammenfassend zumindest die Existenz einer Aufspaltung ablesen, auch wenn deren Größe durch die verschiedenen Vorhersagen nicht eindeutig zu quantifizieren ist.

Experimentelle Studien der winkelaufgelösten Photoemission zeigen jedoch widersprüchliche Resultate. Für BSCO-2212 wird dabei durch eine Messung ein einziges Band an der Fermi-Fläche festgestellt [Din95], während eine andere Messung eine klare Aufspaltung zeigt [She95]. Abbildung 5.4 zeigt die Daten einer solchen Messung für YBCO-123, die eine Aufspaltung von $\sim 0.4\text{eV}$ zeigt. Da die Qualität der Daten stark von der Güte der verwendeten Probe abhängt, kann daher aus den experimentellen Daten keine klare Aussage gezogen werden.

5.2.2 Ergebnisse der QMC-Simulation

Die im Rahmen dieser Diplomarbeit simulierten Systeme zweier gekoppelter Ebenen im EHM sollen im folgenden auf eine Aufspaltung der spektralen Dichte hin untersucht werden. Dabei erweist es sich als schwierig, eine Aufspaltung der

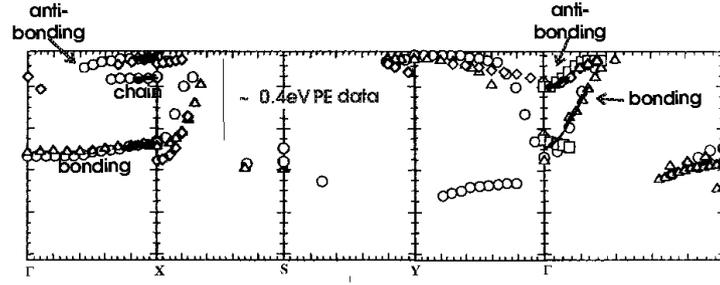


Abbildung 5.4: Daten aus der winkelaufgelösten Photoemission an einem $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ -Kristall von Z.-X. Shen (in [Gro96]). Die Bandstruktur spaltet am X-Punkt deutlich in bindendes (*bonding*) und ein antibindendes (*antibonding*) Band. Die Beschriftung der x-Achse beschreibt den Weg durch die Brillouin-Zone: $\Gamma = (0, 0) \rightarrow X = (\frac{\pi}{a_x}, 0) \rightarrow S = (\frac{\pi}{a_x}, \frac{\pi}{a_x}) \rightarrow Y = (0, \frac{\pi}{a_x}) \rightarrow \Gamma = (0, 0) \rightarrow S = (\frac{\pi}{a_x}, \frac{\pi}{a_x})$

Größenordnung $t_{\perp} = 0.3t$ festzustellen, da die relativ große Zahl der Gitterpunkte (72) und der durch die erweiterte Wechselwirkung stark erhöhte Rechenaufwand (Faktor 9) bei limitierter Rechenzeit zu einer ‘‘Aufweichung’’ der Ergebnisse aufgrund der, im Vergleich zu kleineren Systemen, schlechteren Statistik führen. Daher soll zunächst versucht werden, eine systematische Aufspaltung der spektralen Dichte am und um den X-Punkt zu zeigen.

Abbildung 5.5 zeigt die Peakpositionen der spektralen Dichte $A(\mathbf{k}, \omega)|_{\mathbf{k}_z=0}$ und $A(\mathbf{k}, \omega)|_{\mathbf{k}_z=\pi}$ für das Hubbard-Modell ($V/t = 0$) bei $\beta t = 3$ und $\beta t = 2$ und das EHM bei $\beta t = 2$ und einer erweiterten Wechselwirkung von $V/t = 0.25$ und $V/t = 0.5$. Die lokale Wechselwirkung beträgt in allen Fällen $U/t = 8$ (siehe auch Abbildung 5.3). Alle simulierten Systeme zeigen dabei eine systematische Aufspaltung der Bandstruktur, d.h. es wird nicht ein einziges mal eine Überkreuzung der Peakstrukturen für $\mathbf{k}_z = 0$ und $\mathbf{k}_z = \pi$ festgestellt. Der größte Wert am X-Punkt liegt bei $\Delta\omega/t = 0.32$ ($\beta t = 2, V/t = 0$), der kleinste bei $\Delta\omega/t = 0.18$ ($\beta t = 2, V/t = 0.25$). Die Aufspaltung $\Delta\omega$ ist für alle Punkt deutlich kleiner als der Wert für das unkorrelierte System von $2t_{\perp} = 0.6$. Die gefundenen Werte entsprechen damit den in Referenz [Gro96] gefundenen Aufspaltungen. Der in der Fluktuations-Austausch-Näherung gemessene Wert für ein analoges System entspricht mit $\Delta\omega \approx t_{\perp}$ den QMC-Messungen gut [Gra96, Gra97]. Der in FLEX-Berechnungen mit längerreichweitigen Hüpfprozessen [Lie95] ermittelte Wert in Einheiten von t_{\perp} ist $\Delta\omega/t_{\perp} = 0.3$, also erheblich kleiner als die hier gefundenen Aufspaltungen, zwischen $\Delta\omega/t_{\perp} = 0.6$ und $\Delta\omega/t_{\perp} = 1.1$ liegen.

Die Aufspaltung liegt für die meisten Punkt innerhalb der mit MaxEnt ermittelten Fehler, kann also für einen einzigen Punkt nicht quantitativ nachgewie-

