Institut für Theoretische Physik
Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
Technische Universität Dresden

Variationsverfahren zur Untersuchung von Grundzustandseigenschaften des Ein-Band Hubbard-Modells

Diplomarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom-Physiker

vorgelegt von

Jan Eichhorn
geboren am 3. Mai 1975 in Weimar

Dresden 2001

Eingereicht am 18. Juni 2001

1. Gutachter: Prof. Dr. K. Becker

2. Gutachter: Prof. Dr. P. Fulde

Kurzfassung:

Für das Ein–Band Hubbard–Modell werden mit Hilfe unterschiedlicher Varianten eines neuen Variationsverfahrens statische Grundzustandseigenschaften wie die Energie und die Untergittermagnetisierung untersucht. Das Verfahren wird schrittweise durch Berücksichtigung zusätzlicher Fluktuationen verbessert, wodurch in einer und in zwei Dimensionen die Energie sehr gut beschrieben werden kann. Die Methode wird zunächst am Fall $d = 1$ ausführlich diskutiert und es werden Erweiterungen für $d = 2$ aufgezeigt. Insbesondere sollte mit Hilfe einer modifizierten Ansatz–Wellenfunktion auch für die Magnetisierung eine Beschreibung des Quanten–Phasenübergangs im zweidimensionalen Fall bei endlicher Korrelationsstärke möglich sein.

Abstract:

Using different modifications of a new variational approach, statical ground-state properties of the one-band Hubbard model such as energy and staggered magnetisation are calculated. By taking into account additional fluctuations, the method ist gradually improved so that a very good description of the energy in one and two dimensions can be achieved. After a detailed discussion of the application to $d = 1$, extensions for two dimensions are introduced. By use of a modified version of the variational ansatz in particular a description of the quantum phase transition for the magnetisation should be possible.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Ein vielgenutztes und erfolgreiches Verfahren für die Beschreibung elektronischer Eigenschaften von Festkörpern, mit dem eine ganze Reihe von Phänomenen richtig beschrieben werden, ist die sogenannte Bänder–Theorie des Festkörpers. Diese Theorie war unter anderem deshalb so erfolgreich, weil sie eine große Anzahl von Materialien korrekt als Metall oder Isolator klassifizieren konnte. Es wurde allerdings klar, daß die Methode auch Fehlprognosen liefert: für bestimmte Materialien wird eine metallische Leitfähigkeit vorausgesagt, obwohl sie experimentell ein nichtleitendes Verhalten zeigen. Als Metall wird in diesem Zusammenhang ein Material bezeichnet, dessen Leitfähigkeit nicht verschwindet wenn sich die Temperatur dem absoluten Nullpunkt nähert.

Als Bänder–Theorie bezeichnet man eine effektive Einteilchen–Theorie, bei der die Elektron–Elektron–Wechselwirkung nur im Rahmen einer Faktorisierungsnäherung berücksichtigt wird (z. B. Hartree–Fock, Dichtefunktionaltheorie). Mit dieser Näherung erhält man für einen kristallinen Stoff eine metallische Leitfähigkeit, wenn die Zustandsdichte an der Fermi–Kante ϵ_F verschieden von Null ist: $\rho(\epsilon_F) \neq 0$. Mit anderen Worten, die Fermi–Energie liegt gerade innerhalb eines Bandes und dieses ist demzufolge nur teilweise gefüllt. Bei einer ungeraden Anzahl von Elektronen pro Elementarzelle ist das Band nur teilweise gefüllt, also gilt $\rho(\epsilon_F) \neq 0$ und die Substanz sollte daher ein Metall sein.

Diese Vorhersage erwies sich allerdings für eine Reihe von Stoffen als falsch. Eines der ältesten und deutlichsten Beispiele dafür ist das Übergangsmetalloxid CoO. Die Verbindung hat entsprechend obigem Kriterium eine ungerade Anzahl von Elektronen in der Elementarzelle und sollte daher ein metallischer Leiter sein. Experimentell fand man aber, daß CoO ein sehr guter Isolator ist.

Es wird heute allgemein anerkannt, daß die Ursache für den Fehlschlag des Bänder–Modells in diesem und in anderen Fällen eine ungenügende Behandlung der Elektron–Elektron–Wechselwirkung ist. Solcherart Effekte bezeichnet man im allgemeinen als Korrelationseffekte. Damit sind alle elektronischen Effekte gemeint, die nicht innerhalb einer effektiven Einteilchennäherung für die Elektronen erklärt werden können.

Auch die nichtmetallische Leitfähigkeit des CoO ist ein Korrelationseffekt.

Isolatoren dieser Art werden als Mott–Hubbard–Isolatoren bezeichnet. Daß bei der Erklärung dieses Phänomens Korrelationseffekte eine Rolle spielen, kann man sich mit folgender vereinfachter Überlegung veranschaulichen:

Wenn der Energie–Aufwand, den die Elektronen zur Überwindung der Coulomb–Abstoßung aufbringen müssen, größer wird als der Energiegewinn durch Delokalisierung, dann werden ausgedehnte Zustände energetisch ungünstig und es tritt eine kollektive Lokalisierung ein. Ein stark vereinfachtes Modell, das die Konkurrenz zwischen diesen beiden Effekten (Itineranz und Lokalisierung) beschreibt, ist das Hubbard–Modell:

$$\hat{\mathrm{H}}_{\mathrm{HUB}} = -t \sum_{\langle i,j\rangle\sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} \tag{1.1}$$

Der erste Term beschreibt das Hüpfen der Elektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen und modelliert also die Tendenz zur Delokalisation der Festkörperelektronen (bei $t > 0$). Die Größe t wird in erster Näherung bestimmt durch das Tight–Binding Matrixelement T_{ij}, das den Überlapp der Wellenfunktionen zwischen nächsten Nachbarplätzen beschreibt. Der zweite Term, der sogenannte Korrelationsterm, enthält den wesentlichen Beitrag der abstoßenden Coulomb–Wechselwirkung ($U > 0$). Die Coulombabstoßung zwischen den Gitterelektronen ist wegen Abschirmungseffekten nur für kurze Entfernungen zwischen den beteiligten Elektronen maßgeblich. Dies ist z. B. der Fall, wenn sich zwei Elektronen in demselben, räumlich stark lokalisierten Orbital befinden (z. B. $4f$, $5f$ aber auch schon d–Orbitale, wie im Beispiel des CoO). Daher wirkt der U–Term nur auf Elektronen am selben Gitterplatz.

Bei Halbfüllung (d. h. ein Elektron pro Platz) beschreibt das Modell einen metallischen Leiter für kleine Verhältnisse U/t. Der Energiegewinn durch Delokalisierung ist dann viel größer als die aufzuwendende Korrelationsenergie U und die Elektronenzustände sind über das gesamte Gitter ausgedehnt.

Im anderen Grenzfall großer U/t besteht der Grundzustand (bei Halbfüllung) in erster Ordnung nur aus einfach besetzten Plätzen. Jedes Hüpfen würde eine Doppelbesetzung erzeugen und damit einen großen Energiebetrag U kosten. Die Elektronen sind also an den Gitterplätzen lokalisiert und können sich nicht bewegen – das System ist isolierend.

Zwischen diesen beiden Grenzfällen des Grundzustandes findet ein Quanten–Phasenübergang statt. Dieser sogenannte Mott–Hubbard–Übergang ist also eine durch die Elektron–Elektron–Wechselwirkung verursachte, kollektive Lokalisierung der Elektronen verbunden mit einem Übergang in den nichtleitenden Zustand (im Unterschied z. B. zu dem durch Unordnung verursachten Übergang zum Nichtleiter, der als Anderson–Lokalisierung bezeichnet wird).

Experimentell läßt sich ein Mott–Hubbard–Übergang z. B. bei Vergrößerung der Gitterkonstanten beobachten. Das Hüpfmatrixelement t wird kleiner und damit das Verhältnis U/t größer, solange bis ein kritischer Wert U_c/t erreicht ist. Nach unserem stark vereinfachten Bild sollte der Übergang dann auftreten, wenn U/t die Größenordnung 1 erreicht, also die beiden Energien vergleichbar wären. Im Experiment kann die Gitterkonstante in einem Mott–Isolator, der sich nahe genug am Übergangspunkt befindet, z. B. durch hohen Druck verkleinert und die Substanz damit über diese Metall–Isolator–Schwelle gebracht werden, so daß sie metallische Leitfähigkeit zeigt. In umgekehrter Richtung kann die Gitterkonstante z. B. durch Dotierung mit geeigneten Atomen vergrößert werden und so ein Leiter zum Mott–Isolator transformiert werden.

Der isolierende Zustand bei unendlichem U ist theoretisch 2^L–fach entartet, wenn L die Anzahl der Gitterplätze ist. In Störungstheorie nach t/U ergibt sich zusätzlich eine antiferromagnetische Austausch–Wechselwirkung der Spins, so daß bei Halbfüllung ein antiferromagnetisch geordneter Grundzustand folgt. Der oben beschriebene Phasenübergang sollte sich also auch in einer Änderung der magnetischen Ordnung des Grundzustandes bemerkbar machen.

Trotz seiner konzeptionellen Einfachheit stellt das Hubbard–Modell ein kompliziertes Vielteilchen–Problem dar, welches im allgemeinen nicht exakt gelöst werden kann[1]. Daher wurden seit der Einführung des Modells eine Vielzahl von Näherungsverfahren benutzt, um ein qualitativ korrektes Bild von der Physik des Modells und insbesondere des Mott–Hubbard–Übergangs zu erhalten. Neben effektiven Einteilchen–Modellen (wie z. B. Hartree–Fock–Theorie & LDA), die Korrelationseffekte nur ungenügend beschreiben können, gibt es eine Reihe echter Vielteilchentechniken, mit denen Ergebnisse für das Hubbard–Modell gewonnen werden können. Eine von Hubbard selbst verwendete Methode, mit der als erstes ein Mott–Metall–Isolator–Übergang berechnet werden konnte, basiert auf der Entkopplung von Greenschen Funktionen (sog. „Green–Function Decoupling Method"). Diese Methode hat jedoch diverse Defizite, so zeigt z. B. die metallische Phase kein Fermi–Flüssigkeits–Verhalten.

Eine weitere Klasse von erfolgreichen Näherungen sind Variationsansätze. Eine einfache Variante ist z. B. die Gutzwiller–Wellenfunktion:

$$\big|GWF\big\rangle = g^{\hat{D}}\big|\text{Fermi–See}\big\rangle \tag{1.2}$$

Dabei ist $\hat{D} = \sum_i \hat{\mathrm{n}}_{i\uparrow}\,\hat{\mathrm{n}}_{i\downarrow}$ ein Operator für Doppelbesetzungen und $\big|\text{Fermi–See}\big\rangle$ die Slater–Determinante, die den Fermi–See beschreibt. Gutzwillers Idee war, daß durch den Exponentialfaktor das Gewicht der Zustände mit Doppelbesetzungen reduziert wird und somit Ladungsfluktuationen im Falle endlicher U

[1]Das einzige exakte Resultat stammt von Lieb und Wu [11], die mit Hilfe eines Bethe–Ansatzes den exakten Grundzustand des eindimensionalen Hubbard–Modells berechnen konnten.

effektiv verringert werden. Der Variationsparameter g wird dabei durch Minimierung der Grundzustandsenergie bestimmt.

In der vorliegenden Arbeit wird ebenfalls ein neues Variationsverfahren benutzt, um den Grundzustand des Hubbard–Modells zu untersuchen. Im Unterschied zum Gutzwiller–Ansatz wird dabei jedoch der umgekehrte Weg beschritten. Statt Ladungsfluktuationen in einem Fermi–See unkorrelierter Elektronen zu unterdrücken, startet man mit einem Zustand völlig lokalisierter Elektronen (dem Néel–Zustand) und fügt Ladungs– und Spinfluktuationen hinzu. Dabei werden Wechselwirkungen dieser Fluktuationen mit einem neuen, selbstkonsistenten Verfahren in der Art einer Molekularfeldtheorie beschrieben. Die Gleichungen, die zur Bestimmung der Variationsparameter der Ansatz–Wellenfunktion verwendet werden, haben ihren Ursprung im Kumulantenformalismus (s.a. Kap. 2.4), der sich für stark korrelierte Systeme als sehr geeignetes theoretisches Werkzeug erwiesen hat.

Ziel dieser Arbeit ist es, zu testen, ob mit diesem Variationsverfahren die Physik des Hubbard–Modells im gesamten Parameterbereich $U/t \in [0, \infty)$ richtig beschrieben werden kann. Es soll insbesondere versucht werden, die magnetischen Eigenschaften auch in den beiden Grenzfällen starker und schwacher Korrelationen korrekt zu modellieren und damit das Verhalten des Systems am quantenkritischen Punkt des Übergangs von der magnetisch ungeordneten zur geordneten Phase zu beschreiben. Aussagen über den eigentlichen Mott–Metall–Isolator–Übergang in der elektrischen Leitfähigkeit lassen sich aus diesen Betrachtungen nur indirekt ableiten.

Die Arbeit ist wie folgt gegliedert. In Kapitel 2 werden die Grundlagen des Hubbard–Modells (2.1) und des verwendeten Verfahrens (2.2) dargelegt. Anschließend wird auf notwendige Vereinfachungen (2.3) und den theoretischen Hintergrund (2.4) der Methode eingegangen. Die Anwendung des Verfahrens auf das eindimensionale Hubbard–Modell wird in Kapitel 3 beschrieben. In Kapitel 4 wird dann ein modifizierter Ansatz vorgestellt, der die Beschreibung der ungeordneten Phase verbessert. Kapitel 5 präsentiert erste Ergebnisse für den zweidimensionalen Fall. Abschließend gibt Kapitel 6 eine kurze Zusammenfassung der Resultate und einen Ausblick auf weiterführende Überlegungen.

2 Modelle und Methode

In diesem Kapitel soll die in dieser Arbeit verwendete Methode näher dargelegt werden. Zunächst wird das Objekt der Untersuchung, das Ein–Band Hubbard–Modell, näher beleuchtet. Dann wird der verwendete Ansatz vorgestellt. Im dritten Abschnitt werden die notwendigen Näherungen bei Berechnungen in unendlichen Systemen gezeigt und es wird die Verfahrensweise an einer einfachen Beispielrechnung erläutert. Im letzten Abschnitt wird dann ausführlich auf die Motivation und die zugrundeliegenden Ideen eingegangen, die zu diesem Verfahren geführt haben. Dabei werden auch dessen Vorteile klar ersichtlich.

2.1 Das Hubbard–Modell

Da die konkrete Gestaltung des Lösungsverfahrens nicht unwesentlich von den Eigenschaften des zu untersuchenden Modells abhängt, sollen diese im Folgenden kurz zusammengestellt werden.

2.1.1 Beschreibung des Hubbard–Modells

Der folgende unabhängig voneinander von Gutzwiller, Hubbard und Kanamori vorgeschlagene Hamiltonoperator wurde ursprünglich benutzt, um den Mechanismus des Ferromagnetismus in Übergangsmetallen zu untersuchen. Das Modell wird aber heute auf unterschiedliche physikalische Fragestellungen angewendet und wird im allgemeinen alleine nach Hubbard benannt.

$$\hat{\mathrm{H}}_{\mathrm{HUB}} = \hat{\mathrm{H}}_U + \hat{\mathrm{H}}_t \tag{2.1}$$

wobei

$$\hat{\mathrm{H}}_U = U \sum_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} \qquad \text{Korrelationsterm} \tag{2.2}$$

$$\hat{\mathrm{H}}_t = \sum_{ij\sigma} T_{ij}\; c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} \qquad \text{kinetischer Term} \tag{2.3}$$

Es handelt sich um ein elektronisches Modell mit einem Orbital pro Gitterplatz, in dem sich maximal zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin befinden können. Gemäß der in der Vielteilchen–Quantenmechanik üblichen Darstellungsweise sind $c^\dagger_{i\sigma}$ und $c_{i\sigma}$ die Erzeugungs– resp. Vernichtungsoperatoren für ein Elektron mit Spin σ im atomaren Orbital[1] am Platz i. $n_{i\sigma} = c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma}$ ist der zugehörige Teilchenzahloperator. Die Operatoren $c^\dagger_{i\sigma}$ und $c_{i\sigma}$ erfüllen die für Fermionenstatistik gültigen Antikommutator–Relationen.

Der Hamiltonoperator läßt sich in einer Tight–Binding–Näherung [1] aus dem allgemein üblichen Festkörper–Modell (Born–Oppenheimer–Näherung etc.) ableiten [13]. Hubbard machte zwei Annahmen, die zur einfachen Struktur des Modells führen. Zum einen wird angenommen, daß nur ein schmales Band an der Fermikante existiert und die anderen Bänder weit (im Vergleich zur Bandbreite) davon entfernt sind. Somit sind Inter–Band Prozesse durch die Elektron–Elektron Wechselwirkung ausgeschlossen. Zum anderen wird nur das dominierende intraatomare Matrixelement $V_{ii,ii} =: U$ dieser Wechselwirkung berücksichtigt. Das heißt, es gibt nur dann eine Wechselwirkung zwischen Elektronen, wenn diese sich am selben Gitterplatz befinden.

Das Modell enthält vergleichsweise wenige Parameter und ist u.a. deswegen „das“ Standard–Test–Modell für Lösungsverfahren und Näherungen im Bereich stark korrelierter Elektronensysteme. Es sollen im Folgenden die expliziten und impliziten Parameter aufgezählt und die in dieser Arbeit betrachteten Bereiche abgesteckt werden.

Die expliziten Parameter sind:

- die Stärke der Wechselwirkung U: In Anlehnung an reale Systeme sei die Wechselwirkung abstoßend ($U > 0$). Ziel der Arbeit ist eine Beschreibung des Hubbard–Modells im gesamten Parameterbereich $U \in [0, \infty)$, d.h. sowohl für schwache als auch für starke Korrelationen.

[1] strenggenommen für einen Wannier–Zustand, zentriert am Gitterplatz i

- die Hüpfmatrixelemente T_{ij}: T_{ij} ist das Überlapp–Integral[2] zwischen den Wannierfunktionen an den Gitterplätzen i und j. Es wird nur der Fall identischer Gitterplätze betrachtet und eine Hybridisierung nur zwischen nächsten Nachbarn zugelassen, so daß gilt:

$$T_{ij} = \begin{cases} -t & \forall \langle i,j \rangle \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

- die Dimension d und die Geometrie der Gitterstruktur: Unsere Betrachtungen bleiben auf eine Kette ($d = 1$) bzw. ein quadratisches[3] Gitter ($d = 2$) beschränkt

Üblicherweise werden die Energien auf die Bandbreite W bezogen, die für den Fall ohne Coulomb–Wechselwirkung ($H_U = 0$) proportional zu t ist. Da für die Stärke der Korrelationen nur das Verhältnis U/t der on–site Coulomb–WW–Energie zur Hybridisierungsenergie relevant ist, wird der Einfachheit halber $t = 1$ gesetzt und im weiteren in dieser Arbeit meist unterdrückt.

Weiterhin gibt es noch folgende implizite Parameter:

- die Dichte der Elektronen mit Spin σ ($\sigma =\uparrow,\downarrow$), $n_\sigma = (1/L) \sum_i \langle\, \hat{\mathrm{n}}_{i\sigma} \,\rangle = N_\sigma/L$ mit L als Anzahl der Gitterplätze: Da die Gesamtteilchenzahl pro Spinrichtung eine Erhaltungsgröße des Hamiltonoperators (2.1) ist, bleibt auch diese Dichte konstant. In dieser Arbeit wird das Hubbard–Modell ausschließlich bei Halbfüllung ($n_\uparrow = n_\downarrow = 1/2$) betrachtet.
- die Temperatur k_bT: Es wird ausschließlich der Grundzustand($T = 0$) betrachtet.

2.1.2 Physikalische Observable

Zur Charakterisierung des Grundzustandes sollen hauptsächlich zwei physikalische Observable herangezogen werden. Das ist zum einen die Grundzustandsenergie pro Teilchen ε und als Indikator für die magnetischen Eigenschaften die

[2] $T_{ij} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \varepsilon(\mathbf{k})$

[3] Die Gittergeometrie in zwei Dimensionen ist durchaus relevant für die Physik des Systems. Entscheidend ist dabei, ob sich das Gitter so in zwei Untergitter aufteilen läßt, daß ein Platz des einen Untergitters nur Plätze des jeweils anderen als nächste Nachbarn hat (engl. bipartite lattice).

Untergittermagnetisierung. Durch den Vergleich dieser Größen mit bekannten Aussagen kann dann eine erste Einschätzung gegeben werden, wie gut der mit dem vorgeschlagenen Verfahren berechnete Zustand den wahren Grundzustand des Hubbard–Modells approximiert.

Mit E_g bezeichnen wir die Gesamtenergie des Grundzustandes. Die Grundzustandsenergie pro Teilchen ε ergibt sich aus:

$$\varepsilon = \frac{E_g}{L} = \frac{1}{L} \frac{\langle \Psi | \hat{\mathrm{H}} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \tag{2.4}$$

Dabei ist L die Anzahl der Gitterplätze, was bei Halbfüllung gerade der Teilchenzahl entspricht.

ε ist jedoch häufig unspezifisch. So können zwei tiefliegende Eigenzustände mit fast gleichen Energien ganz verschiedene Physik beschreiben [7, S.124]. Um etwas präziser sein zu können und wenigstens ein Minimum an Aussagen über Spinkorrelationen in unseren Lösungen zu erhalten, betrachten wir daher noch die Magnetisierung auf einem Untergitter. Zur Definition dieser manchmal auch als „staggered“ Magnetisierung bezeichneten Größe wird das Gitter in zwei Untergitter A und B aufgeteilt und man setzt:

$$\mu_{stagg} := \begin{cases} \langle \hat{\mathrm{n}}_{i\uparrow} - \hat{\mathrm{n}}_{i\downarrow} \rangle & i \in A, \\ \langle \hat{\mathrm{n}}_{i\downarrow} - \hat{\mathrm{n}}_{i\uparrow} \rangle & i \in B \end{cases} \tag{2.5}$$

Aus Symmetriegründen ist es ausreichend, nur ein Untergitter zu betrachten. Wir wählen die Untergitter so, daß μ_{stagg} positiv ist. In der späteren Rechnung erweist es sich als vorteilhaft, folgende äquivalente Form für μ_{stagg} zu verwenden

$$\mu_{stagg} \quad = \quad \big\langle (\hat{\mathrm{n}}_{i\uparrow} + \hat{\mathrm{n}}_{i\updownarrow}) - (\hat{\mathrm{n}}_{i\downarrow} + \hat{\mathrm{n}}_{i\updownarrow}) \big\rangle \tag{2.6}$$

wobei als Abkürzung $\hat{\mathrm{n}}_{i\updownarrow} := \hat{\mathrm{n}}_{i\uparrow}\, \hat{\mathrm{n}}_{i\downarrow}$ als Operator für die Doppeltbesetzung am Gitterplatz i verwendet wurde.

2.1.3 Bekannte Eigenschaften und Grenzfälle des Modells

Bisher gibt es nur wenige exakte Resultate für das Hubbard–Modell. In einer Dimension konnten Lieb & Wu [11] unter Nutzung eines Bethe–Ansatzes [3] die Grundzustandsenergie, die Wellenfunktion und das chemische Potential ausrechnen und damit zeigen, daß es im Grundzustand keinen Mott–Metall–Isolator–Übergang für $U_c > 0$ gibt (siehe unten).

Die beiden Grenzfälle am Rande des Parameterbereiches $U/t \in [0, \infty]$ liefern jedoch Anhaltspunkte, in welchem Rahmen sich die im Modell enthaltene Physik abspielt.

- Im Grenzfall $U/t = 0$ reduziert sich das Hubbard–Modell zu dem eines freien Elektronengases. Die Grundzustandsenergie pro Elektron ist:

$$\varepsilon_0 = E_g^{(0)}/L = \begin{cases} -4\ t/\pi & \text{in 1d} \\ -16\ t/\pi^2 & \text{in 2d} \end{cases} \tag{2.7}$$

  Das System ist bei Halbfüllung bekanntermaßen metallisch und es gibt keinerlei magnetische Ordnung. Die Untergittermagnetisierung sollte also verschwinden: $\mu_{stagg} = 0$

- Für sehr starke Korrelationen, (d. h. etwa $U/t \gtrsim 10$) wird das System im halbgefüllten Fall ($\langle \hat{\mathrm{n}}_i \rangle = 1$) nichtmetallisch. Auf jedem Gitterplatz befindet sich gerade ein Elektron, da doppeltbesetzte Plätze aufgrund des U–Terms energetisch ungünstig sind. Das Hubbard–Modell läßt sich dann nach kleinem Hüpfterm $\hat{\mathrm{H}}_t$ störungstheoretisch entwickeln und reduziert sich auf das antiferromagnetische Heisenberg–Modell [13, S.209]:

$$\begin{aligned} \hat{\mathrm{H}}_{\mathrm{HEIS}} &= J \sum_{<ij>} \mathbf{S_i} \cdot \mathbf{S_j}, \quad J > 0 \\ &= J \sum_{<ij>} S_i^z S_j^z \;+\; \frac{J}{2} \sum_{<ij>} \left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) \end{aligned} \tag{2.8}$$

  Die Kopplungsstärke J ergibt sich dabei aus den Parametern des Hubbard–Modells zu: $J = 4t^2/U$.

  Der erste Term in der angegeben Zerlegung (2.8), der sogenannte Ising–Anteil[4], produziert eine antiferromagnetische Néel–Ordnung, während der zweite Term Spin–Fluktuationen erzeugt. Der Hamiltonoperator (2.8) beschreibt einen antiferromagnetischen Isolator.

Für den Fall von Halbfüllung entspricht der Übergang von der Situation mit schwachen zur Situation mit starken Korrelationen gerade einem Übergang von einem Metall zu einem Nichtleiter, der als Mott–Metall–Isolator–Übergang bezeichnet wird (siehe oben). Den Übergang erwartet man, wenn die Wechselwirkung U einen kritischen Wert U_c erreicht, der von der Größenordnung der

[4] Dieser Teil des Heisenberg–Hamiltonoperators ist äquivalent zum klassischen Ising–Modell, das in ein und zwei Dimensionen exakt lösbar ist und dessen Grundzustand der Néel–Zustand ist.

Hybridisierung t ist. Für den eindimensionalen Fall gilt allerdings nicht $U_c \approx t$, da hier die metallische Phase auf $U = 0$ beschränkt ist. Hier ist $U_c = 0^+$ [7].

Über den Grundzustand des Heisenberg–Modells ist nur wenig mehr bekannt, als über den des Hubbard–Modells. In einer Dimension wurde die Grundzustandsenergie pro Platz mittels Bethe–Ansatz [3] exakt berechnet [9] zu:

$$E_{\mathrm{Heis}}^{1d} = J(1/4 - \ln 2) \approx -0.443J \tag{2.9}$$

In zwei Dimensionen existiert dagegen keine exakte Lösung. Verschiedene numerische und analytische Ansätze schlagen folgenden Wert vor [18]:

$$E_{\mathrm{Heis}}^{2d} \approx -0.669J \tag{2.10}$$

In einer Dimension zeigt der Grundzustand des Heisenberg–Modells quasi–langreichweitige antiferromagnetische Ordnung, d. h. die Zwei–Punkt–Spinkorrelationen fallen algebraisch ab [4, S.291]. Eine echte langreichweitige Ordnung wird auch im Grundzustand durch Quantenfluktuationen verhindert. Im thermodynamischen Limes verschwindet daher zwar die Untergittermagnetisierung, das System befindet sich aber bildlich gesprochen an der Grenze zum Übergang in die geordnete Phase. Für den zweidimensionalen Fall dagegen favorisieren sowohl analytische als auch numerische Rechnungen [6, Anh.L] einen antiferromagnetisch geordneten Grundzustand ($T = 0$). Analytische Ansätze liefern eine Untergittermagnetisierung von $\mu_{stagg} = 0,724$ wogegen numerische Monte–Carlo–Rechnungen etwas kleinere Werte von $\mu_{stagg} = 0.608$ vorschlagen [6, Anh.L]. Bei endlicher Temperatur existiert nach dem Mermin–Wagner–Theorem (z. B. [2, S.62]) keine langreichweitige Ordnung.

Das Hubbard–Modell enthält zu drastische Vereinfachungen, um reale Materialien in experimentellen Situationen beschreiben zu können. Es existiert allerdings eine Anzahl von Erweiterungen, die eine bessere Beschreibung von realen physikalischen Systemen (wie z. B. Übergangsmetalle und deren Oxide, Hochtemperatur–Supraleiter (z. B. Emery–Modell), Schwere–Fermionen–Systeme oder Polymere) erlauben. Die Bedeutung des Hubbard–Modells liegt in der Tatsache begründet, daß es das konzeptionell einfachste und damit „das“ Standardmodell ist, um in einem elektronischen System die Konkurrenz zwischen Delokalisierungseffekten ($\sim t$) und Korrelationseffekten ($\sim U$) zu untersuchen. Wegen seiner geringen Anzahl von Parametern (hier nur das Verhältnis U/t) eignet es sich hervorragend auch zum Test und zur Entwicklung von Lösungsmethoden und Näherungen und soll deshalb für die im folgenden Abschnitt dargestellte Methode als Testobjekt dienen.

2.2 Ansatz und Bestimmungsgleichungen

Das darzulegende theoretische Verfahren wurde erstmals von C.Waidacher in dessen Doktorarbeit [16] bei der Behandlung von CuO_4–Ketten und CuO_2–Ebenen im Rahmen eines Emery–Modells angewandt. Es gibt jedoch zunächst keine prinzipbedingten Einschränkungen auf bestimmte Modell–Hamiltonoperatoren bei der Anwendbarkeit der Methode. Gemäß dem Titel dieser Arbeit beschränken wir uns jedoch auf die Untersuchung des im vorigen Abschnitt diskutierten Ein–Band Hubbard–Modells, dessen Hamiltonoperator wir zur Erinnerung noch einmal in der von uns verwendeten Variante angeben:

$$\hat{\mathrm{H}}_{\mathrm{HUB}} = -t \sum_{\langle i,j\rangle\sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} \tag{2.11}$$

Das Ziel ist die näherungsweise Berechnung der Grundzustandswellenfunktion $\left|\Psi\right\rangle$ bei Halbfüllung ($\langle \hat{\mathrm{n}}_i \rangle = 1$). Bei der Verwendung eines Variationsverfahrens geht man von einer Test–Wellenfunktion $\left|\psi_{\{\lambda_\alpha\}}\right\rangle$ aus, deren Parameter $\{\lambda_\alpha\}$ einen Unterraum des Hilbertraumes aller Wellenfunktionen aufspannen. Mit Hilfe von Bestimmungsgleichungen für die Parameter kann dann der optimale Parametersatz $\{\lambda_\alpha\}$ gefunden werden, für den $\left|\psi_{\{\lambda_\alpha\}}\right\rangle$ den exakten Grundzustand $\left|\Psi\right\rangle$ am besten approximiert. Eine bekannte Variante dieses Vorgehens ist z. B. das Ritzsche Variationsverfahren, bei dem die Bestimmungsgleichungen aus der Stationaritätsbedingung ($\frac{d}{d\lambda_\alpha} E_g \stackrel{!}{=} 0$) für die Grundzustandsenergie abgeleitet werden.

2.2.1 Die Test–Wellenfunktion

Idealerweise sollte die Test–Wellenfunktion so gestaltet werden, daß der exakte Grundzustand im parametrisierten Unterraum enthalten ist. Die konkrete Form hängt also stark von der erwarteten Gestalt des zunächst ja noch unbekannten Grundzustandes ab. Als Richtlinie für den Ansatz kann das Verhalten des Modells in bekannten Grenzfällen herangezogen und extrapoliert werden.

Wie wir gesehen haben, sind für das Hubbard–Modell diese Grenzfälle dramatisch verschieden (freie Elektronen vs. antiferromagnetischer Isolator), so daß es schwer fällt, einen beide Situationen vereinenden Ansatz zu formulieren. Im Folgenden wird daher zunächst das Regime starker Korrelationen als Orientierung dienen. Es wird sich zeigen, wie weit dieses Vorgehen führt und welche Modifikationen nötig sind, um die Beschreibung auch im Bereich kleiner U zu verbessern.

Die verwendete Test–Wellenfunktion hat die folgende Struktur:

$$\big|\psi_{\{\lambda_\alpha\}}\big\rangle \;=\; e^{\sum \lambda_\alpha \hat{\mathrm{F}}_\alpha}\big|\psi_0\big\rangle \tag{2.12}$$

Auf einen Anfangszustand $\big|\psi_0\big\rangle$ werden die Fluktuationsoperatoren $\hat{\mathrm{F}}_\alpha$ mit den zugehörigen Fluktuationsstärken $\{\lambda_\alpha\}$ angewendet, welche dabei die Rolle der Variationsparameter spielen und als reelle Zahlen angenommen werden. Bildlich gesprochen ist $\big|\psi_0\big\rangle$ also der Ursprung des Unterraumes der Test–Wellenfunktionen. Die $\hat{\mathrm{F}}_\alpha$ legen die Richtungen fest, in die er sich innerhalb des Hilbertraumes erstreckt.

Im Regime starker Korrelationen kann man davon ausgehen, daß die Bewegung der Elektronen auf ein begrenztes Raumgebiet um ihren Ursprungsplatz beschränkt bleibt. Es wird daher zweckmäßig eine Ortsraum–Formulierung für das Problem gewählt.

Wie in Kap. 2.4 noch ausführlich erläutert wird, läßt sich das hier verwendete Lösungsverfahren verstehen als eine vollständige Aufsummation von störungstheoretischen Beiträgen mit dem Korrelationsterm $\hat{\mathrm{H}}_U$ als ungestörtem Anteil des Hamiltonoperators und dem kinetischen Term $\hat{\mathrm{H}}_t$ als Störterm. In diesem Schema muß der Ausgangszustand $\big|\psi_0\big\rangle$ Grundzustand von $\hat{\mathrm{H}}_U$ sein, soll aber gleichzeitig eine gute Approximation des zu erwartenden exakten Grundzustands $\big|\Psi\big\rangle$ darstellen.

Der Korrelationsterm $\hat{\mathrm{H}}_U$ hat bei Halbfüllung einen vollständig spinentarteten Grundzustand. Er umfaßt alle Konfigurationen, die keine Doppelbesetzungen aufweisen, völlig unabhängig von der Spinverteilung. Die im vorigen Abschnitt diskutierte Abbildung des Hubbard–Modells auf das Heisenberg–Modell für große U und die dort auftretenden antiferromagnetischen Korrelationen favorisieren jedoch einen dementsprechend geordneten Ausgangszustand. Wir setzen also $\big|\psi_0\big\rangle$ an als Néel Zustand:

$$\big|\psi_0\big\rangle = \prod_i c^\dagger_{i,\sigma(i)}\big|0\big\rangle =: \big|\text{Néel}\big\rangle \qquad \text{Néel–Zustand} \tag{2.13}$$

$\big|\text{Néel}\big\rangle$ bezeichnet dabei den vollständig antiferromagnetisch geordneten Néel–Zustand, d. h. den Grundzustand des Ising–Modells für antiferromagnetische nächste–Nachbar–Wechselwirkung (s.a. Abb. 2.1).

Für einen nicht verschwindenen kinetischen Term im Hamiltonoperator kann $|\text{Néel}\rangle$ aufgrund der fehlenden Ladungsfluktuationen nicht der vollständige Grundzustand sein. Diese Ladungsfluktuationen und in Erweiterungen dann auch Spinfluktuationen werden durch die $\hat{\mathrm{F}}_\alpha$ beschrieben.

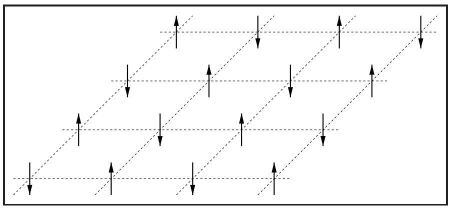

Abbildung 2.1: Néel–Zustand auf dem quadratischen Gitter

Der Index α numeriert die unterschiedlichen Fluktuationsarten. In der verwendeten Ortsraumdarstellung ist ein einzelnes $\hat{\mathrm{F}}_\alpha$ wiederum eine Summe aus den an den einzelnen Gitterplätzen i wirkenden Fluktuationsoperatoren $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha,i}$. Im einfachsten Fall beschreibt ein solcher lokaler Fluktuationsoperator z. B. ein Hüpfen auf benachbarte Gitterplätze:

$$\hat{\mathrm{F}}_{1,i} = \sum_{\langle j \rangle \sigma} c^\dagger_{j,\sigma} c_{i,\sigma} \tag{2.14}$$

Die Fluktuationen sind an jedem Gitterplatz gleich, d. h. für ein festes α haben alle $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha,i}$ dieselbe Fluktuationsstärke λ_α. Ausgehend von der Annahme weitgehend lokalisierter Elektronen bleibt die Reichweite der Fluktuationen auf Nachbarplätze begrenzt.

Wir werden zwei Klassen von Fluktuationsoperatoren verwenden. Die einen beschreiben Ladungsfluktuationen, wobei ein Elektron[5] von seinem Ursprungsplatz wegbewegt wird. Zum Anderen wird es sich als notwendig erweisen, auch Spinfluktuationen zuzulassen, die nur Änderungen in der Spinkonfiguration beschreiben und keine Ladungen bewegen.

Die Exponentialform des Ansatzes (2.12) stammt aus der Herleitung des Verfahrens innerhalb des Kumulantenformalismus (siehe dazu Kap. 2.4). Sie garantiert die Anwendbarkeit der Beziehung (2.51) und gewährleistet damit eine gewisse Konsistenz mit diesem Formalismus.