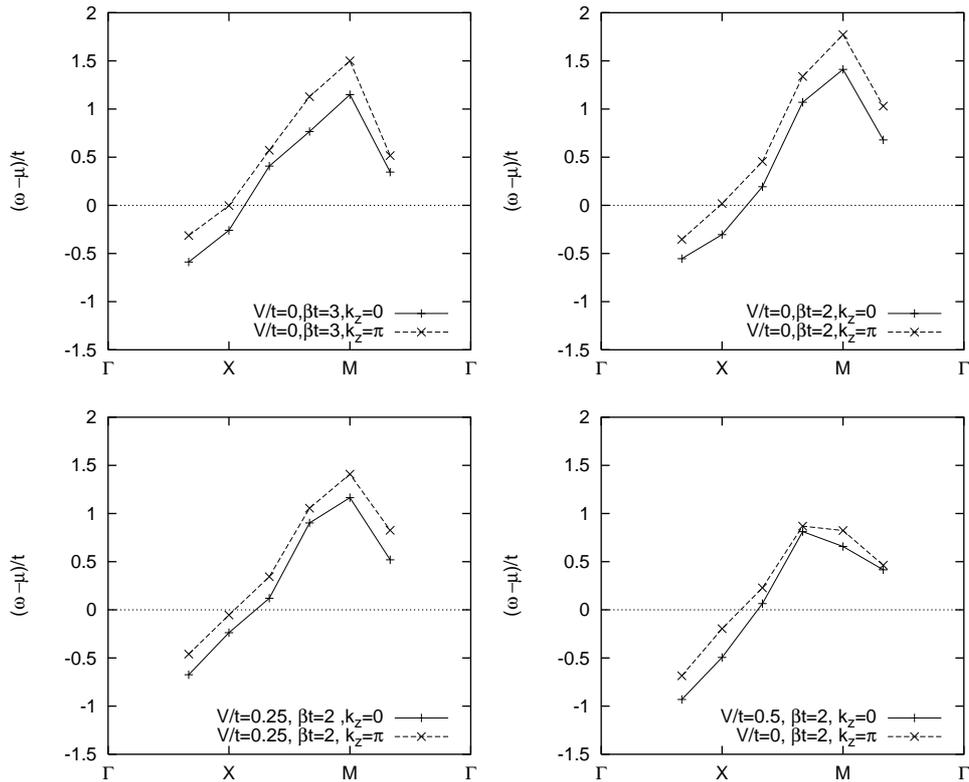


Abbildung 5.5: Aufspaltung der Bandstruktur eines $6 \times 6 \times 2$ -Gitter bei $\beta t = 3$ (Links oben) und $\beta t = 2$. Die lokale Wechselwirkung beträgt $U/t = 8$. Die erweiterte Wechselwirkung wurde zwischen $V/t = 0$ und $V/t = 0.5$ variiert. Dargestellt sind die Peakmaxima.

sen werden. Auch eine Interpretationen des Verhaltens der Bandaufspaltung mit zunehmender Wechselwirkung V ist wegen der qualitativen Betrachtung wenig sinnvoll. Der hier beobachtete, systematische Unterschied in den Positionen des Maxima des spektralen Gewichtes deutet jedoch darauf hin, daß Korrelationseffekte eine Aufspaltung der Bandstruktur nicht vollständig unterdrücken, eventuell aber vermindern.

5.3 Kohärenz und Inkohärenz des Einteilchenhüpfens

Seit längerem steht der von P. W. Anderson vorgeschlagene Zwischenebenen-Tunnelmechanismus (*Interlayer Tunneling*, ILT im folgenden) als mögliche Erklärung der hohen Sprungtemperaturen der Hochtemperatur-Supraleiter zu Diskussion [And97]. Diese elegante, wenn auch nicht unumstrittene Theorie [Leg98] stellt einen Mechanismus zur Verfügung, der, ohne die Ursache der Bildung von supraleitenden Paaren zu spezifizieren, kohärentes Paartunneln nur auf Grund des Auftretens von inkohärentem Einteilchentunneln beschreibt. Dieses wird zwar in der ILT-Theorie zwischen gekoppelten Luttinger-Flüssigkeiten betrachtet, ist aber durchaus auch zwischen den Kupferoxid-Ebenen der HTSL denkbar, falls sich das eindimensionale Konzept der Luttinger-Flüssigkeit auf zwei Dimensionen erweitern läßt. In diesem Fall würde ein unterdrücktes kohärentes Einteilchentunneln zwischen den Ebenen ein kohärentes Paartunneln ermöglichen, durch das die Gesamtenergie abgesenkt werden kann. Das Modell favorisiert also Paarbildungsprozesse, die die hohen Sprungtemperaturen in den Mehrschicht-HTSL erklären könnten. Inkohärentes Einteilchentunneln führt jedoch auch zu einer Reduzierung der im vorherigen Abschnitt beschriebenen und in den QMC-Simulationen systematisch beobachteten Bandaufspaltung der Fermifläche. Im Folgenden soll nun versucht werden, eine direkte Aussage über die Kohärenz des Einteilchentunnelns zwischen den Ebenen des *Extended*-Hubbard-Modells zu erreichen.

5.3.1 Das Zwei-Niveau-System

Von D. G. Clarke und S. P. Strong wurde ein Beispielmmodell vorgeschlagen, an welchem sich inkohärentes Verhalten veranschaulichen läßt [Cla95]. Dieses Zwei-Niveau-System (*Two-Level-System*, TLS) besteht aus einem quantenmechanischen Freiheitsgrad, z. B. einem Spin, der an ein Bad harmonischer Oszillatoren gekoppelt ist:

$$H_{TLS} = \frac{1}{2}\Delta\sigma_x + \sum_i \left[\frac{1}{2}m_i\omega_i x_i^2 + \frac{p_i^2}{2m_i} \right] + \frac{1}{2}\sigma_z \sum_i C_i x_i. \quad (5.2)$$

σ_x und σ_z sind hierbei Pauli-Matrizen. x_i und p_i repräsentieren Orts- und Impulsoperatoren der harmonischen Oszillatoren sowie m_i deren Massen. Über C_i ist der Spin an das Reservoir der Oszillatoren gekoppelt. Dadurch beeinflussen die Oszillatoren das Tunneln zwischen den beiden möglichen Zuständen $|\sigma_z, +\rangle$ und $|\sigma_z, -\rangle$ des Spinsystems. Zur Zeit $t = 0$ sei das Spinsystem in seinem Eigenzustand $|\sigma_z, +\rangle$ präpariert. Die Wahrscheinlichkeit $P(t)$ das System zu einem Zeitpunkt $t > 0$ wieder im Anfangszustand zu messen, ist

$$P(t) = |\langle \sigma_z, + | e^{iHt} | \sigma_z, + \rangle|^2, \quad (5.3)$$

wobei der Erwartungswert des Operators $\sigma_z(t)$ durch

$$\langle \sigma_z \rangle = 2P(t) - 1 \quad (5.4)$$

gegeben ist. Sind das Spinsystem und das Reservoir der Oszillatoren entkoppelt, also $C_i = 0$, so läßt sich der Erwartungswert $\langle \sigma_z(t) \rangle$ angeben:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_z \rangle &= 2 |\langle \sigma_z, + | e^{iHt} | \sigma_z, + \rangle|^2 - 1 \\ &= \frac{1}{2} |(\langle \sigma_x, + | + \langle \sigma_x, - |) e^{iHt} (| \sigma_x, + \rangle + | \sigma_x, - \rangle)|^2 - 1 \\ &= \frac{1}{2} |e^{\frac{i\Delta t}{2}} + e^{-\frac{i\Delta t}{2}}|^2 - 1 \\ &= \cos(\Delta t). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Der Erwartungswert oszilliert also mit einer Frequenz Δ , die der Energiedifferenz seiner beiden Eigenzustände $|\sigma_x, +\rangle$ und $|\sigma_x, -\rangle$ entspricht. Der Anfangszustand $|\sigma_z, +\rangle$ ist eine Superposition der beiden Eigenzustände mit einer festen Phasenbeziehung zwischen ihnen. Wird das Spinsystem nicht durch das Bad der Oszillatoren gestört, so liegt diese Phase für alle Zeiten fest.