Anschaulich entspricht diese Darstellung einer vollständigen Aufsummation aller möglichen Reihenfolgen der Fluktuationen in allen Ordnungen, was man

[5]Wir werden im Folgenden immer von Elektronen sprechen, wenn wir uns auf die durch das Modell beschriebenen Teilchen beziehen. Das Hubbard–Modell ist symmetrisch bzgl. einer Elektron–Loch–Transformation, so daß beliebige, einfach geladene Fermionen beschrieben werden können.

am Beispiel von zwei Fluktuationen in der folgenden Entwicklung sehen kann:

$$
\begin{aligned}
e^{(\lambda_1 \hat{\mathrm{F}}_1 + \lambda_2 \hat{\mathrm{F}}_2)} = 1 &+ \lambda_1 \hat{\mathrm{F}}_1 + \lambda_2 \hat{\mathrm{F}}_2 \\
&+ \frac{1}{2}\Big\{ \lambda_1^2 \hat{\mathrm{F}}_1^2 + \lambda_2^2 \hat{\mathrm{F}}_2^2 + \lambda_1 \lambda_2 \big(\hat{\mathrm{F}}_1 \hat{\mathrm{F}}_2 + \hat{\mathrm{F}}_2 \hat{\mathrm{F}}_1 \big) \Big\} \\
&+ \frac{1}{6}\Big\{ \lambda_1^3 \hat{\mathrm{F}}_1^3 + \lambda_2^3 \hat{\mathrm{F}}_2^3 + \lambda_1^2 \lambda_2 \big(\hat{\mathrm{F}}_1 \hat{\mathrm{F}}_1 \hat{\mathrm{F}}_2 + \hat{\mathrm{F}}_1 \hat{\mathrm{F}}_2 \hat{\mathrm{F}}_1 + \hat{\mathrm{F}}_2 \hat{\mathrm{F}}_1 \hat{\mathrm{F}}_1 \big) \\
&\quad + \lambda_1 \lambda_2^2 \big(\hat{\mathrm{F}}_2 \hat{\mathrm{F}}_2 \hat{\mathrm{F}}_1 + \hat{\mathrm{F}}_2 \hat{\mathrm{F}}_1 \hat{\mathrm{F}}_2 + \hat{\mathrm{F}}_1 \hat{\mathrm{F}}_2 \hat{\mathrm{F}}_2 \big) \Big\} + \ldots
\end{aligned} \tag{2.15}
$$

2.2.2 Die Bestimmungsgleichungen für die Variationsparameter

Um nun die Fluktuationsstärken λ_α zu bestimmen und damit $|\psi\rangle$ festzulegen, wird der folgende Satz von Gleichungen verwendet:

$$
\begin{aligned}
0 &= \langle \psi | [\hat{\mathrm{H}}, F_\alpha^\dagger] | \psi \rangle \\
&= \langle e^{\sum \lambda_\alpha F_\alpha} \text{Néel} | \; [\hat{\mathrm{H}}, F_\alpha^\dagger] \; | e^{\sum \lambda_\alpha F_\alpha} \text{Néel} \rangle
\end{aligned} \tag{2.16}
$$

Die Gleichungen sind offensichtlich erfüllt, wenn $|\psi\rangle$ der volle Grundzustand und damit ein exakter Eigenzustand von $\hat{\mathrm{H}}$ ist. In diesem Fall kann $\hat{\mathrm{H}}$ durch E ersetzt werden und der Kommutator verschwindet. Es sei noch angemerkt, daß demzufolge obige Gleichung nicht nur für die Fluktuationsoperatoren gilt, sondern für jeden beliebigen Operator erfüllt sein muß.

Im Allgemeinen bilden die Gleichungen (2.16) ein nichtlineares Gleichungssystem, dessen Lösungen mit numerischen Standardalgorithmen bestimmt werden können. Da $|\psi\rangle$ Grundzustand sein soll, ist nur die Lösung mit der niedrigsten Energie relevant. Die Energie sowie alle anderen Erwartungswerte physikalischer Observabler können auf kanonische Art und Weise nach

$$
\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle e^{\sum \lambda_\alpha \hat{\mathrm{F}}_\alpha} \text{Néel} | \; A \; | e^{\sum \lambda_\alpha \hat{\mathrm{F}}_\alpha} \text{Néel} \rangle}{\langle e^{\sum \lambda_\alpha \hat{\mathrm{F}}_\alpha} \text{Néel} | e^{\sum \lambda_\alpha \hat{\mathrm{F}}_\alpha} \text{Néel} \rangle} \tag{2.17}
$$

berechnet werden, sobald die λ_α und damit $|\psi\rangle$ einmal bestimmt sind.

2.3 Berechnungen in unendlichen Systemen und notwendige Näherungen

In diesem Abschnitt soll erläutert werden, wie mit dem im vorigen Abschnitt eingeführten Ansatz konkrete Rechnungen in unendlich ausgedehnten Systemen durchgeführt werden können.

Zur Erinnerung sei hier noch einmal die Test–Wellenfunktion angegeben:

$$\big|\psi\big\rangle \quad = \quad e^{\sum_{\alpha,i} \lambda_\alpha \, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha i}} \big|\text{Néel}\big\rangle \tag{2.18}$$

Der Index α numeriert die Art der Fluktuation und i läuft über alle Gitterplätze des Systems. Wie schon erwähnt, sind die λ_α wegen Translationssymmetrie unabhängig vom Gitterplatz i. Der Zustand $\big|\text{Néel}\big\rangle$ ist der antiferromagnetisch geordnete Néel–Zustand in zwei Dimensionen wie in Abb. 2.1 skizziert.

Die Fluktuationen finden an allen Plätzen i gleichzeitig statt. Es tritt dabei eine Vielzahl von Vielteilcheneffekten auf, die hauptsächlich in drei Kategorien unterteilt werden können.

1. Aufgrund des Pauli–Prinzips können nicht zwei Elektronen gleichen Spins auf einem Gitterplatz anwesend sein. Es werden also Fluktuationen verhindert, weil der Zielplatz einer Fluktuation schon durch ein Elektron gleichen Spins besetzt ist.

2. Zwei (oder mehr) Elektronen mit gleichem Spin können durch Fluktuationen ihre Plätze tauschen und somit einen zur Ausgangskonfiguration identischen Zustand erzeugen. Solch ein Prozess reduziert effektiv die Fluktuationen in der Test–Wellenfunktion.

3. Sobald sich zwei Elektronen (mit notwendigerweise entgegengesetztem Spin) auf einem Gitterplatz befinden, kostet das die Korrelationsenergie U. Große U vermindern daher Fluktuationen.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß Vielteilcheneffekte zu einer Verminderung von Fluktuationen beitragen oder anders formuliert: Durch die Vernachlässigung von Vielteilcheneffekten werden Fluktuationen tendenziell überbewertet. Eine strenge Behandlung dieser Vielteilcheneffekte in unendlichen Systemen erscheint unmöglich, weshalb weitere Näherungen bei der Auswertung gemacht werden müssen.

2.3.1 Berechnung von Erwartungswerten

Zur Illustration der Vorgehensweise soll als erstes die Norm der Test–Wellenfunktion $|\psi\rangle$ berechnet werden. In Anlehnung an die dabei angewandten Näherungen werden im Anschluß allgemeine Prinzipien formuliert, nach denen bei der Behandlung von Korrelationen in allen folgenden Rechnungen verfahren wird.

Die Grundzustandsnorm: $\langle\psi|\psi\rangle$

Als erste Vereinfachung wird angenommen, daß sich die Fluktuationen an einem ausgezeichneten Platz (im Folgenden immer $i = 0$) aus dem Ansatz herausfaktorisieren lassen. Die Test–Wellenfunktion $|\psi\rangle$ läßt sich dann aus einem Zustand $|\widetilde{\psi}\rangle$ ableiten nach:

$$|\psi\rangle = \exp\Big(\sum_{\alpha i} \lambda_\alpha \, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha i}\Big)|\text{Néel}\rangle \tag{2.19}$$

$$= \exp\Big(\sum_{\alpha} \lambda_\alpha \, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}\Big) \exp\Big(\sum_{\alpha, i\neq 0} \lambda_\alpha \, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha i}\Big)|\text{Néel}\rangle \tag{2.20}$$

$$= \exp\Big(\sum_{\alpha} \lambda_\alpha \, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}\Big)|\widetilde{\psi}\rangle \tag{2.21}$$

Der hier eingeführte Zustand $|\widetilde{\psi}\rangle$

$$|\widetilde{\psi}\rangle = \exp\Big(\sum_{\alpha, i\neq 0} \lambda_\alpha \, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha i}\Big)|\text{Néel}\rangle \tag{2.22}$$

beschreibt anschaulich den „Rest“ der Wellenfunktion und repräsentiert eine Konfiguration, in der an allen Plätzen Fluktuationen stattfinden können außer an dem ausgezeichneten Platz ($i = 0$). Diese Faktorisierung ist äquivalent zur Annahme, daß $[\hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}, \hat{\mathrm{F}}_{\beta i}] = 0 \quad \forall\, i \neq 0$. Da mit diesem Schritt $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}$ in der Operatorordnung nach links gezogen wurde, wird der Einfluß von $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}$ auf die anderen Fluktuationen ignoriert. Umgedreht sind aber die Fluktuationen an anderen Plätzen im Zustand $|\widetilde{\psi}\rangle$ enthalten und können Fluktuationen am Platz $i = 0$ blockieren. Man könnte auch sagen, wir betrachten den Platz $i = 0$, nachdem alle anderen Fluktuationen stattgefunden haben. Der Einfluß der benachbarten Elektronen wird in einem späteren Schritt dann durch Wahrscheinlichkeiten modelliert, die die einzelnen Fluktuationen je nach der Wahrscheinlichkeit ihrer Ausführbarkeit wichten. Bildlich gesprochen betrachten wir also den Platz $i = 0$ im „See“ der anderen Plätze ganz im Sinne einer Molekularfeldtheorie.

Zur Bestimmung von $\langle\psi|\psi\rangle$ wird jetzt die Einzelplatz–Norm ν definiert:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \nu\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle \tag{2.23}$$

$|\widetilde{\psi}\rangle$ ist wieder der oben eingeführte Zustand, bei dem an allen Plätzen Fluktuationen stattfinden können außer an einem ausgezeichneten Platz ($i = 0$). Treffen wir nun die Annahme, daß für jeden weiteren „festgehaltenen" Platz, dessen Elektron im Néel–Zustand verbleibt, ein Faktor ν hinzukommt, finden wir:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \nu^L\langle\text{Néel}|\text{Néel}\rangle = \nu^L \tag{2.24}$$

Dabei bezeichnet L die Gesamtzahl aller Plätze im System. Die Relationen (2.23) und (2.24) laufen also auf eine Faktorisierungsannahme für die Norm hinaus.

Die Berechnung von ν erfolgt unmittelbar durch:

$$\begin{aligned}
\nu &= \frac{\langle\psi|\psi\rangle}{\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle} \\
&= \frac{\langle\widetilde{\psi}|e^{\sum_\alpha \lambda_\alpha \hat{\mathrm{F}}^\dagger_{\alpha 0}}\ e^{\sum_\alpha \lambda_\alpha \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}}|\widetilde{\psi}\rangle}{\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle} &(2.25)\\
&= \frac{\langle\widetilde{\psi}|\left(1+\sum_\alpha \lambda_\alpha \hat{\mathrm{F}}^\dagger_{\alpha 0}\right)\ \left(1+\sum_\alpha \lambda_\alpha \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}\right)|\widetilde{\psi}\rangle}{\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle} &(2.26)\\
&= \frac{\langle\widetilde{\psi}|1+\sum_{\alpha\alpha'} \lambda_\alpha\lambda_{\alpha'}\, \hat{\mathrm{F}}^\dagger_{\alpha 0}\, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha' 0}\,|\widetilde{\psi}\rangle}{\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle} &(2.27)
\end{aligned}$$

Dabei wurde im ersten Schritt die Exponentialfunktion bis zum linearen Term entwickelt. Dieses Vorgehen ist dann exakt, wenn die lokalen Fluktuationsoperatoren $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}$ so gewählt sind, daß ihre Quadrate und höhere Potenzen verschwinden. In der Anwendung wird dies dadurch realisiert, daß die Operatoren $\hat{\mathrm{F}}_\alpha$ nur auf Elektronen wirken, deren Spins wie im Néel–Zustand ausgerichtet sind[6]. Da die von uns verwendeten Fluktuationen kein Elektron weiter als bis zum nächsten Nachbarplatz bewegen, ist damit der Bewegungsradius eines Elektrons relativ beschränkt.

Man beachte, daß Terme in den Erwartungswerten, die linear in $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}$ (bzw. $\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{\alpha 0}$) sind, keine Beiträge liefern, da ein $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha i}$ am Platz i nur von einem $\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{\alpha i}$ am

[6]Für die in Kap. 4 beschriebene Methode wird es nötig sein, diese Beschränkung für bestimmte Fluktuationen aufzuheben und die Reihenentwicklung aufzusummieren (s.a. Anhang C).

gleichen Platz rückgängig gemacht werden kann. Eventuelle Kopplungen zwischen verschiedenen Arten von Fluktuationen an verschiedenen Plätzen (aufgrund derer eine Art Fluktuation durch eine Kombination anderer Arten rückgängig gemacht werden könnte) werden an dieser Stelle nicht berücksichtigt. Mit demselben Argument bleiben von der Summe über $\alpha\alpha'$ in der Gleichung (2.27) nur die Terme mit gleichem Index übrig. Für ν resultiert:

$$\nu \quad = \quad 1 + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^{2} \frac{\langle\widetilde{\psi}|\, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}^{\dagger}\, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}\, |\widetilde{\psi}\rangle}{\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle} \tag{2.28}$$

$|\widetilde{\psi}\rangle$ enthält jetzt den Einfluß aller anderen Plätze auf die Fluktuationen am Platz $i = 0$. Dieser Einfluß soll auf eine gemittelte Art im Sinne einer Molekularfeldtheorie berücksichtigt werden. Dazu wird mit $\mathrm{P}_{\alpha} = (1/z_{\alpha})\, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}^{\dagger}\, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}$ ein Projektor auf den Unterraum des Hilbertraumes definiert, in dem die Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha}$ möglich ist, also nicht durch andere Elektronen blockiert wird. z_{α} bezeichnet dabei die Anzahl der äquivalenten Plätze, über die die Summe in der Definition der $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha}$ läuft (z. B. Gl. (2.14)). Die Größe

$$p_{\alpha} \quad = \quad \langle\, \mathrm{P}_{\alpha} \,\rangle = \frac{1}{z_{\alpha}} \frac{\langle\widetilde{\psi}|\, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}^{\dagger}\, \hat{\mathrm{F}}_{\alpha 0}\, |\widetilde{\psi}\rangle}{\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle} \tag{2.29}$$

gibt dann an, wie groß der Anteil aller Konfigurationen im Unterraum der Test–Wellenfunktion ist, in denen die Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha}$ möglich ist. p_{α} ist also die Wahrscheinlichkeit, daß $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha}$ erlaubt ist.

Damit ergibt sich für ν:

$$\nu = 1 + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^{2} z_{\alpha} p_{\alpha} \tag{2.30}$$

und für die Norm der Test–Wellenfunktion:

$$\langle\psi|\psi\rangle \quad = \quad \nu^{L} = \Big(1 + \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^{2} z_{\alpha} p_{\alpha}\Big)^{L} \tag{2.31}$$

Die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten p_{α} selbst hängt von der konkreten Gestalt der Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha}$ und von der Geometrie des Modells ab. Sie wird weiter unten an einem einfachen Beispiel vorgeführt. Die p_{α} werden wieder die Einzelplatz–Norm ν enthalten, weshalb die entsprechenden Gleichungen selbstkonsistent gelöst werden müssen.

Auch bei der Berechnung von Erwartungswerten von Operatoren wird die Konfiguration der umliegenden Plätze durch Wahrscheinlichkeiten berücksichtigt. Im Folgenden sollen daher einige in den späteren Rechnungen auftretende Wahrscheinlichkeiten angegeben und ihre Berechnung skizziert werden.

Wahrscheinlichkeit für lokale Néelkonfiguration: $1/\nu$

Es sei $\langle\, \hat{\mathrm{n}}_{i\sigma(i)} \,\rangle$ die Wahrscheinlichkeit dafür, am Platz i ein Elektron mit einer Spinrichtung entsprechend der Néel–Ordnung anzutreffen. Die Notation $\sigma(i)$ in $\hat{\mathrm{n}}_{i\sigma(i)}$ bezeichnet also gerade diejenige Spinrichtung, die der Platz i in dem im Ansatz verwendeten Néelzustand innehat. Vernachlässigt man Fluktuationen von übernächsten und weiter entfernten Nachbarn von i, so gilt näherungsweise

$$\langle\psi|\, \hat{\mathrm{n}}_{i\sigma(i)} \,|\psi\rangle \quad = \quad \langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle \tag{2.32}$$

Damit folgt unmittelbar nach (2.23)

$$\langle\hat{\mathrm{n}}_{i\sigma(i)}\rangle = \frac{\langle\psi|\, \hat{\mathrm{n}}_{i\sigma(i)} \,|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{1}{\nu} \tag{2.33}$$

so daß also $1/\nu$ auch als Wahrscheinlichkeit zu interpretieren ist, ein Elektron entsprechend der Néelkonfiguration an einem festen Gitterplatz zu finden.

Wahrscheinlichkeit, daß die Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha k}$ nicht auftritt: q_α

Mit q_α wird die Wahrscheinlichkeit bezeichnet, daß eine Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha k}$ mit Ausgangspunkt k **nicht** stattfindet. Zur Berechnung verwenden wir, daß q_α auch durch die von eins subtrahierte Wahrscheinlichkeit ausgedrückt werden kann, daß die Fluktuation stattgefunden hat, d. h.

$$q_\alpha \quad = \quad 1 - \frac{\lambda_\alpha^2}{\nu} p_\alpha \tag{2.34}$$

Hierbei sichert der Faktor $\frac{1}{\nu}$, wie im vorigen Abschnitt angegeben, daß das Elektron auf seinem Ursprungsplatz k vorhanden war. Die Faktoren λ_α beschreiben die im Grundzustand festgelegte Fluktuationsstärke für die Fluktuationen $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha k}$ bzw. $\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{\alpha k}$ jeweils für das Weg– und Zurückfluktuieren. Die Größe p_α modelliert schließlich den Einfluß der anderen Fluktuationen und gibt an, mit welcher

Wahrscheinlichkeit die Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha k}$ überhaupt erlaubt wäre.

Die Wahrscheinlichkeit q_α wird dann zu einem Term X multipliziert, wenn eine Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha k}$ den Prozeß verhindern könnte, den dieser Term X beschreibt. q_α soll also die Wahrscheinlichkeit darstellen, daß diese störende Fluktuation nicht auftritt. Wenn mehrere störende Fluktuationen ($\hat{\mathrm{F}}_{\alpha k}$, $\hat{\mathrm{F}}_{\beta k}$, $\hat{\mathrm{F}}_{\gamma k}$) von einem Platz ausgehen können, werden diese analog zu einem Faktor

$$q_{\alpha\beta\gamma} = 1 - \frac{\lambda_\alpha^2}{\nu} p_\alpha - \frac{\lambda_\beta^2}{\nu} p_\beta - \frac{\lambda_\gamma^2}{\nu} p_\gamma \tag{2.35}$$

für jeden Platz zusammengefaßt.

Die q_α sind keine neuen Variablen. Sie dienen nur der besseren Übersichtlichkeit der Gleichungen und werden vor der Anwendung der numerischen Verfahren substituiert.

2.3.2 Einfaches Beispiel

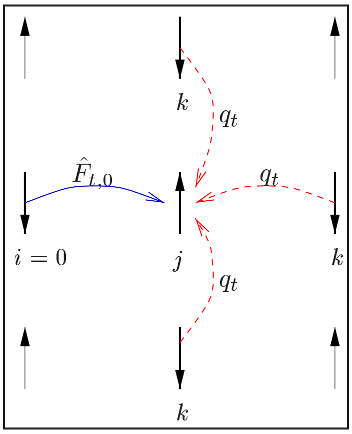

Abbildung 2.2: Drei äquivalente Nachbarelektronen des Zielplatzes könnten die Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_{t,0}$ behindern. Für jedes wird ein Faktor q_t multipliziert.

Die konkrete Form der p_α hängt vom betrachteten Fluktuationsoperator $\hat{\mathrm{F}}_\alpha$ und von der Geometrie des Modells ab. Es soll daher das Zusammenspiel aller bisher eingeführten Größen und Zusammenhänge an einem einfachen Beispiel demonstriert werden.

Wir betrachten dazu ein zweidimensionales, quadratisches Gitter und unser Ansatz

$$|\psi\rangle = \exp\left(\sum_i \lambda_t \, \hat{\mathrm{F}}_{t,i}\right) |\mathrm{Néel}\rangle \tag{2.36}$$

enthält nur eine einzige Ladungsfluktuation $\hat{\mathrm{F}}_t$ (der Index $_t$ ist nur Bezeichner, keine Variable):

$$\hat{\mathrm{F}}_{t,i} = \sum_{\langle j \rangle} c^\dagger_{j,\sigma(i)} c_{i,\sigma(i)} \tag{2.37}$$

($\hat{\mathrm{F}}_t$ beschreibt das Hüpfen eines Elektrons vom Ausgangsplatz $i = 0$ zu Nachbarplätzen j.)

Zunächst ist p_t zu bestimmen, d. h. die Wahrscheinlichkeit, daß der Prozeß $\hat{\mathrm{F}}_t$ möglich ist. Auf anschaulichem Wege ist diese Größe durch folgende Überlegung zu erhalten (s. Abb. 2.2).

Die Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_t$ ist genau dann möglich, wenn noch von keinem der drei anderen Nachbarplätze k des Zielplatzes j der Fluktuation ein Elektron mittels $\hat{\mathrm{F}}_t$–Fluktuation auf den Zielplatz j fluktuiert ist. Die Wahrscheinlichkeit für diese Konfiguration ist $p_t = q_t^3$ (ein Faktor q_t für jede störende Fluktuation). Das heißt:

$$
\begin{aligned}
p_t &= \left(1 - \frac{\lambda_t^2}{\nu} p_t\right)^3 \\
&= 1 - 3\frac{\lambda_t^2}{\nu} p_t + O\left(\frac{\lambda_t^4}{\nu^2}\right)
\end{aligned}
\tag{2.38}
$$

Um die Konsistenz dieser anschaulichen Argumentation mit der Definition der p_α zu zeigen, leiten wir diese Größe noch einmal aus deren Definition her:

$$
\begin{aligned}
p_t &= \frac{1}{z_t} \frac{\langle\widetilde{\psi}|\, \hat{\mathrm{F}}_{t,i}^\dagger \, \hat{\mathrm{F}}_{t,i} \, |\widetilde{\psi}\rangle}{\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle} \\
&= \frac{1}{z_t} \sum_{\langle j\rangle\sigma} \frac{\langle\widetilde{\psi}|\, \hat{\mathrm{n}}_{i\sigma}(1-\hat{\mathrm{n}}_{j\sigma}) |\widetilde{\psi}\rangle}{\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle}
\end{aligned}
$$

Im obigen Erwartungswert kann man $\hat{\mathrm{n}}_{i\sigma}$ durch eins ersetzen, da $|\widetilde{\psi}\rangle$ per Definition keine Fluktuationen am Platz $i = 0$ zuläßt und sich das Elektron also nicht von seinem Ursprungsplatz wegbewegt. Damit bleibt

$$
p_t = 1 - \frac{\langle\widetilde{\psi}|\, \hat{\mathrm{n}}_{j\sigma(0)} \, |\widetilde{\psi}\rangle}{\langle\widetilde{\psi}|\widetilde{\psi}\rangle}
\tag{2.39}
$$

wobei j einer der äquivalenten nächsten Nachbarplätze von $i = 0$ ist. Der verbleibende Erwartungswert ist anschaulich die Wahrscheinlichkeit, auf einem Nachbarplatz j des Platzes $i = 0$ ein Elektron gleichen Spins $\sigma(0)$ anzutreffen. Da wir mit Néel–Ordnung starten, enthalten alle nächsten Nachbarplätze j, bevor die Fluktuationen stattfinden, nur Elektronen entgegengesetzten Spins $\sigma(j) = \bar{\sigma}(0)$. Ein Elektron mit Spin $\sigma(0)$ kann also nur von einem übernächsten Nachbarplatz[7] k aus auf den direkten Nachbarplatz j gelangt sein. In unserem Beispiel kann das nur durch eine $\hat{\mathrm{F}}_t$–Fluktuation geschehen. In zwei

[7]Strenggenommen könnten auch Elektronen von noch weiter entfernten Plätzen beitragen. Zum Einen wird deren Weg aber durch andere Elektronen blockiert und damit dieser Beitrag vermindert. Zum zweiten sind diese Prozesse von höherer Ordnung in den Fluktuationsparametern und sollen daher vernachlässigt werden.

Dimensionen sind drei äquivalente Ausgangsplätze k möglich (s.a. Abb. 2.2). Dementsprechend ergibt sich für den Erwartungswert $\langle\widetilde{\psi}|\,\hat{\mathrm{n}}_{j\sigma(0)}\,|\widetilde{\psi}\rangle$ ein Faktor $\frac{1}{\nu}$, damit das Elektron auf Platz k noch keine andere Fluktuation gemacht hat, je ein Faktor λ_t aus dem bra– und dem ket–Vektor sowie die drei für die Anzahl der Ausgangsplätze. Die Wahrscheinlichkeit p_t schließlich modelliert wieder den Einfluß aller anderen Elektronen.

$$p_t = 1 - 3\frac{\lambda_t^2}{\nu}p_t \tag{2.40}$$

Dies entspricht gerade (2.38).

2.3.3 Die Berechnung der Bestimmungsgleichung $\langle\psi|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}_t^\dagger]|\psi\rangle = 0$

Generell werden Erwartungswerte im Rahmen der vorgestellten Methode immer lokal ausgerechnet und Korrelationen können nur bis zur Reichweite der Fluktuationen berücksichtigt werden. Alle Plätze, die weiter entfernt liegen, sind „Jellium“, werden also unabhängig von ihrer Entfernung zum Ursprungsplatz genauso wie dieser beschrieben. Erwartungswerte physikalischer Observabler werden daher im Folgenden immer pro Platz berechnet. Das sind hauptsächlich die Energie pro Teilchen ε und die Untergittermagnetisierung μ_{stagg}. Bei Halbfüllung ist ε gleich der Energie pro Platz.

Die Auswertung der Bestimmungsgleichung $\langle\psi|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}_{\alpha,0}^\dagger]|\psi\rangle = 0$ soll als Spezialfall der Berechnung allgemeiner Erwartungswerte der Form $\langle\psi|AB|\psi\rangle$ betrachtet werden. Zur Vereinfachung der Auswertung von Ausdrücken dieser Art bedienen wir uns einer gedanklichen Hilfskonstruktion.

Der Zustand $|\psi\rangle$ ist eine Summe von Fluktuationen verschiedenen Typs an allen Plätzen, die jeweils auf den Néel–Zustand als Ausgangszustand angewendet werden. Es gilt nun, die relevanten Beiträge in einem Ausdruck

$$\langle\psi|AB|\psi\rangle = \langle\text{Néel}|\underbrace{\{\lambda_\alpha\,\hat{\mathrm{F}}_{\alpha i}^\dagger\}AB\{\lambda_\alpha\,\hat{\mathrm{F}}_{\alpha i}\}}_{\stackrel{!}{=}\mathbf{1}}|\text{Néel}\rangle \tag{2.41}$$

herauszufinden, für die das Skalarprodukt ungleich Null ist. Das sind diejenigen Fluktuationen im bra– und im ket–Vektor, die in Zusammensetzung mit den inneren Operatoren AB insgesamt gerade einen Operator ergeben, der den Néel–Zustand unverändert läßt. Wenn man sich also die von rechts beginnende

Auswertung von (2.41) als eine Art 'zeitliche' Entwicklung des Systems vorstellt, dann startet das System im Néel–Zustand, durchläuft verschiedene Fluktuationen und andere Transformationen durch die inneren Operatoren und muß am Ende wieder im Néel–Zustand ankommen. Es gibt im allgemeinen mehrere Möglichkeiten dafür und jeder dieser Wege durch den Hilbertraum kann als die Bewegung eines oder mehrerer Elektronen auf dem Gitter veranschaulicht werden. Entscheidend sind am Ende die Faktoren (für die Bestimmungsgleichungen z. B. der λ_α, t und U), die auf dem Weg aufgesammelt werden, sowie die Wahrscheinlichkeiten $\{p_\alpha,\ q_\alpha\}$ die bestimmte Konfigurationen der umliegenden Plätze charakterisieren.

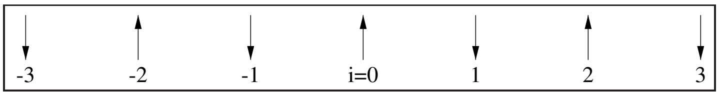

Abbildung 2.3: Numerierung einer eindimensionalen Kette im Néel–Zustand

Am Beispiel der oben eingeführten $\hat{\mathrm{F}}_t$–Fluktuation, allerdings in einer Dimension, soll die Auswertung der Bestimmungsgleichung $\langle\psi\big|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{t,0}]\big|\psi\rangle = 0$ im Detail erläutert werden. Der besseren Anschaulichkeit wegen ist die Numerierung der Plätze noch einmal in Abb. 2.3 angegeben. Für die Rechnung kann der Operator $\hat{\mathrm{F}}_{t,0} = c^\dagger_{1,\sigma}c_{0,\sigma}\ +\ c^\dagger_{-1,\sigma}c_{0,\sigma}$ aus Symmetriegründen auf $c^\dagger_{1,\sigma}c_{0,\sigma}$ reduziert werden. Das heißt, wir betrachten die Wirkung der Ladungsfluktuation nur nach einer Seite (entsprechend der Numerierung aus Abb. 2.3 nach rechts), da das System symmetrisch bzgl. einer Spiegelung am Platz $(i = 0)$ ist.

Der Kommutator in der Bestimmungsgleichung sichert, daß alle Terme in $\hat{\mathrm{H}}$, die weit genug entfernt vom Platz $(i = 0)$ wirken, sich wegheben, da sie dann mit $\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{t,0}$ vertauschen. In der Rechnung wird der Kommutator nicht als Operator ausgewertet, sondern es werden die Erwartungswerte der beiden Anteile getrennt berechnet und dann subtrahiert.

In Tabelle 2.1 sind die einzelnen Terme der beiden Anteile angegeben. In der ersten Spalte sind die Terme zusammengefaßt, die bei dem in der jeweiligen Zeile beschriebenen Prozeß entstehen. Die nächsten vier Spalten geben an, welcher Teil des Skalarprodukts für die jeweilige Bewegung des Elektrons verantwortlich ist. Dabei bezeichnet der erste Index der Operatoren immer den Platz i, an dem der Operator wirkt und der Pfeil deutet an, welcher Anteil des Operators gemeint ist (da ein Fluktuationsoperator i.a. eine Summe mehrerer Prozesse ist). Die Terme des Hamiltonoperators werden dabei nach ihren Vorfaktoren bezeichnet (t ist z. B. der kinetische Term aus $\hat{\mathrm{H}}_t$).

Die letzte Spalte enthält die Wahrscheinlichkeiten (WSK), die zusätzlich

$-\frac{2}{\nu}\Big[$	$\langle\psi\vert$	$\hat{\mathrm{H}}$	$\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0}$	$\vert\psi\rangle$	WSK
$\lambda_t^2 t q_t$	$\lambda_t\,\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0\leftarrow 1}$	$-t_{0\to 1}$	$\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0\leftarrow 1}$	$\lambda_t\,\hat{\mathrm{F}}_{t,0\to 1}$	$q_{t,2}$
$\lambda_t^2 t q_t^2$	$\lambda_t\,\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0\leftarrow -1}$	$-t_{0\to -1}$	$\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0\leftarrow 1}$	$\lambda_t\,\hat{\mathrm{F}}_{t,0\to 1}$	$q_{t,-2}\ q_{t,2}$
$\lambda_t^2 t \frac{1}{\nu}$	$\lambda_t\,\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,2\leftarrow 1}$	$-t_{2\to 1}$	$\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0\leftarrow 1}$	$\lambda_t\,\hat{\mathrm{F}}_{t,0\to 1}$	$\frac{1}{\nu_2}$
	$\langle\psi\vert$	$-\,\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0}$	$\hat{\mathrm{H}}$	$\vert\psi\rangle$	
$-t q_t$	$\mathbf{1}$	$-\,\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0\leftarrow 1}$	$-t_{0\to 1}$	$\mathbf{1}$	$q_{t,2}$
$\lambda_t U \frac{1}{\nu} q_t\Big]$	$\mathbf{1}$	$-\,\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0\leftarrow 1}$	U_1	$\lambda_t\,\hat{\mathrm{F}}_{t,0\to 1}$	$\frac{1}{\nu_1}\ q_{t,2}$

Tabelle 2.1: Alle Terme des Kommutators $[\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0}]$, die verschieden von Null sind

multipliziert werden, um die Konfigurationen der umliegenden Plätze zu modellieren. Der Index an der Wahrscheinlichkeit q_t meint dabei den Platz, dessen Fluktuation verboten werden soll und der Index an $1/\nu$ den Platz, der im Ausgangszustand verbleiben soll.

In der letzten Zeile zum Beispiel wird die Wahrscheinlichkeit q_t für den Platz $(i = 2)$ multipliziert, damit die Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_{t,0\to 1}$ nicht blockiert wird. Der Faktor $1/\nu$ sichert, daß sich das Elektron am Platz $(i = 1)$ noch in der Néel–Konfiguration befindet, also noch nicht wegfluktuiert ist, damit dann mit dem U–Term aus dem Hamiltonoperator die Doppelbesetzung am Platz $(i = 1)$ „gemessen“ werden kann.

Man beachte weiterhin, daß zwar ein Prozeß mit dem übernächsten Elektron vom Platz $(i = 2)$ existiert, aber die Fluktuationen des direkten Nachbarelektrons entkoppelt sind. Die Ursache dafür ist der entgegengesetzte Spin des Nachbarelektrons, so daß es keine Prozesse blockieren kann. Mit der Verwendung differenzierterer Fluktuationen, treten auch Kopplungsterme mit dem Nachbarelektron auf.

Insgesamt gilt also:

$$\langle\psi|[\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{t,0}]|\psi\rangle = \frac{2}{\nu}\left[\lambda_t^2 t q_t + \lambda_t^2 t q_t^2 + \lambda_t^2 t \frac{1}{\nu} - t q_t + U\lambda_t q_t \frac{1}{\nu}\right] \qquad (2.42)$$

2.4 Zugrundeliegende Ideen

Das in den vorangegangenen Abschnitten dargelegte Näherungsverfahren bezieht seine grundlegenden Konzepte im Wesentlichen aus einer dem Kumulantenformalismus entspringenden Störungstheorie. Wie zu sehen war, tauchen in den Gleichungen selbst keine Kumulantenausdrücke auf, jedoch wird die Darstellung der Zusammenhänge durch diese Formulierung wesentlich erleichtert. Demzufolge werden in einem folgenden Unterabschnitt die Definitionen und wichtigsten Eigenschaften von Kumulanten zusammengetragen und danach die Gleichungen aus Kap. 2.2 noch einmal abgeleitet. Wir orientieren uns dabei weitgehend an der in [16] angeführten Argumentation.

2.4.1 Kumulanten – Definitionen und Eigenschaften

Wir wollen hier in der gebotenen Kürze den zur Argumentation notwendigen Apparat des Kumulantenformalismus einführen. Für eine umfassende Darstellung dieses mächtigen und für stark korrelierte Systeme so erfolgreichen Werkzeugs sei z. B. auf [6, Kap. 5] und die darin zitierten Originalarbeiten verwiesen.

Ein Kumulantenerwartungswert für ein Produkt von N Operatoren $A_1^{\alpha_1} ... A_N^{\alpha_N}$ ist definiert als:

$$\langle\phi|A_1^{\alpha_1} \, ... \, A_N^{\alpha_N}|\psi\rangle^c = \frac{\partial^{\alpha_1}}{\partial\lambda_1^{\alpha_1}} \cdots \frac{\partial^{\alpha_N}}{\partial\lambda_N^{\alpha_N}} \ln\langle\phi|e^{\lambda_1 A_1} \, ... \, e^{\lambda_N A_N}|\psi\rangle\Big|_{\lambda_1= \, ... \, =\lambda_N=0} \tag{2.43}$$

(Hier und im Folgenden sei immer vorausgesetzt, daß $\langle\phi|\psi\rangle \neq 0$.)

Entscheidend bei dieser Darstellung ist, ob ein Operator, der wiederum ein Produkt zweier Operatoren ist, z. B. $A = XY$, als Einheit innerhalb der Kumulantenordnung aufgefaßt wird (sog. primärer Operator) oder als zusammengesetzter Operator. Für einen einzelnen primären Operator ist die Kumulante einfach der bekannte normierte Erwartungswert:

$$\langle\phi|A|\psi\rangle^c = \frac{\langle\phi|A|\psi\rangle}{\langle\phi|\psi\rangle} \tag{2.44}$$

Wenn $A = XY$ als zusammengesetzter Operator angesehen wird, dann müssen X und Y wie zwei primäre Operatoren behandelt werden und die Auswertung der Kumulante ergibt:

$$\langle\phi|XY|\psi\rangle^c = \frac{\langle\phi|XY|\psi\rangle}{\langle\phi|\psi\rangle} - \frac{\langle\phi|X|\psi\rangle\langle\phi|Y|\psi\rangle}{\langle\phi|\psi\rangle^2} \tag{2.45}$$

Im Allgemeinen sind Kumulanten von Produkten aus mehreren Operatoren gleich null, wenn die Operatoren unkorreliert sind und die Erwartungswerte also faktorisieren. Kumulanten sind wie normale Erwartungswerte linear [10]:

$$\langle X(\alpha A + \beta B)\rangle^c = \alpha\langle XA\rangle^c + \beta\langle XB\rangle^c \tag{2.46}$$

Dementsprechend muß aber bei der Berechnung sorfältig unterschieden werden, ob eine 1 innerhalb der Kumulante eine $\mathbb{C}$–Zahl oder ein Eins–Operator ist. Es gilt:

$$\langle 1 \cdot A\rangle^c = \langle A\rangle^c \qquad \text{jedoch} \qquad \langle \mathbf{1} \cdot A\rangle^c = 0 \quad !$$

2.4.2 Störungstheorie mit Kumulanten

Die entscheidende Stärke von Kumulantenausdrücken kommt in der Formulierung der Störungstheorie zum Tragen. Hierbei wird im Allgemeinen der Hamiltonoperator des Systems in zwei Anteile $H = H_0 + H_1$ aufgeteilt, wobei die Lösung des durch H_0 beschriebenen Systems als bekannt vorausgesetzt wird. Der im günstigsten Fall nur kleine Einfluß von H_1 (gegenüber H_0) wird sukzessive in immer höheren Ordnungen einbezogen.

Es soll zunächst grob skizziert werden, wie Grundzustandseigenschaften mit Hilfe von Kumulanten ausgerechnet werden. Ausgehend vom Grundzustand $\big|\psi_0\big\rangle$ des ungestörten Anteils H_0 wird ein Operator Ω definiert, der in Kumulantenausdrücken (und i.a. nur dort!) $\big|\psi_0\big\rangle^c$ in den exakten Grundzustand des Gesamtsystems $\big|\psi\big\rangle^c$ transformiert. Die Grundzustandsenergie des Systems ist dann z. B.:

$$E_g = \frac{\big\langle\psi_0\big|H\big|\psi\big\rangle}{\big\langle\psi_0\big|\psi\big\rangle} = \big\langle\psi_0\big|H\Omega\big|\psi_0\big\rangle^c \tag{2.47}$$

Ebenso können Erwartungswerte eines beliebigen Operators A berechnet werden:

$$\langle A\rangle = \frac{\big\langle\psi\big|A\big|\psi\big\rangle}{\big\langle\psi\big|\psi\big\rangle} = \big\langle\psi_0\big|\Omega^\dagger A\Omega\big|\psi_0\big\rangle^c \tag{2.48}$$

Weiterhin gilt für einen beliebigen (primären oder zusammengesetzten) Operator A die Beziehung:

$$0 = \big\langle\psi_0\big|AH\Omega\big|\psi_0\big\rangle^c \tag{2.49}$$

Diese Identität ist anschaulich klar, wenn man bedenkt, daß Ω den Zustand $|\psi_0\rangle^c$ in den exakten Grundzustand $|\psi\rangle^c$ transformiert und der Erwartungswert von AH daher faktorisiert, also die Kumulante verschwindet.

Die bisher angegebenen Zusammenhänge sind alle noch exakt. Die verschiedensten Arten von Störungsentwicklungen setzten jetzt bei der Auswertung von Ω an. Eine mögliche Form für Ω (nach Potenzen von H_1 entwickelt) ist z. B.:

$$\Omega = \lim_{z \to 0} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{z - H_0} H_1 \right)^n$$

Die damit berechneten Energiekorrekturen zur Grundzustandsenergie reproduzieren gerade die Ergebnisse einer herkömmlichen RAYLEIGH–SCHRÖDINGER–Störungstheorie.