Bei nicht verschwindender Kopplung C_i kann allerdings Energie zwischen den Oszillatoren und dem Spinsystem ausgetauscht werden. Für große C_i wird dabei die feste Phasenbeziehung zerstört. Durch kanonische Transformation

$$H'_{TLS} = U H_{TLS} U^{-1} \quad (5.6)$$

$$U = \exp\left(-\frac{1}{2}\sigma_z \sum_i \frac{C_i}{m_i \omega_i^2} p_i\right) \quad (5.7)$$

wird der Hamiltonoperator des TLS in eine für dieses Problem leichter handhabbare Form überführt:

$$H'_{TLS} = \frac{\Delta}{2} (\sigma^+ e^{i\Omega} + \text{h.c.}) + \sum_i \left[\frac{1}{2} m_i \omega_i x_i^2 + \frac{p_i^2}{2m_i} \right] \quad (5.8)$$

$$\Omega = \sum_i \frac{C_i}{m_i \omega_i^2} p_i. \quad (5.9)$$

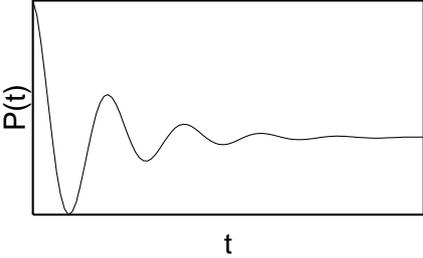
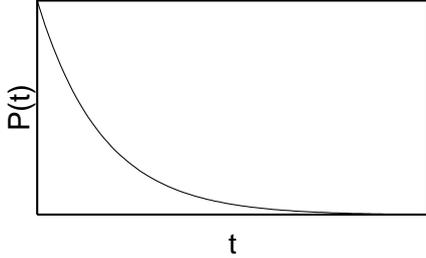
Dabei ist σ^+ ein Leiteroperator mit der Wirkung $\sigma^+ | \sigma_z, - \rangle \rightarrow | \sigma_z, + \rangle$. Geht man auf die Darstellung in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren über, zeigt sich, daß in dieser Form neben dem reinen Tunneln auch Anregungen im Bad der Oszillatoren erzeugt und vernichtet werden. Im Ohmschen Regime [Leg87], das hier betrachtet werden soll, sind die Zustandsdichte des Bades und seine Kopplung an den Spin dergestalt, daß die spektrale Dichte des Bades durch

$$\begin{aligned} J(\omega) &= \frac{\pi}{2} \sum_i \frac{C_i}{m_i \omega_i} \delta(\omega - \omega_i) \\ &= 2\pi\alpha\omega e^{-\frac{\omega}{\omega_c}} \end{aligned} \tag{5.10}$$

gegeben ist, wobei $\alpha > 0$ die Stärke der Kopplung repräsentiert und ω_c eine ultraviolette Abschneidefrequenz ist. Für die anfangs betrachtete Wahrscheinlichkeit $P(t)$ ergibt sich durch Entwicklung in $\mathcal{O}(\Delta^2)$ mit $\omega_c t \gg 1$

$$P(t) \approx 1 - \alpha\Delta^2\omega^{-2\alpha}t^{2-2\alpha} \int_0^\infty dx \frac{\sin^2(x)}{x^{3-2\alpha}}. \tag{5.11}$$

Nach Kopplungsstärken klassifiziert, zeigt $P(t)$ also folgendes Verhalten:

$0 < \alpha < 0.5$	$0.5 < \alpha < 1$
$P(t)$ entspricht einer gedämpften Oszillation mit der Frequenz	$P(t)$ zeigt exponentielles Abklingen mit der Dämpfung
$\omega = \cos(\pi\alpha/(2 - 2\alpha))$	$\Gamma \approx \Delta \left(\frac{\Delta}{\omega_c} \right)^{\alpha/(1-\alpha)}$
und der Dämpfung	ohne jede Oszillation. Das System verhält sich inkohärent.
$\Gamma = \sin(\pi\alpha/(2 - 2\alpha))$.	
Das System zeigt kohärentes Verhalten.	
	

5.3.2 Gekoppelte Nicht-Fermi-Flüssigkeiten

Wesentlich interessanter als das im vorhergehenden Kapitel behandelte Modellsystem ist die allgemeine Betrachtung zweier durch das Hüpfmatrixelement ge-

koppelter Nicht-Fermi-Flüssigkeiten:

$$H = H_{NFF}^{(1)} + H_{NFF}^{(2)} + t_{\perp} \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^{(1)\dagger} c_{i\sigma}^{(2)} + c_{i\sigma}^{(2)\dagger} c_{i\sigma}^{(1)} \right). \quad (5.12)$$

Für Zeiten $t < 0$ sollen die beiden Systeme unterschiedliche Füllungen mit der Differenz $\Delta N = N_1 - N_2$ besitzen, der Teilchenaustausch jedoch unterdrückt sein, also $t_{\perp} = 0$. Wird zum Zeitpunkt $t = 0$ die Kopplung eingeschaltet ($t_{\perp} \neq 0$), so wird sich die Besetzungsdifferenz abbauen und für große Zeiten verschwinden. Betrachtet man nun, in Analogie zum TLS, die Wahrscheinlichkeit

$$P(t) = |\langle S_1 S_2 | e^{iH_0 t} e^{iH_K t} | S_1 S_2 \rangle|^2 \quad (5.13)$$

das System wieder im Anfangszustand mit der Teilchenzahldifferenz ΔN vorzufinden, so stellt sich die Frage, ob $P(t)$ in diesem Zusammenhang einen mit oszillatorischem Verhalten abfällt oder nicht. Man spricht dann von von kohärentem bzw. inkohärentem Einteilchenhüpfen zwischen den beiden Systemen.

5.3.3 Einteilchen-Hüpfen im *Extended-Hubbard-Modell*

Es soll nun mit Hilfe eines passenden diagnostischen Operators versucht werden, die Frage nach kohärentem Einteilchen-Hüpfen im *Extended-Hubbard-Modell* zu beantworten [End96]. Obwohl eine Aussage wie in Gleichung (5.13) in QMC nicht direkt zugänglich ist, erlaubt die Wahrscheinlichkeit

$$\tilde{P}(t) = |\langle c_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{(1)}(t) c_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{(2)\dagger} \rangle|^2 \quad (5.14)$$

eine zu Abschnitt (5.3.2) vergleichbare Überlegung: Durch $c_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{(1)} c_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{(2)\dagger}$ wird ein Teilchen im System (1) vernichtet und in System (2) erzeugt. Dadurch entsteht eine Teilchenzahldifferenz von $\Delta N = 2$. Der zeitliche Verlauf von $\tilde{P}(t)$ zeigt also das oben beschriebene oszillatorische Verhalten, falls ΔN durch kohärentes Hüpfen abgebaut wird [Gro96]. Die Fourier-Transformierte von $\tilde{P}(t)$

$$\tilde{P}(E) = \int_0^{\infty} dt P(\tau) e^{iE\tau} \quad (5.15)$$

sollte bei kohärentem Hüpfen Peaks bei den Frequenzen aufweisen, die zur Oszillation von $\tilde{P}(t)$ beitragen. Ist das Hüpfen zwischen den Systemen inkohärent, so erwartet man eine monoton abfallende Verteilung von $\tilde{P}(E)$ um $E = 0$. $\tilde{P}(E)$ ist durch

$$\tilde{P}(E) = \frac{\pi}{4} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\tilde{A}(\mathbf{k}, \omega)}{1 + e^{-\beta\omega}} \frac{\tilde{A}(\mathbf{k}, \omega - E)}{1 + e^{-\beta(\omega - E)}} \quad (5.16)$$

mit der im QMC-Verfahren einfach zugänglichen Größe

$$\tilde{A}(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega) = \frac{1}{2} A(\mathbf{k}, \omega) \Big|_{k_z=0} - \frac{1}{2} A(\mathbf{k}, \omega) \Big|_{k_z=\pi} \quad (5.17)$$