Die Gesamtenergie eines Systems ist eine extensive Größe, d. h. sie skaliert in gleicher Weise wie das Volumen des Systems. Diese wichtige Eigenschaft sollten auch alle mit Näherungsverfahren berechneten Energien aufweisen. Eine vor allem in feldtheoretischen Ansätzen oft genutzte Variante der Störungstheorie arbeitet mit sogenannten diagrammatischen Methoden, wobei jeder Term in der Störungsentwicklung grafisch symbolisiert wird. Das richtige Skalierungsverhalten der berechneten Energien wird dann erreicht, wenn (nach geeigneter Klassifizierung) nur die sogenannten „verbundenen“ Diagramme berücksichtigt werden (siehe z. B. [5] und [8]).

Diese Skalierungseigenschaft kann ebenso durch die Formulierung mit Kumulanten gesichert werden. Man kann zeigen, daß die Berechnung von Kumulantenausdrücken äquivalent zur Summation verbundener Diagramme ist. Die Kumulantenformulierung hat dabei jedoch den Vorteil, daß sie nicht den Beschränkungen der Diagrammtechnik unterworfen ist. So werden diagrammatische Beschreibungen schnell äußerst kompliziert, sobald H_0 kein reiner Einteilchenoperator mehr ist. Dies ist aber gerade der Fall bei der Behandlung von stark korrelierten Systemen, wo der Korrelationsterm als dominanter Teil mit H_0 identifiziert wird. Diese Tatsache erklärt, warum der Kumulantenformalismus gerade zur Beschreibung stark korrelierter Systeme besonders geeignet erscheint[8].

2.4.3 Verbindung zu unserem Verfahren

Um aus den dargestellten, allgemein gültigen Beziehungen die in Kap. 2.2 verwendeten Gleichungen abzuleiten, nutzen wir besondere Eigenschaften des Ω–Operators und der Kumulanten aus.

[8] Für eine detaillierte Darstellung dieser Zusammenhänge sei wiederum auf [6] verwiesen.

Mit der Annahme, Ω sei eine analytische, universelle (d. h. in der Form von H und S unabhängige) Funktion eines primären Operators S, kann man zeigen [14], daß diese Funktion von der Form $f(S) = e^S$ sein muß. Um S zu bestimmen, wurde in Ref. [14] folgendes Vorgehen vorgeschlagen.

S wird in einer Basis $\{A_\nu\}$ des Liouville–Raumes aller Operatoren durch $S = \sum_\nu \alpha_\nu A_\nu$ dargestellt. Unter Ausnutzung der Beziehung (2.49) für A_ν ergibt sich ein Satz von Gleichungen zur Bestimmung der α_ν:

$$0 = \big\langle \psi_0 \big| A_\nu H e^S \big| \psi_0 \big\rangle^c \tag{2.50}$$

In Abhängigkeit vom konkreten System bleiben jedoch einige α_μ unbestimmt, nämlich die, für die $A_\mu \big| \psi_0 \big\rangle = 0$ ist oder linear abhängige Zustände liefert. Diese Koeffizienten α_ν können also zu Null gewählt werden und zur Darstellung von $\Omega = \sum_\nu \eta_\nu S_\nu$ ist nur eine Teilmenge $\{S_\nu\}$ der vollständigen Basis $\{A_\nu\}$ notwendig. Anders formuliert muss $\{\big|\psi_\nu\big\rangle = S_\nu \big|\psi_0\big\rangle\}$ eine Basis des Hilbertraumes darstellen, die mindestens einen Unterraum aufspannt, der den exakten Grundzustand $\big|\psi\big\rangle$ des Systems enthält.

Die Exponentialform von Ω ermöglicht endlich, unter Ausnutzung einer weiteren Eigenschaft von Kumulantenerwartungswerten, die Ableitung des in Kap. 2.2 vorgestellten Ansatzes (2.12) und der Bestimmungsgleichung (2.16).

Es gilt für jeden primären Operator S und einen beliebigen (primären oder zusammengesetzten) Operator A die Beziehung:

$$\big\langle \phi \big| e^{S^\dagger} A e^S \big| \psi \big\rangle^c = \big\langle e^S \phi \big| A \big| e^S \psi \big\rangle^c \tag{2.51}$$

Mit Hilfe dieser Relation kann man also $\Omega = e^{\sum \eta_\nu S_\nu}$ aus der Kumulantenordnung herausziehen und direkt auf die Zustände anwenden. Damit ist $\big| e^{\sum \eta_\nu S_\nu} \psi_0 \big\rangle^c$ schon fast identisch mit unserem Ansatz (2.12), nur das bis jetzt immer noch Kumulanten ausgewertet werden müssen. Für die Berechnung von Erwartungswerten gehen wir von Gl. (2.48) aus und finden mit Hilfe von (2.51):

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &= \big\langle \psi_0 \big| e^{\sum \eta_\nu^* S_\nu^\dagger} \; A \; e^{\sum \eta_\nu S_\nu} \big| \psi_0 \big\rangle^c \\
&= \big\langle e^{\sum \eta_\nu S_\nu} \psi_0 \big| \; A \; \big| e^{\sum \eta_\nu S_\nu} \psi_0 \big\rangle^c \\
&= \frac{\big\langle e^{\sum \eta_\nu S_\nu} \psi_0 \big| \; A \; \big| e^{\sum \eta_\nu S_\nu} \psi_0 \big\rangle}{\big\langle e^{\sum \eta_\nu S_\nu} \psi_0 \big| e^{\sum \eta_\nu S_\nu} \psi_0 \big\rangle} \qquad \text{(vgl. Gl. (2.17))} \\
&= \frac{\big\langle \psi \big| A \big| \psi \big\rangle}{\big\langle \psi \big| \psi \big\rangle}
\end{aligned}$$

[Strenggenommen funktioniert diese Schlußweise nur mit primären Operatoren A. Es wird noch zu diskutieren sein, welche Auswirkungen diese Tatsache auf unser Verfahren hat.]

Um die Bestimmungsgleichungen (2.16) für die Fluktuationsstärken abzuleiten, starten wir in Analogie zu Gl. (2.50) mit Gl. (2.49) und setzen diesmal $A = \Omega^\dagger S_\nu$ (A kann ein beliebiger primärer oder zusammengesetzter Operator sein). Vorausgesetzt, daß $\Omega \big| \psi_0 \big\rangle^c = \big| \psi \big\rangle^c$ den exakten Grundzustand erzeugt, folgt dann

$$\begin{aligned} 0 &= \big\langle \psi_0 \big| \Omega^\dagger S_\nu H \Omega \big| \psi_0 \big\rangle^c = \big\langle \Omega\psi_0 \big| S_\nu H \big| \Omega\psi_0 \big\rangle^c \\ &= \frac{\big\langle \psi \big| S_\nu H \big| \psi \big\rangle}{\big\langle \psi \big| \psi \big\rangle} - \frac{\big\langle \psi \big| S_\nu \big| \psi \big\rangle \big\langle \psi \big| H \big| \psi \big\rangle}{\big\langle \psi \big| \psi \big\rangle^2} \\ &= \frac{1}{\big\langle \psi \big| \psi \big\rangle} \big\langle \psi \big| S_\nu H - E_g S_\nu \big| \psi \big\rangle \end{aligned}$$

woraus mit $E_g \big\langle \psi \big| = \big\langle \psi \big| H$ sofort das Äquivalent zu Gl. (2.16) folgt:

$$0 = \big\langle \psi \big| [H, S_\nu] \big| \psi \big\rangle \tag{2.52}$$

Mit dieser knappen Darstellung soll der enge Zusammenhang des in Kapitel 2.2 ad hoc eingeführten Ansatzes für die Test–Wellenfunktion mit üblichen Näherungsverfahren des Kumulantenformalismus verdeutlicht werden. Für die späteren Rechnungen ist dieser theoretische Hintergrund nur von untergeordneter Bedeutung.

3 Anwendung der Methode in einer Dimension

In diesem Kapitel soll die Anwendung unseres Verfahrens auf die Untersuchung der Grundzustandseigenschaften des Einband–Hubbard–Modells beschrieben werden. Zu Beginn konzentrieren wir unsere Betrachtungen auf das eindimensionale Hubbard–Modell. Es ist bekannt, daß das System in einer Dimension *keinen* Mott–Metall–Isolator–Übergang bei endlicher Korrelationsstärke $U_c \sim O(t)$ besitzt, sondern $U_c = 0^+$ gilt. Deshalb existiert bei endlichem U auch kein Übergang von einer nichtmagnetischen zu einer magnetischen Phase. Trotzdem hat das folgende Vorgehen mehrere Vorteile. Zum Einen ist die eindimensionale Kette ein recht überschaubares System und eignet sich daher, um erste Erfahrungen mit dem Verfahren und bei der Konstruktion geeigneter Fluktuationsoperatoren zu sammeln. Zum Zweiten kennen wir aus der Bethe–Ansatz–Lösung [11] die exakte Lösung für die Grundzustandsenergie und haben somit, was diese Größe anbetrifft, einen direkten Anhaltspunkt für die Güte der verschiedenen Varianten des Näherungsverfahrens.

3.1 Ansatz mit einer Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_t$

3.1.1 Ansatz und Gleichungen

Wir betrachten das Hubbard–Modell auf einer eindimensionalen Kette, deren Plätze wie in Abbildung 2.3 angegeben numeriert sind. Als ersten Versuch verwenden wir in der einfachsten Variante des Ansatzes (2.12) nur einen einzigen Typ von Ladungsfluktuationen. Die Test–Wellenfunktion enhält also nur einen Fluktuationsoperator $\hat{\mathrm{F}}_t$ (der Index $_t$ ist hier Bezeichner, keine Variable):

$$\left|\psi_t\right\rangle = \exp\left(\lambda_t \sum_i \hat{\mathrm{F}}_{t,i}\right)\left|\text{Néel}\right\rangle \tag{3.1}$$

$\hat{\mathrm{F}}_{t,i}$ ist eine Ladungsfluktuation, die ein Elektron vom Platz i auf einen der beiden nächsten Nachbarplätze $i+1$ oder $i-1$ bewegt:

$$\hat{\mathrm{F}}_{t,i} = c^\dagger_{i-1,\sigma(i)} c_{i,\sigma(i)} + c^\dagger_{i+1,\sigma(i)} c_{i,\sigma(i)} \tag{3.2}$$

Dabei bezeichnet $\sigma(i)$ wieder den Spin, wie er im Néel–Zustand (2.13) des Ansatzes (3.1) vorliegt. Diese Konstruktion soll sicherstellen, daß $\hat{\mathrm{F}}_t$ keine Elektronen bewegt, die schon andere Fluktuationen hinter sich haben.

Die Test–Wellenfunktion $|\psi_t\rangle$ hängt demzufolge nur von einem Parameter λ_t ab und für dessen Bestimmung reduziert sich das allgemeine Gleichungssystem (2.16) auf eine einzige Gleichung. Wie man diese Gleichung findet, wurde am Beispiel des hier benutzten $\hat{\mathrm{F}}_t$–Operators ausführlich in Abschnitt 2.3.3 dargestellt.

$$\langle\psi_t|[\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{F}}^\dagger_{t,0}]|\psi_t\rangle = \frac{2}{\nu}\left[\lambda_t^2 t q_t + \lambda_t^2 t q_t^2 + \lambda_t^2 t \frac{1}{\nu} - t q_t + U \lambda_t q_t \frac{1}{\nu}\right] \stackrel{!}{=} 0 \tag{3.3}$$

Die Einzelplatznorm und die verwendeten Wahrscheinlichkeiten berechnen sich leicht zu (s.a. Abschnitt 2.3.1 & 2.3.2):

$$\nu = 1 + 2\lambda_t^2 p_t \;, \qquad\qquad p_t = q_t = 1 - \frac{\lambda_t^2}{\nu} p_t \tag{3.4}$$

Nach der Substitution von q_t wird das verbleibende Gleichungssystem, bestehend aus der Bestimmungsgleichung (3.3) und den Gleichungen (3.4), mit Hilfe von numerischen Standardverfahren gelöst. Man erhält in Abhängigkeit von U numerische Werte für λ_t, ν und p_t. Eine explizite Form der Lösungen in Abhängigkeit von U läßt sich im allgemeinen nicht finden. Von den meist mehreren Lösungen werden nur diejenigen weiter in Betracht gezogen, deren Werte in vernünftigen Parameterbereichen liegen. Das bedeutet, alle Größen werden reel gewählt. Weiterhin soll für die Wahrscheinlichkeit p_t gelten $p_t \in [0, 1]$, für den Fluktuationsparameter λ_t entsprechend $\lambda_t \in [0, 1]$ sowie $\nu \geq 1$.

3.1.2 Ergebnisse

In Abbildung 3.1 sind die Lösungen der Bestimmungsgleichungen zusammengefaßt dargestellt. Der Fluktuationsparameter λ_t fällt für stärker werdende Korrelationsstärke U schnell ab, weil die bei Fluktuationen entstehenden Doppelbesetzungen und damit die Fluktuationen selbst unterdrückt werden. Ein kleiner werdender Fluktuationsparameter λ_t bedeutet auch weniger störende Fluktuationen, sodaß die Wahrscheinlichkeit p_t, daß eine Fluktuation stattfinden kann, anwächst. Wegen dem bei großen U immer kleiner werdenden Parameter λ_t geht die Test–Wellenfunktion $|\psi_t\rangle$ zunehmend in den Néel–Zustand über. Analog dazu geht die Einzelplatznorm ν gegen eins, d.h. gegen die Norm des Néel–Zustandes. Auch p_t wird nahezu eins, da im Néel–Zustand die Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_t$

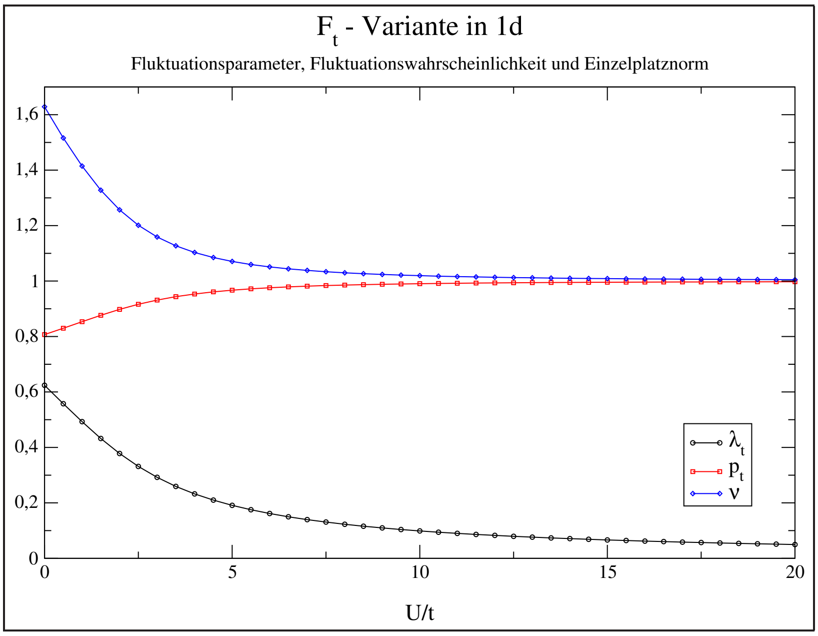

Abbildung 3.1: Ergebnisse des $\hat{\mathrm{F}}_t$–Ansatzes

immer erlaubt ist.

Die Kenntnis der Fluktuationsparameter sagt noch nicht viel über die Physik der berechneten Test–Wellenfunktion aus. Daher werden mit Hilfe von λ_t weitere physikalische Observable bestimmt. Wie schon bei der Vorstellung des Hubbard–Modells in Abschnitt 2.1 ausgeführt wurde, sollen die Energie pro Teilchen ε sowie die Untergittermagnetisierung μ_{stagg} betrachtet werden. Beide lassen sich mit dem Ansatz (3.1) nach dem Verfahren von Abschnitt 2.3.3 berechnen. Man findet

$$\varepsilon = \frac{2}{\nu} q_t \left(-2t\lambda_t + U \frac{1}{\nu} \lambda_t^2 \right) \qquad \mu_{stagg} = \frac{1}{\nu} \left(1 - 2\lambda_t^2 q_t \right) \tag{3.5}$$

In Abb. 3.2 wird das Ergebnis für ε mit der exakten Lösung (aus [11]) verglichen. Dabei stellt man fest, daß ε die richtige qualitative Abhängigkeit von U zeigt. Die Werte liegen allerdings deutlich zu hoch. Diese Tatsache ist angesichts der sehr einfachen Struktur des Ansatzes (3.1) mit nur einer Fluktuation nicht überraschend. Entsprechend einer Eigenschaft von Variationsverfahren sollte die Energie bei einer Verbesserung der Test–Wellenfunktion durch Erweiterung des Parameterraumes sinken. Da bei der hier durchgeführten Berechnung von ε auch Näherungen gemacht werden, die über ein reines Variationsverfahren

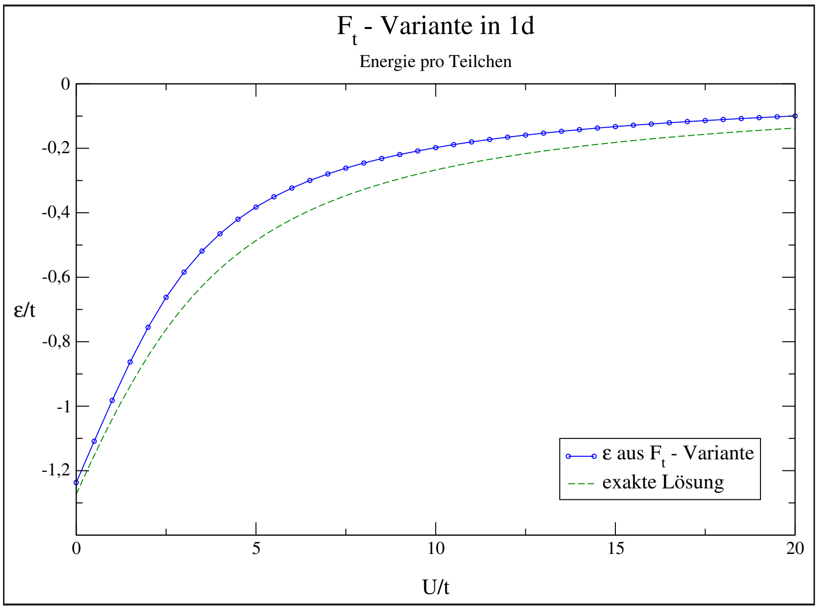

Abbildung 3.2: Energie pro Teilchen im Vergleich mit den exakten Werten aus [11]

hinausgehen, ist es jedoch nicht ausgeschlossen, daß man Energiewerte auch unterhalb der exakten Lösung erhalten könnte.

Die gute Übereinstimmung der Energie für sehr kleine U ist erstaunlich. In Anbetracht der kurzreichweitigen Fluktuationen und der lokalen Natur des Ansatzes wäre eine größere Abweichung nicht überraschend gewesen, da der Bewegungsradius der Elektronen stark eingeschränkt ist. Diese Ergebnis unterstützt die These, daß die Grundzustandsenergie leider nur grobe Hinweise auf die Qualität einer Näherungslösung geben kann.

Im Bereich großer U kommt die berechnete Energie dem exakten Wert im Vergleich zu dem Fall mittlerer U–Werte wieder näher. Sie bleibt jedoch immer noch deutlich größer. Wie oben schon erwähnt, geht $|\psi_t\rangle$ in diesem Regime in den Néel–Zustand über, da der Parameter λ_t nahezu verschwindet. Die Test–Wellenfunktion enthält demzufolge dann kaum noch Fluktuationen. Aus Kap. 2.1 weiß man jedoch, daß der Grundzustand des Hubbard–Modells auch für große U einen nicht verschwindenden Anteil an Quantenfluktuationen enthalten muß. Dieses Defizit ist verantwortlich für die zu hohe Grundzustandsenergie des Test–Zustandes $|\psi_t\rangle$.

Das soeben gezeichnete Bild bestätigt sich auch bei der Betrachtung der Untergittermagnetisierung μ_{stagg} in Abbildung 3.3. Im Bereich großer U geht μ_{stagg} gegen eins entsprechend der antiferromagnetischen Ordnung des Néel–Zustandes. Die mit kleineren U zunehmenden Fluktuationen zerstören dann diese Ordnung und die Magnetisierung fällt ab bis auf einen Wert von weniger

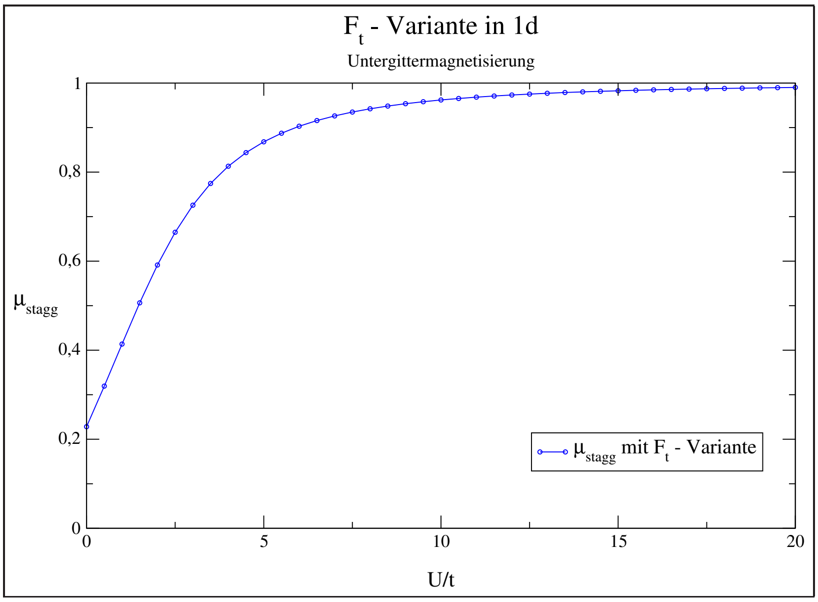

Abbildung 3.3: Untergittermagnetisierung mit $\hat{\mathrm{F}}_t$–Ansatz

als 1/4 für freie Elektronen. Die exakte Untergittermagnetisierung des eindimensionalen Hubbard–Modells sollte allerdings im gesamten Parameterbereich $U \in [0, \infty]$ verschwinden, wie es oben bereits erwähnt wurde. Das hier durchgeführte Verfahren ist deshalb für den Fall einer Dimension nicht geeignet, die Untergittermagnetisierung korrekt zu berechnen.

Zusammenfassend läßt sich also feststellen, daß ein Hauptgrund für die Abweichungen von den exakten Resultaten die zu starke Unterdrückung der Fluktuationen im Bereich großer U ist. Um dieses Manko des Ansatzes (3.1) zu beheben, ist eine genauere Differenzierung der Fluktuationen und damit eine größere Zahl von Parametern notwendig. Die vielleicht auffälligste Ungenauigkeit ist die fehlende Unterscheidung, ob bei einer Fluktuation eine Einfach– oder eine Doppelbesetzung erzeugt wird. Im Ansatz $|\psi_t\rangle$ werden diese beiden Anteile der Test–Wellenfunktion, die sich mit wachsendem U immer stärker energetisch unterscheiden, mit demselben Parameter λ_t gewichtet. Im folgenden Abschnitt soll untersucht werden, ob eine Verbesserung dieser Struktur auch genauere Ergebnisse liefert.

3.2 Unterscheidung von Einfach– und Doppelbesetzungen

3.2.1 Ansatz und Gleichungen

Um den Einfluß der On–site–Abstoßung U besser zu modellieren, werden Fluktuationsoperatoren eingeführt, die unterscheiden, ob eine Einfach– oder eine Doppelbesetzung erzeugt wird. Im Prinzip läuft diese Idee auf eine Aufspaltung der bisher verwendeten Ladungsfluktuation $\hat{\mathrm{F}}_t$ in

$$\hat{\mathrm{F}}_{t,i} = \underbrace{\hat{\mathrm{F}}_{t,i} \ \ \hat{\mathrm{n}}_{j,\sigma(j)}}_{=:\hat{\mathrm{F}}_{d,i}} + \underbrace{\hat{\mathrm{F}}_{t,i} \ \ (1 - \hat{\mathrm{n}}_{j,\sigma(j)})}_{=:\hat{\mathrm{F}}_{e,i}} \tag{3.6}$$

hinaus. j ist dabei der jeweilige Zielplatz der Fluktuation, in 1d also $i-1$ oder $i+1$. Der Operator $\hat{\mathrm{F}}_e$ bewegt das Elektron nur, wenn der Zielplatz nicht besetzt ist und erzeugt damit immer eine Einfachbesetzung. Entsprechend erzeugt $\hat{\mathrm{F}}_d$ nur Doppelbesetzungen.

Der neue Ansatz enthält jetzt zwei Parameter λ_d und λ_e:

$$\big|\psi_{ed}\big\rangle = \exp\left(\sum_i \left\{\lambda_d \, \hat{\mathrm{F}}_{d,i} + \lambda_e \, \hat{\mathrm{F}}_{e,i}\right\}\right) \big|\mathrm{Néel}\big\rangle \tag{3.7}$$

Prinzipiell folgt das weitere Lösungsverfahren nun den gleichen Schritten, wie im vorigen Abschnitt. Die beiden Bestimmungsgleichungen für die Parameter findet man mit der in Abschnitt 2.3.3 beschriebenen Prozedur. Für die Gleichung (3.8) unten ist die Herkunft der einzelnen Terme noch einmal in Anhang A tabelliert.

$$\begin{aligned} 0 &\overset{!}{=} \big\langle \psi_{ed} \big| [\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{d,0}] \big| \psi_{ed} \big\rangle \\ &= 2t \frac{1}{\nu^2} \left[\lambda_d q_{ed} \left(\lambda_d + \lambda_d \frac{1}{\nu} q_{ed} + \lambda_e \left(1 - \frac{1}{\nu}\right) q_{ed} \right) + \lambda_d^2 \frac{1}{\nu} - q_{ed} + \frac{U}{t} \lambda_d q_{ed} \right] \\ &\quad + 2t \frac{1}{\nu} \frac{\lambda_d - \lambda_e}{\nu} \left(\lambda_d q_{ed}^2 + \lambda_d \frac{1}{\nu} q_{ed} + \lambda_e \left(1 - \frac{1}{\nu}\right) q_{ed} \right) \end{aligned} \tag{3.8}$$

$$
\begin{aligned}
0 &\stackrel{!}{=} \langle\psi_{ed}|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{e,0}]|\psi_{ed}\rangle \\
&= 2t\frac{1}{\nu}\left(1-\frac{1}{\nu}\right)\left[\lambda_e q_{ed}\left(\lambda_e+\lambda_d\frac{1}{\nu}q_{ed}+\lambda_e\left(1-\frac{1}{\nu}\right)q_{ed}\right)+\lambda_e^2\frac{1}{\nu}-q_{ed}\right] \\
&\quad + 2t\left(1-\frac{1}{\nu}\right)\frac{\lambda_e-\lambda_d}{\nu}\left(\lambda_d q_{ed}^2+\lambda_d\frac{1}{\nu}q_{ed}+\lambda_e\left(1-\frac{1}{\nu}\right)q_{ed}\right)
\end{aligned}
\tag{3.9}
$$

Es werden die folgenden Wahrscheinlichkeiten verwendet:

$$
p_d=\frac{1}{\nu}q_{ed}\ , \qquad p_e=\left(1-\frac{1}{\nu}\right)q_{ed}\ , \qquad q_{ed}=1-\frac{\lambda_d^2}{\nu}p_d-\frac{\lambda_e^2}{\nu}p_e \tag{3.10}
$$

Die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten p_e und p_d muß noch etwas ausführlicher kommentiert werden. Zunächst beinhalten jetzt beide Größen einen Faktor, der angibt, ob der Zielplatz j der Fluktuation besetzt ist $(1/\nu)$ oder nicht $(1-1/\nu)$. Der Faktor q_{ed} soll ausschließen, daß der Zielplatz j schon durch eine andere Fluktuation ($\hat{\mathrm{F}}_e$ oder $\hat{\mathrm{F}}_d$) mit einem Spin $\sigma(i)$ besetzt wurde und damit blockiert wäre. Für p_d scheint dabei ein Fehler begangen worden zu sein. Man könnte nämlich argumentieren, daß in p_d die $\hat{\mathrm{F}}_e$–Fluktuation nicht ausgeschlossen werden braucht, da der Zielplatz von $\hat{\mathrm{F}}_d$ immer besetzt sein muß und eine $\hat{\mathrm{F}}_e$–Fluktuation auf diesen Platz demzufolge gar nicht möglich ist. Bei der Ableitung der Formel für ν in Abschnitt 2.3.1 und der Darstellung der verwendeten Näherungen wurde aber vereinbart, daß auch direkt benachbarte Elektronen sich nur „im Mittel“ sehen, sozusagen durch die diffuse Brille der Wahrscheinlichkeiten. Daher ist auf den Zielplatz j von $\hat{\mathrm{F}}_d$ immer auch eine $\hat{\mathrm{F}}_e$–Fluktuation mit der Wahrscheinlichkeit p_e möglich, unabhängig davon, welche Fluktuation von der anderen Seite her stattfinden soll. Aus diesem Grund wird auch in den beiden Bestimmungsgleichungen durchgängig die Wahrscheinlichkeit q_{ed} verwendet. Ansätze zur Verbesserung dieser streng lokalen Sichtweise werden in Kapitel 6 angedeutet.

3.2.2 Ergebnisse

Da die Aufteilung (3.6) den ursprünglichen Ansatz (3.1) enthält, ist zu erwarten, daß für $U=0$, wenn Doppelbesetzungen nicht mehr energetisch benachteiligt sind, die Ergebnisse mit denen aus der $\hat{\mathrm{F}}_t$–Rechnung identisch werden. Wie in Abb. 3.4 zu sehen ist, wird diese Erwartung bestätigt. Die Fluktuationsstärken λ_d und λ_e gehen bei verschwindendem U ineinander über und sind dann gleich dem Wert von λ_t. Bei genauerer Betrachtung der Gleichungen sieht man auch, daß das Gleichungssystem (3.8)–(3.10) bei $U=0$ für $\lambda_d=\lambda_e\equiv\lambda_t$ und $p_t=p_e+p_d$ bis auf Vorfaktoren äquivalent zur Bestimmungsgleichung (3.3) für λ_t wird.

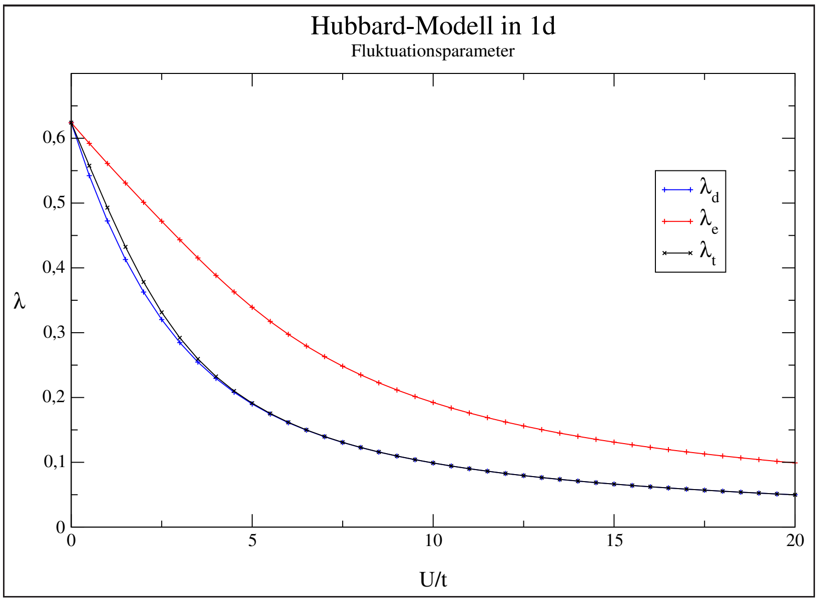

Abbildung 3.4: Fluktuationsparameter für das $\hat{\mathrm{F}}_t$– und das $\hat{\mathrm{F}}_d/\hat{\mathrm{F}}_e$–Modell

Betrachten wir nun die charakteristische Variable Energie pro Teilchen um festzustellen, ob tatsächlich eine verbesserte Beschreibung des Grundzustandes erreicht wurde. Wie in Abb. 3.5 zu erkennen ist, hat sich die Grundzustandsenergie gegenüber den Ergebnissen der $\hat{\mathrm{F}}_t$–Rechnung nur geringfügig dem exakten Wert angenähert. Die Fluktuationsparameter λ_d und λ_e fallen im Bereich großer U wieder auf kleine Werte ab, so daß $|\psi_{ed}\rangle$ genauso wie $|\psi_t\rangle$ mit steigendem U in den Néel–Zustand übergeht und alle damit verbundenen Abweichungen auftreten. Mit der Einführung der Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_e$, die nur Einfachbesetzungen erzeugt und daher nicht durch große Korrelationsenergien U benachteiligt sein sollte, konnten offenbar nicht die wesentlichen Fluktuationsanteile modelliert werden. Der Grund ist, daß die Wahrscheinlichkeit für diese Fluktuation p_e für große U stark abfällt, da $|\psi_{ed}\rangle$ wie schon erwähnt in den Néel–Zustand übergeht und immer weniger unbesetzte Plätze für diese Art Fluktuation zur Verfügung stehen.

Aus Betrachtungen des Heisenberg–Modells [4, S. 280] ist aber klar, daß der Grundzustand des Hubbard–Modells im Bereich starker Korrelationen Spinfluktuationen enthalten muß. Unternehmen wir also den Versuch, zur weiteren Verbesserung des Ansatzes diese Spinfluktuationen direkt zur Test–Wellenfunktion hinzuzufügen.

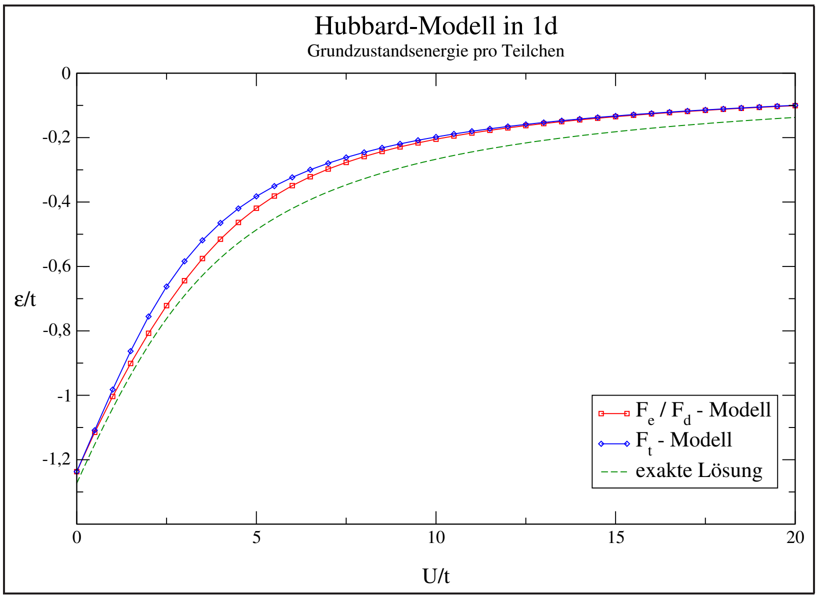

Abbildung 3.5: Grundzustandsenergie pro Teilchen in Abhängigkeit von der Korrelationsstärke U/t

3.3 Einführung von Spinfluktuationen

3.3.1 Ansatz

Zur weiteren Präzisierung der Beschreibung sollen in der nächsten Variante des Ansatzes für die Test–Wellenfunktion Spinfluktuationen enthalten sein. Die einfachste Spinfluktuation ist ein Spin–Flip, also ein Austausch zwischen nächsten Nachbarn. Die naheliegende Idee, diesen weiteren Fluktuationsoperator einfach zum vorhandenen Ansatz $\left|\psi_{ed}\right\rangle$ hinzuzufügen, erweist sich als problematisch. Um das zu verstehen, müssen die einzelnen Fluktuationsprozesse genauer betrachtet werden.

Der Spin–Flip–Operator $\hat{\mathrm{F}}_f$ ($_f$ für Flip) wird definiert als:

$$\hat{\mathrm{F}}_f = -S^{\sigma}_{i+1} S^{\bar{\sigma}}_{i} = c^{\dagger}_{i+1,\sigma} c_{i,\sigma} c^{\dagger}_{i,\bar{\sigma}} c_{i+1,\bar{\sigma}} \tag{3.11}$$

wobei S^{σ}_{i+1} und $S^{\bar{\sigma}}_{i}$ Spin–Flip–Operatoren an den Plätzen $i+1$ und i darstellen. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde mit σ der entsprechende Néel–Spin $\sigma(i)$ bezeichnet und es ist $\bar{\sigma} = 1 - \sigma$.

Anstelle der Spin–Flip–Operatoren S^{+}– und S^{-} wollen wir im folgenden die Erzeuger/Vernichter–Schreibweise verwenden. Dabei wird besonders deutlich, daß es sich bei dem Fluktuationsoperator $\hat{\mathrm{F}}_f$ um einen Zweiteilchen–Operator handelt. Das Elektron vom Platz $i+1$ wird mit dem Elektron auf Platz i ausgetauscht.

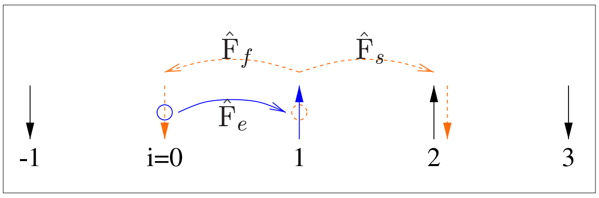

Abbildung 3.6: Aufteilung von $\hat{\mathrm{F}}_e$ in $\hat{\mathrm{F}}_f$ und $\hat{\mathrm{F}}_s$

Erinnern wir uns zum Vergleich noch einmal an die $\hat{\mathrm{F}}_e$–Fluktuation und interessieren uns dafür, wohin das Elektron des Zielplatzes (der ja frei sein muß) wandert, bevor die $\hat{\mathrm{F}}_e$–Fluktuation stattfindet. Wenn es sich nach links (entsprechend der Bezeichnung in Abb. 3.6) auf den Ausgangsplatz ($i=0$) der $\hat{\mathrm{F}}_e$–Fluktuation bewegt, so entspricht dieser Prozeß zusammen mit der dann stattfindenden $\hat{\mathrm{F}}_e$–Fluktuation gerade dem oben beschriebenen Austausch, also einem Spin–Flip $\hat{\mathrm{F}}_f$. Bewegt es sich dagegen nach rechts, wird auf dem übernächsten Platz ($i=2$) eine Doppelbesetzung erzeugt. Würde also $\hat{\mathrm{F}}_f$ zu den Operatoren $\hat{\mathrm{F}}_d$ und $\hat{\mathrm{F}}_e$ im Ansatz $|\psi_{ed}\rangle$ einfach hinzugefügt, wären die durch $\hat{\mathrm{F}}_f$ beschriebenen Fluktuationsprozesse, zum Teil schon in dem durch $\hat{\mathrm{F}}_e$ erzeugten Unterraum enthalten. Wie sich zeigen läßt, wäre die damit berechnete Test–Wellenfunktion nicht falsch. Die aus den verschiedenen Fluktuationsoperatoren resultierenden Beiträge zur Test–Wellenfunktion sind dann jedoch nicht mehr linear unabhängig voneinander. Die Wichtungskoeffizienten einzelner Fluktuationsprozesse wären eine Linearkombination mehrerer Fluktuationsparameter. Insbesondere bei der Berechnung von Erwartungswerten ist diese Konstellation sehr ungünstig, da leicht Prozesse doppelt gezählt oder vergessen werden können. Um derlei Problemen im weiteren aus dem Weg zu gehen, werden die Fluktuationsoperatoren disjunkt konstruiert, d.h. die entsprechenden Anteile, die jeder Fluktuationsoperator zur Test–Wellenfunktion beiträgt sind paarweise orthogonal zueinander.