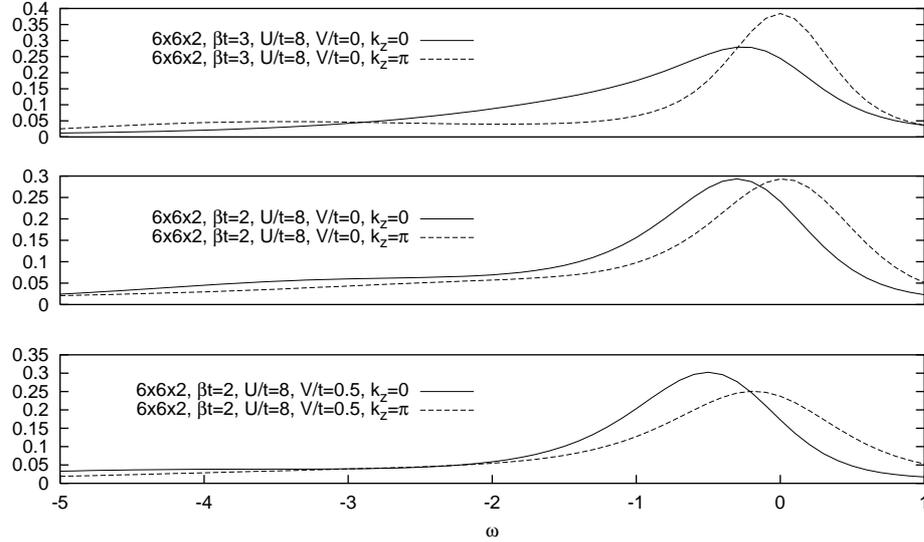


Abbildung 5.6: Aufspaltung der spektralen Dichte $A(\mathbf{k}, \omega)$ am X-Punkt $\mathbf{k}_{\parallel} = (\pi, 0)$ für das Hubbard- und *Extended*-Hubbard-Modell. Die Peakpositionen und ihre Fehler sind in Tabelle 5.2 aufgelistet.

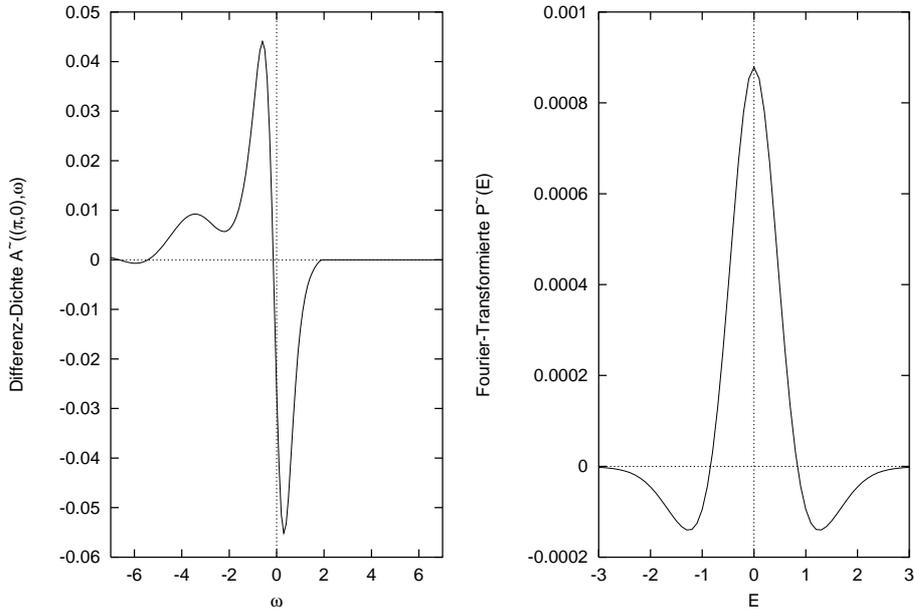
V/t_{\parallel}	0 ($\beta t = 3$)	0 ($\beta t = 2$)	0.25 ($\beta t = 2$)	0.5 ($\beta t = 2$)
$\Delta\omega$	$0.26 \pm .32$	0.32 ± 0.33	0.18 ± 0.33	0.32 ± 0.39

Tabelle 5.2: Differenzen der Peakpositionen am X-Punkt für das Hubbard-Modell und EHM.

gegeben. Die Fourier-Transformierte $\tilde{P}(E)$ der Wahrscheinlichkeit $P(t)$ soll im folgenden aus den Daten der QMC-Simulationen für das Hubbard- und *Extended*-Hubbard-Modell berechnet werden. Dabei kann zum einen eine Aussage über die Temperaturentwicklung des Einteilchenhüpfens im Hubbard-Modell getroffen, als auch der Einfluß der Coulomb-Wechselwirkung zwischen direkten Nachbarn im EHM untersucht werden. Wie schon erwähnt läßt sich die Aufspaltung der spektralen Dichte nicht außerhalb der mit der *Maximum Entropy*-Methode berechneten Fehler nachweisen. Auch stört der inkohärente Hintergrund bei hohen negativen Frequenzen die Auswertung. Allerdings konnte in Abschnitt 5.2.2 eine systematische Aufspaltung gezeigt werden, so daß man von einem realen Effekt ausgehen kann. Die nachfolgende Analyse muß daher unter den eben genannten Voraussetzungen betrachtet werden.