In diesem Fall bedeutet das, anstelle der Einteilchen–Fluktuation $\hat{\mathrm{F}}_e$

$$\hat{\mathrm{F}}_{e,i} = \overbrace{c^\dagger_{i-1,\sigma} c_{i,\sigma}(1-\hat{\mathrm{n}}_{i-1,\bar{\sigma}})}^{\text{Anteil „nach links"}} + \overbrace{c^\dagger_{i+1,\sigma} c_{i,\sigma}(1-\hat{\mathrm{n}}_{i+1,\bar{\sigma}})}^{\text{Anteil „nach rechts"}} \tag{3.12}$$

zwei neue Zweiteilchen–Fluktuationen $\hat{\mathrm{F}}_f$ und $\hat{\mathrm{F}}_s$ zu verwenden, wobei

$$\begin{aligned} & \text{Anteil „nach links“} && \text{Anteil „nach rechts“} \\ \hat{\mathrm{F}}_{f,i} &= c^\dagger_{i-1,\sigma} c_{i,\sigma} c^\dagger_{i,\bar\sigma} c_{i-1,\bar\sigma} && + c^\dagger_{i+1,\sigma} c_{i,\sigma} c^\dagger_{i,\bar\sigma} c_{i+1,\bar\sigma} \\ \hat{\mathrm{F}}_{s,i} &= c^\dagger_{i-1,\sigma} c_{i,\sigma} c^\dagger_{i-2,\bar\sigma} c_{i-1,\bar\sigma} && + c^\dagger_{i+1,\sigma} c_{i,\sigma} c^\dagger_{i+2,\bar\sigma} c_{i+1,\bar\sigma} \end{aligned} \tag{3.13}$$

Anschaulich wird also unterschieden, ob das Elektron den Zielplatz von $\hat{\mathrm{F}}_e$ in Richtung Ausgangsplatz ($\hat{\mathrm{F}}_f$) oder weg davon ($\hat{\mathrm{F}}_s$) verlassen hat (s.a. Abb. 3.6). Der Operator $\hat{\mathrm{F}}_s$ erzeugt dabei auf dem übernächsten Nachbarplatz ($i = 2$) explizit eine Doppelbesetzung. Es wird also vorausgesetzt, daß das dortige Elektron noch nicht wegfluktuiert ist. Die Anteile der Wellenfunktion, bei denen dies nicht der Fall ist, werden durch die Zerlegung vernachlässigt.

Der Fluktuationsoperator $\hat{\mathrm{F}}_e$ wird also ersetzt durch die Operatoren $\hat{\mathrm{F}}_f$ und $\hat{\mathrm{F}}_s$. In der folgenden Übersicht sind die neuen Fluktuationen noch einmal tabelliert (dabei sind nur die Anteile „nach rechts“, also in Richtung zunehmendem i dargestellt):

$i =$	-1	0	1	2		-1	0	1	2	
$\hat{\mathrm{F}}_{d,0}$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\longrightarrow$	$\downarrow$	$\circ$	$\Updownarrow$	$\uparrow$	(wie bisher)
$\hat{\mathrm{F}}_{f,0}$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\longrightarrow$	$\downarrow$	$\Downarrow$	$\Uparrow$	$\uparrow$	(Spin–Flip)
$\hat{\mathrm{F}}_{s,0}$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\downarrow$	$\uparrow$	$\longrightarrow$	$\downarrow$	$\circ$	$\Uparrow$	$\Updownarrow$	

Als Besonderheit des Spin–Flip–Operators $\hat{\mathrm{F}}_f$ sei noch erwähnt, daß dieser nur in eine Richtung wirksam ist (o.B.d.A. nach rechts), da sich sonst die Anteile benachbarter Plätze aufheben könnten.

Formal lautet der neue Ansatz dann:

$$\left|\psi_{sdf}\right\rangle = \exp\left(\sum_i \left\{\lambda_s\, \hat{\mathrm{F}}_{s,i} + \lambda_d\, \hat{\mathrm{F}}_{d,i} + \lambda_f\, \hat{\mathrm{F}}_{f,i}\right\}\right) \left|\text{Néel}\right\rangle \tag{3.14}$$

Die entsprechenden Bestimmungsgleichungen für die drei Parameter λ_s, λ_d und λ_f sowie die verwendeten Wahrscheinlichkeiten sind im Anhang B angegeben.

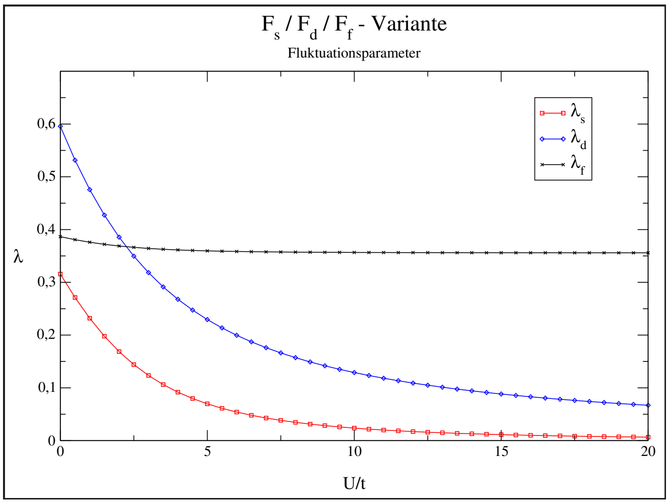

Abbildung 3.7: Fluktuationsparameter des $\hat{\mathrm{F}}_s/\hat{\mathrm{F}}_d/\hat{\mathrm{F}}_f$–Modells

3.3.2 Ergebnisse

Wird nun durch die Berücksichtigung der Spin–Fluktuationen eine verbesserte Beschreibung erreicht? Einen ersten qualitativen Eindruck kann schon die Betrachtung der Fluktuationsparameter in Abb. 3.7 liefern. Dabei fällt auf, daß diesmal nicht alle Fluktuationen mit steigendem U abnehmen, sondern ein konstanter Anteil an Spinfluktuationen (λ_f) bleibt auch bei starken Korrelationen erhalten. Dieses Ergebnis ist konsistent mit den aus dem Heisenberg–Modell bekannten Quantenfluktuationen im Grundzustand.

Abb. 3.8 zeigt, wie sich die zusätzlichen Fluktuationen auf die Energie auswirken. Im Regime großer U können nun fast die exakten Werte reproduziert werden. Diese Verbesserung ist in Anbetracht der großen λ_f–Werte hauptsächlich den Spinfluktuationen zuzuschreiben. Auch für freie Elektronen ist die Grundzustandsenergie fast auf den exakten Wert gesunken, ohne diesen jedoch zu unterschreiten. Interessant ist dagegen die Abweichung von der exakten Lösung bei kleineren $U < 5$, die zum Teil deutlicher als in der $\hat{\mathrm{F}}_e/\hat{\mathrm{F}}_d$–Variante ist. Vermutlich sind dafür die in der Zerlegung (3.13) vernachlässigten Prozesse verantwortlich, also jene wo der Platz $(i+2)$ nicht besetzt ist und damit kein $\hat{\mathrm{F}}_s$ stattfinden kann.

Am deutlichsten macht sich die verbesserte Beschreibung schließlich in der staggered Magnetisierung bemerkbar (Abb. 3.9). Da $|\psi_{sdf}\rangle$ nun auch für große U noch Fluktuationen enthält, wird die durch den Néel–Ausgangszustand vorgeprägte Spinausrichtung zerstört und die Untergittermagnetisierung konvergiert gegen einen Wert etwas oberhalb von 0.6, was deutlich unter dem Maximalwert liegt.

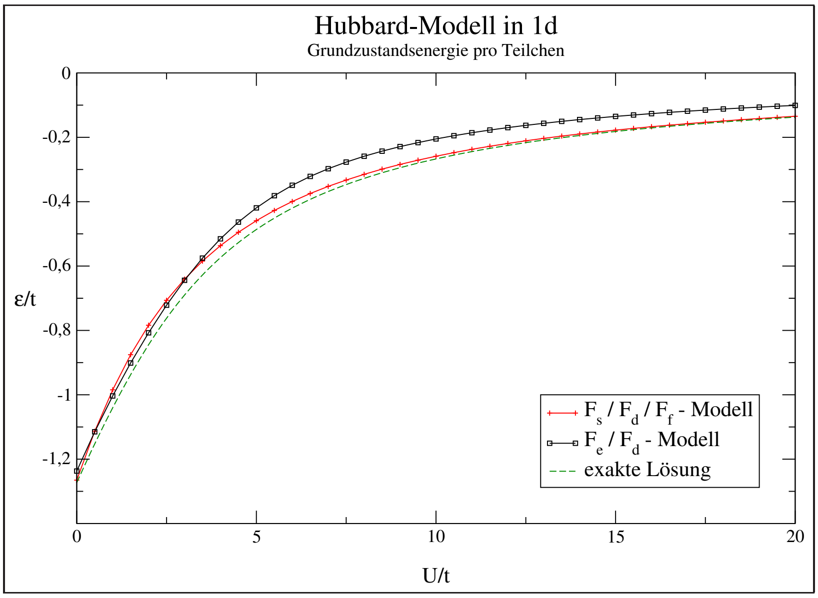

Abbildung 3.8: Energie pro Teilchen im Vergleich

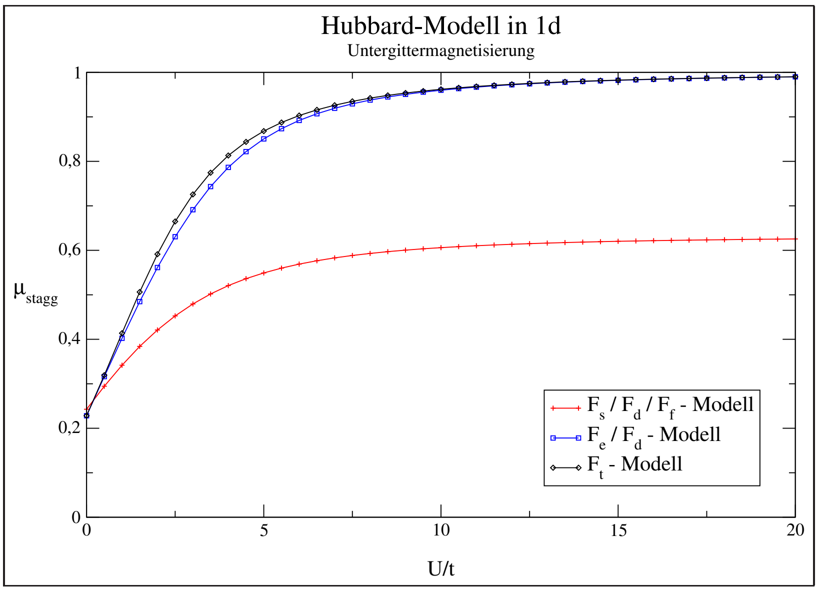

Abbildung 3.9: Untergittermagnetisierung für alle drei Varianten im Vergleich

Trotz der guten Ergebnisse für die Grundzustandsenergie sind wir von einer realistischen Beschreibung der Physik des Hubbard–Modells noch weit entfernt. Allein die viel zu großen Werte für die Untergittermagnetisierung, die eigentlich verschwinden sollte, erfordern weitere Anstrengungen zur Verbesserung. Um dem Ziel einer Modellierung des Metall–Isolator–Übergangs näher zu kommen, ist zuerst die Modellierung einer völlig ungeordneten Phase notwendig. Ein weiteres Hinzufügen von Fluktuationen im Rahmen des bisherigen Vorgehens reicht dazu voraussichtlich nicht aus. Strukturelle Änderungen des Ansatzes sind vonnöten. Ein Versuch in dieser Richtung wird im nächsten Kapitel vorgestellt.

4 Ansatz–Wellenfunktion mit zeitumgekehrten Zuständen

Die mit den bisherigen Ansätzen konstruierten Test–Wellenfunktionen für die Dimension $d = 1$ konnten die nichtmetallische Phase (für $U > 0$) nicht korrekt beschreiben, da die staggered Magnetisierung in allen bisherigen Resultaten (selbst bei $U = 0$) von Null verschieden war. Offenbar sind die durch die Test–Wellenfunktionen beschriebenen Ladungs– und Spinfluktuationen noch nicht ausreichend, um auch eine unmagnetische Konfiguration zu erhalten. Das Hauptziel von Verbesserungen wird es deshalb sein, dem System die Möglichkeit zu geben, auch einen vollkommen zeitumkehrsymmetrischen Zustand einzunehmen, so daß sich eine verschwindende Untergittermagnetisierung ergibt. Die Struktur der bisher verwendeten Ansätze scheint aufgrund der großen Nähe zum Néel–Zustand dafür noch nicht unmittelbar geeignet zu sein.

Die im folgenden diskutierte Vorgehensweise geht auf einen Vorschlag von C. Waidacher zur Beschreibung des Quantenphasenübergangs des Kondo–Modells zurück [17]. Auf der Basis einer Wellenfunktion unter Einschluß von zeitumkehrsymmetrischen Zuständen soll im folgenden durch Erweiterung der bisherigen Methode versucht werden, einen Übergang zwischen einer magnetisch geordneten und einer ungeordneten Phase zu beschreiben.

4.1 Grundlegende Idee

Durch gesonderte Behandlung der Spin–Fluktuationen soll eine Test–Wellenfunktion konstruiert werden, die in ihrem Parameterraum zeitumkehrsymmetrische Konfigurationen zuläßt. Der bisherige Ansatz dient als Ausgangspunkt und wird wie folgt modifiziert.

Als einzige Spinfluktuation $\hat{\mathrm{F}}_f$ verwenden wir wieder einen Austausch benachbarter Spins (s. Def. (3.11)), wobei als Näherung die Spin–Flip–Operatoren aus dem Exponentialfunktionsansatz absepariert werden:

$$\left|\Psi_{mc}\right\rangle = \exp\left(\sum_{\alpha,i} \lambda_\alpha \,\hat{\mathrm{F}}_{\alpha,i}\right) \exp\left(\lambda_f \sum_i \hat{\mathrm{F}}_{f,i}\right) \left|\text{Néel}\right\rangle \tag{4.1}$$

Das bedeutet, die Spinfluktuationen wirken zuerst auf den Néel–Zustand und können nicht von den Ladungsfluktuationen 'behindert' werden. Weiterhin wird auch die Beeinflussung der Spin–Flips untereinander vernachlässigt, d.h. es werden keine Wahrscheinlichkeiten für die Ausführbarkeit einer $\hat{\mathrm{F}}_f$–Fluktuation berücksichtigt, wie das bisher der Fall war. Im Ansatz (4.1) erlaubt die letzte Annahme eine weitere Separation der Spin–Fluktuationen in die beiden Untergitter. Da sich nur direkt benachbarte Spin–Flips behindern können, können sämtliche $\hat{\mathrm{F}}_{f,i}$ auf dem Untergitter mit geradem i unabhängig von den $\hat{\mathrm{F}}_{f,i}$ mit ungeraden i ausgeführt werden:

$$\left|\Psi_{mc}\right\rangle \quad = \quad \exp\left(\sum_{\alpha,i} \lambda_\alpha \,\hat{\mathrm{F}}_{\alpha,i}\right) \left|\psi^f_{mc}\right\rangle \tag{4.2}$$

wobei

$$\left|\psi^f_{mc}\right\rangle \quad = \quad \exp\left(\lambda_f \sum_{i=2l} \hat{\mathrm{F}}_{f,i}\right) \exp\left(\lambda_f \sum_{i=2l+1} \hat{\mathrm{F}}_{f,i}\right) \left|\text{Néel}\right\rangle \tag{4.3}$$

Man beachte dabei, daß die Spin–Flips jeweils nur nach rechts wirken. Im Prinzip werden in (4.3) die Spinfluktuationen dazu benutzt, um aus dem Néel–Zustand den allgemeineren Anfangszustand $\left|\psi^f_{mc}\right\rangle$ zu konstruieren, dessen „Entfernung“ zum Néel–Zustand durch den Parameter λ_f beschrieben wird und der für $\lambda_f = 1$, wie unten gezeigt wird, zeitumkehrsymmetrisch ist. λ_f wird wie die anderen Fluktuationsparameter durch eine Bestimmungsgleichung vom Typ (2.16) festgelegt. $\left|\psi^f_{mc}\right\rangle$ beschreibt nicht mehr nur eine einzelne Anordung der Spins, wie der Néel–Zustand, sondern enthält alle möglichen Spinkonfigurationen des halbgefüllten Gitters, gewichtet mit Potenzen von λ_f.

Der Zustand $\left|\psi^f_{mc}\right\rangle$ wird anstelle des Néel–Zustandes als neuer Ausgangszustand angesehen und es werden wie gewohnt die übrigen Ladungsfluktuationen darauf angewendet. Als nächster Schritt zur Auswertung der Bestimmungsgleichung und für die Berechnung von Erwartungswerten ist wieder der Übergang zur lokalen Sichtweise sinnvoll, wie es in Abschnitt 2.3.1 durchgeführt wurde. Dazu werden im Anteil $\left|\psi^f_{mc}\right\rangle$ der Test–Wellenfunktion die Beiträge der einzelnen Plätze i jetzt nicht mehr separat betrachtet und der Einfluß benachbarter Plätze nur im Rahmen einer Molekularfeldtheorie beschrieben. Stattdessen werden vier benachbarte Plätze zu einem kleinen Mini–Cluster zusammengefaßt

Konfiguration	Ordnung	Fluktuationen	Darstellung
$\lvert A\rangle$	1	$\lvert\widetilde{\psi}^f_{mc}\rangle$	$\underset{-1}{\downarrow}\ \underset{0}{\uparrow}\ \underset{1}{\downarrow}\ \underset{2}{\uparrow}$
$\lvert B\rangle$	λ_f	$F_{f,-1}\lvert\widetilde{\psi}^f_{mc}\rangle$	$\underset{-1}{\Uparrow}\ \underset{0}{\Downarrow}\ \underset{1}{\downarrow}\ \underset{2}{\uparrow}$
$\lvert C\rangle$	λ_f	$F_{f,0}\lvert\widetilde{\psi}^f_{mc}\rangle$	$\underset{-1}{\downarrow}\ \underset{0}{\Downarrow}\ \underset{1}{\Uparrow}\ \underset{2}{\uparrow}$
$\lvert D\rangle$	λ_f	$F_{f,1}\lvert\widetilde{\psi}^f_{mc}\rangle$	$\underset{-1}{\downarrow}\ \underset{0}{\uparrow}\ \underset{1}{\Uparrow}\ \underset{2}{\Downarrow}$
$\lvert E\rangle$	λ_f^2	$F_{f,-1}\ F_{f,1}\lvert\widetilde{\psi}^f_{mc}\rangle$	$\underset{-1}{\Uparrow}\ \underset{0}{\Downarrow}\ \underset{1}{\Uparrow}\ \underset{2}{\Downarrow}$
$\lvert F\rangle$	λ_f^3	$F_{f,0}\ F_{f,-1}\ F_{f,1}\lvert\widetilde{\psi}^f_{mc}\rangle$	$\underset{-1}{\Uparrow}\ \underset{0}{\uparrow}\ \underset{1}{\downarrow}\ \underset{2}{\Downarrow}$

Tabelle 4.1: Spin–Konfigurationen des Mini–Clusters

und aus dem Ansatz herausfaktorisiert. Die durch $\hat{\mathrm{F}}_f$ erzeugten Konfigurationen werden innerhalb dieses Mini–Clusters explizit berücksichtigt und die Wirkung der Spin–Flips in der Umgebung der Einzelplätze (i) wird nicht mehr nur durch Wahrscheinlichkeiten modelliert.