Abbildung 5.6 zeigt die spektrale Dichte $A(\mathbf{k} = (\pi, 0, 0), \omega)$ und $A(\mathbf{k} = (\pi, 0, \pi), \omega)$ für das Hubbard-Modell ($V/t = 0$) bei einer inversen Temperatur von $\beta t = 3$ und $\beta t = 2$ und für das EHM mit $V/t = 0.5$ bei einer inversen Temperatur von $\beta t = 2$. Alle Simulationen wurden auf einem $6 \times 6 \times 2$ -Gitter mit einer lokalen Wechselwirkung von $U/t = 8$ durchgeführt. Die Peakpositionen und ihre Fehler sind in Tabelle 5.2 aufgelistet. Auffällig ist, die Verschiebung der Maxima des spektralen Gewichtes zu negativen Frequenzen im Spektrum des EHM ($V/t = 0.5$) (siehe auch Abb. 5.5). Aus diesen Spektren wurde nach der oben beschriebenen Methode zunächst die Differenz-Dichte $\tilde{A}(\omega)$ nach Gleichung (5.17) und dann die Wahrscheinlichkeit $\tilde{P}(E)$ durch Faltung nach Gleichung (5.16) gewonnen. Die Wahrscheinlichkeit $\tilde{P}(E)$ ist in Abbildung 5.7 dargestellt. Die Differenz-Dichte $\tilde{A}(\omega)$ ist aus Platzgründen nur für das Hubbard-Modell bei $\beta t = 2$ abgebildet (Abb. 5.7 oben links). Die Wahrscheinlichkeit $\tilde{P}(E)$ zeigt für alle betrachteten Systeme ein ausgeprägtes Maximum bei $E/t = 0$ und jeweils zwei Minima bei einer endlichen Frequenz $\pm E_m$. Die Wahrscheinlichkeit $P(\tau)$ zeigt also oszillierendes Verhalten. Mithin ist das Einteilchentunneln zwischen den Ebenen der hier betrachteten Systeme nicht inkohärent [Gro96]. Die in Abbildung 5.7 dargestellten Wahrscheinlichkeiten lassen jedoch noch weitere Aussagen zu. Betrachtet man die Temperaturentwicklung der Wahrscheinlichkeit $\tilde{P}(E)$ des Hubbard-Modells ($V/t = 0$) von $\beta t = 2$ nach $\beta t = 3$, so zeigen die Minima eine konstante Position von $E_m/t \approx 1.25$. Die Frequenz der Oszillation von $P(\tau)$ ist also in dem hier betrachteten, sehr schmalen Bereich nicht temperaturabhängig, wenn man die oben beschriebenen Einschränkungen auf die Gültigkeit der Daten berücksichtigt. Für das EHM wandern die Minima geringfügig: $E_m/t \approx \pm 1.25$ bei $V/t = 0$ zu $E_m/t \approx \pm 1.60$ bei $V/t = 0.25$ (nicht dargestellt) und $E_m/t \approx \pm 1.8$ bei $V/t = 0.5$. Wegen der geringen Zahl der Messungen und den oben angeführten Vorbehalten wäre eine definitive Aussage über Temperaturverhalten und den Einfluß der Coulombwechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn auf die Kohärenz des Einteilchentunnelns jedoch Spekulation und muß in weitergehenden Untersuchungen geklärt werden.

$$6 \times 6 \times 2, \beta t = 2, U/t = 8, V/t = 0$$



$$6 \times 6 \times 2, \beta t = 3, U/t = 8, V/t = 0 \quad 6 \times 6 \times 2, \beta t = 2, U/t = 8, V/t = 0.5$$

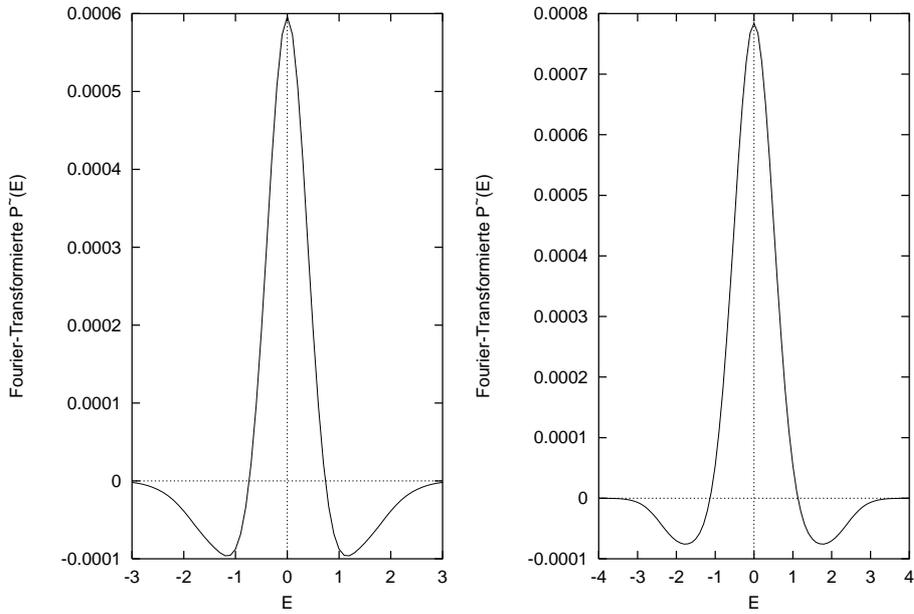


Abbildung 5.7: Differenz-Dichte $\tilde{A}(\mathbf{k} = (\pi, 0), \omega)$ und Fouriertransformierte $\tilde{P}(\omega)$ der Wahrscheinlichkeit $\tilde{P}(\tau)$ des Hubbard- und *Extended*-Hubbard-Modells bei $\beta t = 3$ ($V/t = 0$) und $\beta t = 2$ ($V/t = 0$ und $V/t = 0.5$). Die Differenz-Dichte (oben links) ist nur für das Hubbard-Modell bei $\beta t = 2$ dargestellt.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde das *Extended*-Hubbard-Modell in Ebenen und gekoppelten Ebenen untersucht. Dieses Modell ist gegenüber dem konventionellen Hubbard-Modell um einen Coulomb-artigen Wechselwirkungsterm V erweitert. Mittels numerisch exakter Berechnungen wurde dieses Modell auf diskreten Gittern mit bis zu 72 Plätzen simuliert.

Zu dieser Simulation wurde das großkanonische Quanten-Monte-Carlo-Verfahren verwendet. Dieses Verfahren wurde für das *Extended*-Hubbard-Modell ausführlich dargestellt. Dabei stand die Implementation der erweiterten Wechselwirkung im Mittelpunkt. Die Entkopplung der Wechselwirkungsterme mittels diskreter Hubbard-Stratonovich-Transformation führt im *Extended*-Hubbard-Modell zu acht zusätzlichen Hilfsfeldern, die einen erheblich höheren Rechenzeitbedarf bedeuten. Daher wurde das zum Einsatz kommende Quanten-Monte-Carlo-Programm an die neuesten dem Lehrstuhl Theoretische Physik I zugänglichen Parallelrechner angepaßt. Zur Überprüfung der Implementation der erweiterten Wechselwirkung wurde ein am Lehrstuhl vorhandenes Programm zur exakten Diagonalisierung des Hamilton-Operators des eindimensionalen *Extended*-Hubbard-Modells auf dreidimensionale Systeme erweitert. Die Ergebnisse der QMC-Simulationen für kleine Systemgrößen wurden mit den exakten Ergebnissen verglichen und auf das zu erwartende Skalierungsverhalten mit $\Delta\tau^2$ überprüft. Dabei konnten im Grenzfall $\Delta\tau \rightarrow 0$ die exakten Werte sehr gut reproduziert werden.

Zur Abschätzung der Auswirkungen einer erweiterten Wechselwirkung wurde die Grundzustandsenergie mittels Störungstheorie zweiter Ordnung in t berechnet. Damit konnte ein Phasenübergang des zweidimensionalen *Extended*-Hubbard-Modells identifiziert werden, der oberhalb eines kritischen Werte V_c von einer spingeordneten Phase (“SDW”) in eine ladungsgeordnete Phase (“CDW”) führt. Die analytische berechneten Grundzustandsenergien wurden mit den Ergebnissen der Quanten-Monte-Carlo-Simulation für beide Phasen verglichen und eine

qualitative Übereinstimmung gefunden. Für beiden Phasen wurde eine Molekularfeldnäherung für das *Extended*-Hubbard-Modell durchgeführt und damit der Hamilton-Operator diagonalisiert.

Das zweidimensionale *Extended*-Hubbard-Modell wurde bei inversen Temperaturen von $\beta t = 3$ und $\beta t = 5$ bei Halbfüllung und $\beta t = 3$ bei Dotierung für verschiedene Parametersätze der lokalen und erweiterten Wechselwirkung simuliert. Für die einzelnen Systeme wurden die Spektrale Dichte, die Ladungs- und die Spin-Suszeptibilität mittels des *Maximum Entropy*-Verfahrens analysiert.

Der halbgefüllte Fall $\langle n \rangle = 1$ wurde zunächst für kleine Wechselwirkungen $V < V_c$ untersucht. Dafür wurde vom Hubbard-Modell mit $V/t = 0$ ausgehend die erweiterte Wechselwirkung bis zur Stärke des Austauschintegrals J gesteigert. Das *Extended*-Hubbard-Modell erwies sich für die betrachteten V , in Übereinstimmung mit den Eigenschaften der Modellsubstanzen für die halbgefüllten HTSL, als Mott-Hubbard-Isolator mit antiferromagnetischer Ordnung. Die selbstkonsistente Berechnung der Energielücke aus der SDW-Molekularfeldnäherung erbrachte kein mit den QMC-Daten verträgliches Ergebnis. Eine bessere Übereinstimmung konnte durch Anfitzen des SDW-Spektrums an die exakten Resultate erzielt werden. Dennoch beschreibt die Molekularfeldnäherung die Einteilcheneigenschaften des *Extended*-Hubbard-Modells nur unzureichend. Die spektrale Dichte des *Extended*-Hubbard-Modells wurde mit den experimentellen Daten der winkelaufgelösten Photoemissions-Spektroskopie verglichen. Eine systematische Entwicklung der spektralen Dichte auf der Skala V konnte gezeigt werden. Diese beschreibt die Dispersion der experimentellen Ergebnisse im Vergleich mit dem Hubbard-Modell qualitativ besser.

Die Spinsuszeptibilität des halbgefüllten *Extended*-Hubbard-Modells wurde ausführlich untersucht und zeigt sehr gute Übereinstimmung mit der Spinwellendispersion des Heisenberg-Antiferromagneten. Diese Übereinstimmung ist unter Voraussetzung der Ergebnisse der Störungstheorie zweiter Ordnung gut begründet. Ein numerischer Fit unter der Annahme der Gültigkeit der Spinwellendispersion ergab erstmals einen in QMC gemessenen Wert für die magnetische Austauschwechselwirkung des Hubbard-Modells bei $\beta t = 5$ von $J/t = 0.48 \pm 0.01$ in überraschend guter Übereinstimmung mit dem störungstheoretischen $J = 4t^2/(U - V)$. Die aus der Störungstheorie zweiter Ordnung zu erwartende Renormierung der Austauschwechselwirkung ist sehr klein. Sie konnte daher in den Spektren der Spinanregungen tendenziell, allerdings innerhalb der statistischen Fehlergrenzen, beobachtet werden.

Der Phasenübergang des *Extended*-Hubbard-Modells von der SDW- in die CDW-Phase wurde bei Halbfüllung untersucht. Selbst für große Werte von $V = U/8$ bleibt das EHM dabei antiferromagnetisch geordnet. Simulationen für $V > U/8$ konnten wegen numerischer Probleme in der Nähe des Phasenüberganges nicht

durchgeführt werden. Da für $V > 5U/8$ stabile Simulationen in der CDW-Phase möglich waren, kann für die kritische Wechselwirkung des Phasenüberganges $U/8 < V_c < 5U/8$ angegeben werden. Dies stimmt mit der Abschätzung $U/7 < V_c < U/4$ aus der Störungstheorie zweiter Ordnung und dem atomaren Grenzfall überein. Das Verhalten der Systemgrößen über den Phasenübergang wurde im Rahmen der numerischen Möglichkeiten ausführlich beschrieben. In der ladungsgeordneten CDW-Phase ist die spektrale Dichte des *Extended*-Hubbard-Modells durch eine charakteristische Bandstruktur geprägt, die sich gut mit der renormierten CDW-Molekularfeldnäherung beschreiben läßt. Auch die selbstkonsistent berechnete Einteilchen-Energielücke stimmt erheblich besser mit den Simulationsergebnissen überein als im Fall $V < V_c$. Die in der CDW-Näherung vernachlässigten Fluktuationen scheinen für diese Phase keine bedeutende Rolle zu spielen.

Das dotierte *Extended*-Hubbard-Modell ($U/t = 8, \beta t = 3$) wurde für mittlere Teilchenzahl von $\langle n \rangle \approx 0.91$ und Stärken der erweiterten Wechselwirkung zwischen $V/t = 0.0$ und $V/t = 0.5$ simuliert. Die spektrale Dichte des Hubbard-Modells ($V/t = 0$) zeigt ein schmale, kohärente Struktur (Breite $\sim 2t$), die die Energie $\omega = \mu$ überkreuzt. Für $V/t = 0.25$ und $V/t = 0.5$ läßt sich keine systematische Veränderung beobachten, die außerhalb der Fehler nachweisbar wäre. Ein Vergleich mit experimentellen Daten und bestehenden Simulationen zeigte eine qualitativ richtige Beschreibung der Photoemissionsdaten durch das *Extended*-Hubbard-Modell.

Das *Extended*-Hubbard-Modell wurde in gekoppelten Ebenen für $V/t = 0$ bei $\beta t = 3$ und für $V/t = 0, V/t = 0.25$ und $V/t = 0.5$ bei $\beta t = 2$ und einer lokalen Wechselwirkung $U/t = 8$ simuliert. Dabei wurden Füllungen von $\langle n \rangle = 1.0$ und $\langle n \rangle \approx 0.9$ betrachtet. Die spektrale Dichte wurde diskutiert und eine systematische Aufspaltung zwischen $A(\mathbf{k}, \omega)|_{\mathbf{k}_z=0}$ und $A(\mathbf{k}, \omega)|_{\mathbf{k}_z=\pi}$ gefunden, während die Aufspaltung für einzelne Impulse noch nicht numerisch signifikant war. Die Aufspaltung wurde mit experimentellen Ergebnissen und bestehenden numerischen Studien verglichen und eine gute Übereinstimmung der gefundenen Aufspaltung von $\sim t_\perp$ mit den Ergebnissen aus FLEX- und QMC-Rechnungen gefunden. Kohärenz und Inkohärenz des Zwischenebenentunnelns im *Extended*-Hubbard-Modell wurden mittels eines diagnostischen Operators untersucht. Auch dabei wurde kohärentes Verhalten gefunden.

Zum Abschluß soll ein Ausblick auf eine mögliche weitere Behandlung des Themas gegeben werden. Die im Rahmen dieser Diplomarbeit gesammelten Daten sind so zahlreich und über ein so großen Parameterraum verteilt, daß eine umfassende Behandlung jedes einzelnen Aspektes nicht möglich war. Viele der simulierten Systeme fanden daher wenig oder keinen Platz. Auch die hier besprochenen Aspekte können mit zusätzlichem Aufwand noch erheblich mehr Aussagekraft gewinnen. Dies betrifft vor allem die analytische Fortsetzung der QMC-Daten auf die reelle

Frequenzachse durch die *Maximum Entropy*-Methode. Beispielsweise ist durch die Verwendung zusätzlicher Randbedingungen hier eine deutlich höhere Auflösung zu erwarten. Eine Auswertung der physikalisch relevanten Breiten der Peaks der Spektren und eine Fehlerauswertung der Peakpositionen sind dabei zur Zeit im Entstehen. Damit wären z.B. eine systematische Auswertung der magnetischen Austauschwechselwirkung J für verschiedene Stärken der lokalen und erweiterten Wechselwirkung oder eine quantitative Analyse der Aufspaltung der spektralen Dichte bei gekoppelten Ebenen mit bestehendem Datenmaterial möglich.

Anhang A

Übersicht der QMC-Simulationen

Gitter	βt	U/t	V/t	$\langle n \rangle$	$\langle sign \rangle$
8×8	3	8	0.25	1.0	0.932
8×8	3	8	0.25	0.988	0.773
8×8	3	8	0.25	0.911	0.216
6×6	5	8	0	1.0	1.000
6×6	5	8	0.25	1.0	0.835
6×6	5	8	0.50	1.0	0.564
6×6	3	8	0.25	1.0	1.000
6×6	3	8	0.25	0.912	0.348
6×6	3	8	0.50	0.918	0.180
6×6	3	8	-0.50	1.0	0.856
6×6	3	8	-0.50	0.919	0.243
6×6	3	6	0.00	1.0	1.000
6×6	3	6	0.1875	1.0	0.931
6×6	3	6	0.375	1.0	0.771
6×6	3	4	0.00	1.0	1.000
6×6	3	4	0.125	1.0	0.989
6×6	3	4	0.25	1.0	0.936
6×6	3	4	0.5	1.0	0.599
6×6	3	4	1.25	1.0	0.784
6×6	3	4	1.5	1.0	0.967
6×6	3	4	2.0	1.0	0.997
6×6	3	4	2.0	0.900	0.389

Tabelle A.1: Tabellarische Übersicht der QMC-Simulationen in einer Ebene

Gitter	βt	U/t	V/t	$\langle n \rangle$	$\langle sign \rangle$
$6 \times 6 \times 2$	3	8	0.0	1.0	1.0
$6 \times 6 \times 2$	3	8	0.0	0.90	0.364
$6 \times 6 \times 2$	3	8	0.25	1.0	0.908
$6 \times 6 \times 2$	2	8	0.0	1.0	1.0
$6 \times 6 \times 2$	2	8	0.0	0.896	0.958
$6 \times 6 \times 2$	2	8	0.25	1.0	0.983
$6 \times 6 \times 2$	2	8	0.25	0.904	0.872
$6 \times 6 \times 2$	2	8	0.5	1.0	0.937
$6 \times 6 \times 2$	2	8	0.5	0.910	0.731

Tabelle A.2: Tabellarische Übersicht der QMC-Simulationen in gekoppelten Ebenen.

Anhang B

Darstellung der ersten Brillouin-Zone

Alle in dieser Diplomarbeit dargestellten Spektren durchlaufen den Impulsraum auf dem sogenannten Standard-Weg durch die erste Brillouin-Zone. Dieser Weg ist in Abbildung B.1 dargestellt. Er umfaßt die Hochsymmetriepunkte des Impulsraumes: $\Gamma(0, 0)$, $X(\pi, 0)$, $M(\pi, \pi)$ und $\Sigma(\pi/2, \pi/2)$. Der Σ -Punkt kann jedoch in den hier simulierten 6×6 -Gittern nicht dargestellt werden.

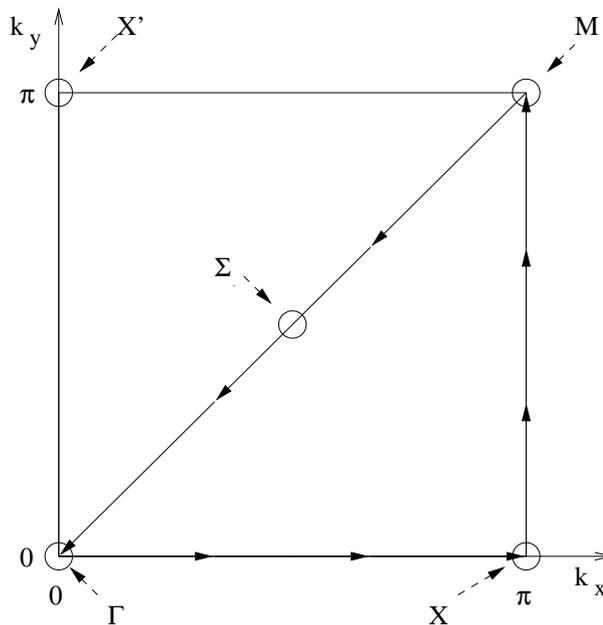


Abbildung B.1: Standardweg durch die erste Brillouin-Zone.

Literaturverzeichnis

- [And97] P. W. Anderson, S. Strong, *Science* **261**, 337 (1993).
- [And95] O. K. Andersen, A. I. Liechtenstein, O. Jepsen, F. Paulsen, J. Phys. Chem. Solids **56**, 1573 (1995).
- [And97] P. W. Anderson, *The theory of superconductivity in high- T_c cuprates*, Princeton University Press, Princeton (1997).
- [Ash76] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia (1976).
- [Bed86] J. G. Bednorz, K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [Bor95] C. Borgs, J. Jedrezejewsky, R. Kotecky, cond-mat/9501097.
- [Bre95] W. Brenig, *Phys. Rep.*, **251**, 153 (1995).
- [Bri97] J. van den Brink, R. Eder, G. A. Sawatzky, *Europhys. Lett.* **37**, 471 (1997).
- [Bru93] P. A. Brühwiler *et al.*, *Phys. Ref. Lett.* **71**, 3721 (1993).
- [Bye61] N. Byers, C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **7**, 46 (1961).
- [Cha93] S. Chakravarty *et al.*, *Science* **261**, 337 (1993).
- [Cha97] B. Chattopadhyay, D. M. Gaitonde, *Phys. Rev. B* **55**, 15364 (1997).
- [Cla95] D. G. Clarke, S. P. Strong, cond-mat/9510168 (1995).
- [Cyr92] M. Cyrot, D. Pavuna, *Introduction to superconductivity and high T_c -Materials*, World Scientific, Singapur (1992).
- [Dag94] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 3 (1994).
- [Dar96] A.-M. Daré, Y. M. Vilk, A. M.-S. Treblay, cond-mat/9602083 (1996).
- [Dem95] E. Demler, S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4126 (1995).

- [Din95] H. Ding *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 2784 (1995).
- [Dop90] G. Dopf, A. Muramatsu und W. Hanke, Phys. Rev. B **41**, 9264 (1990).
- [Dop91] G. Dopf, *Dissertation*, Würzburg (1991).
- [Ede96] R. Eder, J. van den Brink, G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **54**, R732 (1996).
- [Elk79] K. Elk, W. Gasser, *Die Methode der Greenschen Funktionen in der Festkörperphysik*, Akademie Verlag, Berlin (1979).
- [Eme87] V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
- [End96] H. Endres, *Dissertation*, Würzburg 1996.
- [Eve97] H.-G. Evertz, cond-mat/9707221 (1997).
- [Fet71] A. L. Fetter, J. D. Walecka: *Quantum Theory of Many Particle Systems*, New York (1971).
- [Fra94] E. Fradkin, *Field theories of condensed matter systems*, Addison-Weseley, New York (1994).
- [Ful95] P. Fulde, *Electron correlations in molecules and solids*, Springer, New York (1995).
- [Gou88] H. Gould, J. Tobochnik, *An introduction to computer simulation methods*, Addison-Wesley, New York (1988).
- [Gra96] S. Grabowski, *Dissertation*, Berlin (1996)
- [Gra97] S. Grabowski *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 2784 (1997).
- [Gro96] C. Gröber, *Diplomarbeit*, Würzburg (1996).
- [Gro98] C. Gröber *et al.* ,in Vorbereitung.
- [Hen98] C. L. Henley, Phys. Rev. Lett. **80**, 3590 (1998)
- [Het94] R. E. Hetzel, W. von der Linden, W. Hanke, Phys. Rev. B **50**, 4159 (1994).
- [Hil98] G. Hildebrand, *Dissertation*, Würzburg (1998).
- [Hub63] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **276**, 238 (1963).
- [Hir83] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **28**, 4059 (1983).
- [Hir84] J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **53**, 2327 (1984).

- [Jan95] A.-M. Janner, *et al.*, Phys. Rev. B **52**, 17158 (1995).
- [Jar96] M. Jarrell, J. E. Gubernatis, Phys. Rep. **269**, 133 (1996).
- [Jay95] E. T. Jaynes, *Probability Theory: The Logic of Science*, <ftp://www.wustl.edu> (1995).
- [Ken95] R. D. Kenway, *High Performance Computing in Physics*, University of Edinburgh (1995).
- [Leg87] A. J. Legget *et al.*, Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987).
- [Leg98] A. J. Legget, Science **279**, 1157 (1998); A. J. Legget, private Mitteilung.
- [Lie95] A. I. Liechtenstein *et al.*, cond-mat/9509101 (1995).
- [Lin95] W. von der Linden, R. Preuss, W. Hanke, J. Phys. **8**, 3881 (1996).
- [Lof92] R. W. Lof *et al.*, Phys. Rev. Lett. **68**, 3924 (1992).
- [Loh90] E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, in *Elektronic Phase Transitions*, herausgegeben von W. Hanke und Y. Kopaev, Elsevier, New York (1990)
- [Mar96] D. S. Marshall *et al.*, Phys. Rev. Lett. **76**, 4841 (1996).
- [Met53] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [Mol98] K. Molder *et al.*, Science **279**, 1194 (1998).
- [Mun97] T. Munehisa, Y. Munehisa, J. Phys. Soc. Jpn **66**, 3876 (1997).
- [Nol92] W. Nolting, *Grundkurs: Theoretische Physik*, Zimmerman-Neufang, Ulmen (1992).
- [Pre92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling,, B. P. Flannery, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press (1992).
- [Pre95] R. Preuss, W. Hanke, W. von der Linden, Phys. Rev. Lett. **75**,7 (1995).
- [Pre96] R. Preuss, *Dissertation*, Würzburg (1996).
- [Pre97] R. Preuss, W. Hanke, C. Gröber, H. G. Evertz, Phys. Rev. Lett. **79**,1122 (1997).
- [Rab97] S. Rabello, H. Kohn, E Demler, S.-C. Zhang, cond-mat/97007027 (1997).

- [Reg88] J. D. Reger, A. P. Young, Phys. Rev. B **37**, 5978 (1989).
- [San95] R. R. dos Santos, Phys. Rev. B, **51**, 15540 (1995).
- [Sca94] R. T. Scalletter *et al.*, Phys. Rev. B **50**, 13419 (1994).
- [Sch89] J. R. Schrieffer, X. G. Wen, S. C. Zhang, Phys. Rev. B **39**, 11663 (1989).
- [Sch98] H.-B. Schüttler, C. Gröber, H. G. Evertz, W. Hanke, *preprint*, cond-mat/9805133 (1998).
- [Sha48] C. E. Shannon, Bell Systems Tech. J., **27**, 379, 623 (1948).
- [She95] Z. X. Shen, D. S. Dessau, Phys. Rep., **253**, 1 (1995); Z. X. Shen *et al.*, Science **267**, 343 (1995).
- [Ski90] J. Skilling in: B. Buck, V. A. Macaulay, *Maximum Entropy in Action*, Oxford Science, Oxford (1990).
- [Su98] G. Su, M. Suzuki, cond-mat/9801243 (1998).
- [Suz76] M. Suzuki, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).
- [Wel95] B. O. Wells, Phys. Rev. B **74**, 964 (1995).
- [Zac96] M. Zacher, *Diplomarbeit*, Würzburg (1996).
- [Zac98] M. Zacher *et al.*, in Vorbereitung (1998).
- [Zha88] F. Zhang, T. Rice, Phys. Rev. B **37** 3759 (1988).
- [Zha97] S.-C. Zhang, Science, **275**, 1089 (1997).