Für die im folgenden verwendeten Fluktuationsoperatoren betrachten wir ein Ensemble von vier benachbarten Plätzen $i = -1, 0, 1, 2$. In Tabelle 4.1 sind alle sechs möglichen Konfigurationen dieses Mini–Clusters aufgelistet, jeweils zusammen mit den erzeugenden Spin–Flips. In Anlehnung an die Definition (2.22) wurde in dieser Tabelle wieder ein neuer Zustand $\lvert\widetilde{\psi}^f_{mc}\rangle$ eingeführt, der im Sinne einer Molekularfeldtheorie den „Rest“ der Test–Wellenfunktion beschreibt. Spinfluktuationen auf den vier Plätzen $i \in \{-1, 0, 1, 2\}$ sind in $\lvert\widetilde{\psi}^f_{mc}\rangle$ nicht mehr enthalten, da sie bereits explizit berücksichtigt sind. Spin–Flips am linken und rechten Rand $i \in \{-2, 2\}$, die über die Clustergrenze hinausreichen, werden vernachlässigt, so daß innerhalb des Mini–Clusters Spin–Erhaltung gilt.

Unter Verwendung der Bezeichnung aus Tabelle 4.1 lautet die Test–Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}\lvert\Psi_{mc}\rangle &= \exp\left(\sum_\alpha \lambda_\alpha\,\hat{\mathrm{F}}_{\alpha,i}\right)\left(\lvert A\rangle + \lambda_f\Big\{\lvert B\rangle + \lvert C\rangle + \lvert D\rangle\Big\} + \lambda_f^2\lvert E\rangle + \lambda_f^3\lvert F\rangle\right)\\ &= \exp\left(\sum_\alpha \lambda_\alpha\,\hat{\mathrm{F}}_{\alpha,i}\right)\Big(1 + \lambda_f(F_{f,-1} + F_{f,0} + F_{f,1}) \qquad (4.4)\\ &\qquad + \lambda_f^2 F_{f,-1}F_{f,1} + \lambda_f^3 F_{f,0}F_{f,-1}F_{f,1}\Big)\lvert\widetilde{\psi}^f_{mc}\rangle\end{aligned}$$

wobei

$$\left|\widetilde{\psi}^{f}_{mc}\right\rangle = \exp\left(\lambda_f \sum_{i\neq -1,0,1} \hat{\mathrm{F}}_{f,i}\right)\left|\text{Néel}\right\rangle \tag{4.5}$$

Mit den restlichen Fluktuationen $\hat{\mathrm{F}}_{\alpha,i}$ wird wie bisher verfahren. Im Anhang C ist nachzulesen, wie sich der Ansatz (4.4) aus der Exponentialdarstellung (4.2) ableitet und wie die dabei auftretenden Reihen aufsummiert werden können. Die Potenzen von λ_f in Gleichung (4.4) sind anschaulich verständlich durch die Anzahl der Spinfluktuationen, die notwendig sind, um die verschiedenen Konfigurationen aus dem Néel–Zustand zu erzeugen.

Anhand der Struktur von Gleichung (4.4) erkennt man, daß, vorausgesetzt, die übrigen $\hat{\mathrm{F}}_\alpha$–Fluktuationen zeichnen keine Spinrichtung aus, $\left|\Psi_{mc}\right\rangle$ im Falle $\lambda_f = 1$ eine völlig zeitumkehrsymmetrische Wellenfunktion darstellt. Das heißt, zu jeder Spin–Verteilung existiert auch ein gleich gewichteter Zustand mit genau entgegengesetzt gerichteten Spins. Insbesondere findet dadurch jede Ladungsfluktuation immer auch auf der jeweils zeitumgekehrten Konfiguration statt. Dieser Fall modelliert also die bisher vermißte symmetrische Phase.

Es sei noch angemerkt, daß die Darstellbarkeit von (4.4) in Exponentialform die Anwendbarkeit der Beziehung (2.51) gewährleistet und damit die Verbindung zu den Verfahren des Kumulantenformalismus sicherstellt (s.a. Kapitel 2.4).

4.2 Anwendung

Wie schon in der Einleitung zu Kapitel 3 erwähnt wurde, ist für das eindimensionale Hubbard–Modell kein Phasenübergang zu erwarten. Trotzdem begnügen wir uns zunächst mit dieser Variante, da die Komplexität der Rechnungen in zwei Dimensionen stark ansteigt und Hinweise auf die Validität auch aus der einfacheren Rechnung für $d = 1$ gewonnen werden können.

Trotz der Beschränkung auf eine Dimension sind die Rechnungen auf dem Mini–Cluster viel umfangreicher als bisher, und wir werden für die folgende Ableitung weitere Vereinfachungen machen. Eine Vervollständigung und Präzisierung bleibt späteren Arbeiten vorbehalten.

Als einzige Ladungsfluktuation wird die schon bekannte $\hat{\mathrm{F}}_d$–Fluktuation berücksichtigt (Hüpfen auf bereits einfach besetzten Nachbarplatz). Dadurch bleibt der Fluktuationenraum natürlich unvollständig – es fehlt das $\hat{\mathrm{F}}_s$. Weiterhin werden von den sechs in Tabelle 4.1 aufgelisteten Konfigurationen nur der Néel–artige Zustand A, sein zeitumgekehrtes Pendant E sowie C und F berücksichtigt. Wie man sehen wird, geben die trotz dieser Einschränkungen gewonnenen qualitativen Erkenntnisse eine starke Motivation für die Anwendung der Methode auf das zweidimensionale Hubbard–System, wo ein echter Phasenübergang erwartet wird.

4.2.1 Definition der Fluktuationsoperatoren

Da die Test–Wellenfunktion eine völlig symmetrische Phase beinhalten soll, darf die in Kap. 3 beschriebene Einschränkung der Fluktuationsoperatoren auf eine bestimmte Spinrichtung hier nicht mehr angewendet werden.

So wird in der Definition des im folgenden verwendeten Fluktuationsoperators für Doppelbesetzungen $\hat{\mathrm{F}}_d$ über beide Spinrichtungen summiert:

$$\hat{\mathrm{F}}_{d,i} = \sum_{\sigma} \left(c^{\dagger}_{i-1,\sigma} c_{i,\sigma}\, \hat{\mathrm{n}}_{i-1,\bar{\sigma}} \;+\; c^{\dagger}_{i+1,\sigma} c_{i,\sigma}\, \hat{\mathrm{n}}_{i+1,\bar{\sigma}} \right) \tag{4.6}$$

Man beachte, daß dadurch der Operator $\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_d$ immer zwei Terme erzeugt – entsprechend den zwei Möglichkeiten, eine Doppelbesetzung aufzulösen.

Mit der gleichen Begründung lautet der Spin–Flip–Operator $\hat{\mathrm{F}}_f$:

$$\hat{\mathrm{F}}_f = \sum_{\sigma} \left(c^{\dagger}_{i+1,\sigma} c_{i,\sigma} c^{\dagger}_{i,\bar{\sigma}} c_{i+1,\bar{\sigma}} \right) \tag{4.7}$$

Die neue Symmetrie in der Definition von $\hat{\mathrm{F}}_f$ erzeugt zwei Schwierigkeiten. Einmal wird dadurch $\hat{\mathrm{F}}^2_f = \mathbf{1}$ und die Entwicklung einer Exponentialfunktion mit $\hat{\mathrm{F}}_f$ im Exponenten bricht nicht ab. Auf dieses Problem wird im Anhang C bei der Ableitung des Ansatzes (4.4) eingegangen. Die zweite Schwierigkeit entsteht bei der Auswertung der Bestimmungsgleichung für λ_f aus der Tatsache, daß $\hat{\mathrm{F}}_f$ jetzt selbstadjungiert ist:

$$\hat{\mathrm{F}}_f = \sum_{\sigma} \hat{\mathrm{F}}_{f,\sigma} = \hat{\mathrm{F}}_{f,\sigma} + \hat{\mathrm{F}}_{f,\bar{\sigma}} = \hat{\mathrm{F}}_{f,\sigma} + \hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{f,\sigma} \quad \text{daraus folgt:} \quad \hat{\mathrm{F}}_f = \hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_f \tag{4.8}$$

Für jeden selbstadjungierten Operator A gilt jedoch:

$$\big\langle \Psi \big| [\hat{\mathrm{H}}, A^{\dagger}] \big| \Psi \big\rangle = -\big\langle \Psi \big| [\hat{\mathrm{H}}^{\dagger}, A] \big| \Psi \big\rangle^{*} = -\big\langle \Psi \big| [\hat{\mathrm{H}}, A^{\dagger}] \big| \Psi \big\rangle^{*} \tag{4.9}$$

und damit folgt dann:

$$\Re \left(\big\langle \Psi \big| [\hat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_f] \big| \Psi \big\rangle \right) \equiv 0 \tag{4.10}$$

Da wir nach reellen Lösungen für die Fluktuationsparameter suchen, ist diese Bestimmungsgleichung also identisch erfüllt, und λ_f kann mit dieser Gleichung nicht bestimmt werden.

Wir erinnern uns aber, daß $\langle\Psi|[\hat{\mathrm{H}},A]|\Psi\rangle = 0$ für *beliebige* Operatoren A gilt. Obiges Problem läßt sich dann z. B. dadurch umgehen, daß statt $\hat{\mathrm{F}}_f = \hat{\mathrm{F}}_{f,\sigma} + \hat{\mathrm{F}}_{f,\bar{\sigma}}$ in der Bestimmungsgleichung der Operator $\hat{\mathrm{F}}'_f = \hat{\mathrm{F}}_{f,\sigma} - \hat{\mathrm{F}}_{f,\bar{\sigma}}$ verwendet wird.

4.2.2 Auswertung

Die Auswertung der Bestimmungsgleichungen für λ_d und λ_f erfolgt analog zu dem in Abschnitt 2.3.3 dargestellten Vorgehen. Man beachte, daß nun im Ansatz $|\Psi_{mc}\rangle$ in der Form (4.4) die Verteilung der Spinfluktuationen schon festgelegt ist. Es müssen jetzt die Übergänge zwischen den verschiedenen, in (4.4) enthaltenen Konfigurationen (im vorliegenden Beispiel nur $|A\rangle$,$|C\rangle$,$|E\rangle$ und $|F\rangle$) berechnet werden. Bei der Auswertung von Termen wie z. B.:

$$\langle A|\{\hat{\mathrm{F}}^\dagger_d\}\left(\hat{\mathrm{H}}\,\hat{\mathrm{F}}'^\dagger_{f,0} - \hat{\mathrm{F}}'^\dagger_{f,0}\,\hat{\mathrm{H}}\right)\{\hat{\mathrm{F}}_d\}|C\rangle$$

können also nur noch $\hat{\mathrm{F}}_d$–Fluktuationen eingefügt werden.

Man erhält schließlich das folgende Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
0 &\stackrel{!}{=} \langle\Psi_{mc}|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}'^\dagger_{f,0}]|\Psi_{mc}\rangle \\
&= \frac{1}{\mu}\frac{2}{\nu^2}\lambda_d t\left(1-\lambda_f^4\right)\left[2\left(\lambda_f^2 - q_d^2\right) + \frac{1}{\nu}\lambda_f\left(q_d+1\right)^2\right]
\end{aligned} \tag{4.11}$$

$$\begin{aligned}
0 &\stackrel{!}{=} \langle\Psi_{mc}|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0}]|\Psi_{mc}\rangle \\
&= \frac{1}{\mu}\frac{1}{\nu^2}\left(1+\lambda_f^4\right)\left[2\lambda_d^2 t\left(q_d\left(1+q_d\right)\left(1+\frac{1}{\nu}\right)+\frac{1}{\nu}+q_d^2\right) - 2tq_d + 2U\lambda_d q_d\right. \\
&\quad + \lambda_f\left\{2\lambda_d^2 t\left(\left(1+\frac{1}{\nu}\right)\left(1+q_d\right)+q_d^2+\frac{1}{2}\right)+\left(U\lambda_d - t\right)\left(1+q_d\right)\right\} \\
&\quad \left. + \lambda_f^2\left\{3\lambda_d^2 t - t + \lambda_d U\right\}\right]
\end{aligned} \tag{4.12}$$

mit

$$\mu = \underset{A}{1} + \underset{C}{\lambda_f^2} + \underset{E}{\lambda_f^4} + \underset{F}{\lambda_f^6} \quad \text{und} \quad \nu = 1 + 2\lambda_d^2 p_d \tag{4.13}$$

Dabei wurde die gesamte Norm des Mini–Clusters aus vier Plätzen in einen Spin–Fluktuationsanteil μ und einen Ladungsfluktuationsanteil (hier nur von $\hat{\mathrm{F}}_d$) ν^4 zerlegt. In Analogie zur Beziehung (2.33) ist dann die Wahrscheinlichkeit, den Mini–Cluster in der Konfiguration A anzutreffen (also, daß keine Spin–Flips stattgefunden haben) $1/\mu$. Genauso ergibt sich die Wahrscheinlichkeit, daß keine $\hat{\mathrm{F}}_d$–Fluktuation passiert ist, entsprechend zu $1/\nu$ pro Platz.

Die Behandlung der Wechselwirkungen zwischen den $\hat{\mathrm{F}}_d$–Fluktuationen erfolgt wie in Kapitel 2.3 beschrieben, und demzufolge sind die Wahrscheinlichkeiten q_d und p_d:

$$q_d = 1 - \frac{\lambda_d^2}{\nu} p_d \quad \text{und} \quad p_d = \frac{1}{\nu} q_d \tag{4.14}$$

4.2.3 Ergebnisse

Wie an der Struktur der ersten Gleichung (4.11) schon zu erkennen ist, existiert immer eine Lösung $\lambda_f = 1$ und es gibt eine zweite Lösung $\lambda_f \neq 1$. Welche davon den Grundzustand repräsentiert, kann nur durch Vergleich der Energien ermittelt werden. Diese berechnen sich aus:

$$\begin{aligned} \varepsilon = E_g/L &= \frac{1}{L} \frac{\left\langle \Psi_{mc} \middle| \hat{\mathrm{H}} \middle| \Psi_{mc} \right\rangle}{\left\langle \Psi_{mc} \middle| \Psi_{mc} \right\rangle} \\ &= \frac{1}{\mu} \frac{1}{\nu^2} \left(1 + \lambda_f^4\right) \left(2\lambda_d t - \lambda_d^2 U\right) \left(2q_d + \lambda_f^2 + \lambda_f + \lambda_f q_d\right) \end{aligned} \tag{4.15}$$

In Abb. 4.1 kann man die Energie pro Teilchen für beide Lösungen betrachten. Die exakte Lösung für die Grundzustandsenergie ist ebenfalls in der Figur angegeben (grüne Kurve). In der Vergrößerung in Abb. 4.2 sieht man deutlich, daß sich die Kurven bei einem kritischen Wert von etwa $U_c \approx 0,5$ schneiden. Für $U < U_c$ liegt die Energie der symmetrischen Lösung mit $\lambda_f = 1$ tiefer. Der Grundzustand ist in diesem Bereich also zeitumkehrsymmetrisch. Rechts von U_c ist dagegen die Lösung mit gebrochener Symmetrie energetisch tieferliegend. Dieser Schnittpunkt der Energiekurven bei einem kritischen U_c könnte als Punkt eines Phasenüberganges gedeutet werden. Ungeachtet der Tatsache, daß im betrachteten eindimensionalen Modell kein Phasenübergang existiert, da keine geordnete Phase auftritt, ist es jedoch konsistent, daß die symmetrische Phase für kleine U Grundzustand ist, wogegen mit steigenden Korrelationen die geordnete Phase energetisch günstiger wird.

Die Symmetrieeigenschaften der jeweiligen Lösung spiegeln sich auch deutlich in der Untergittermagnetisierung wieder. In der Formel für μ_{stagg} tritt als Faktor der Term $(1 - \lambda_f^4)$ auf, der die Magnetisierung im symmetrischen Fall

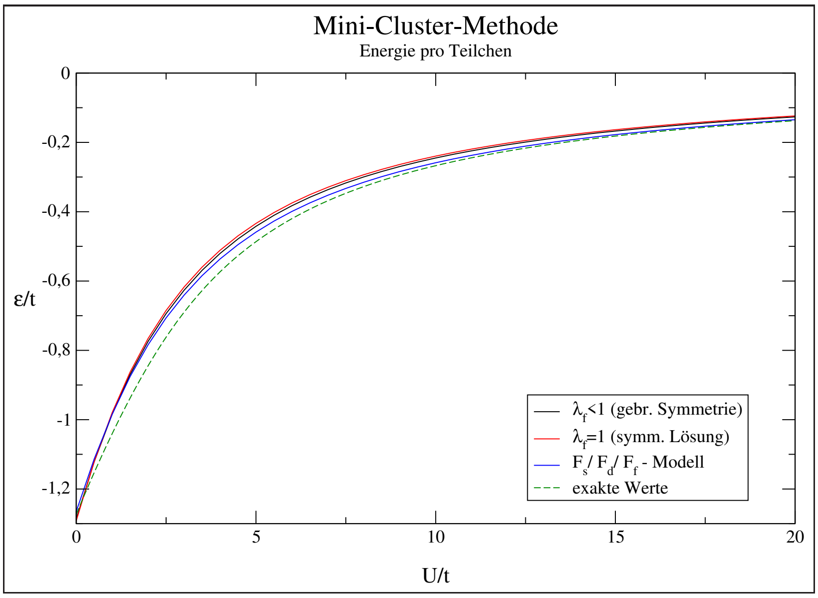

Abbildung 4.1: Grundzustandsenergie pro Teilchen im Vergleich

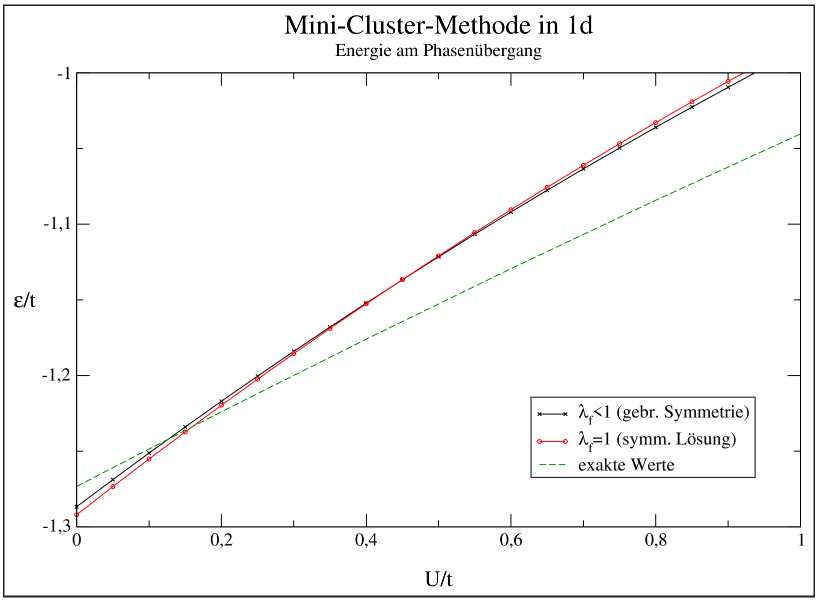

Abbildung 4.2: Grundzustandsenergie pro Teilchen am Phasenübergang

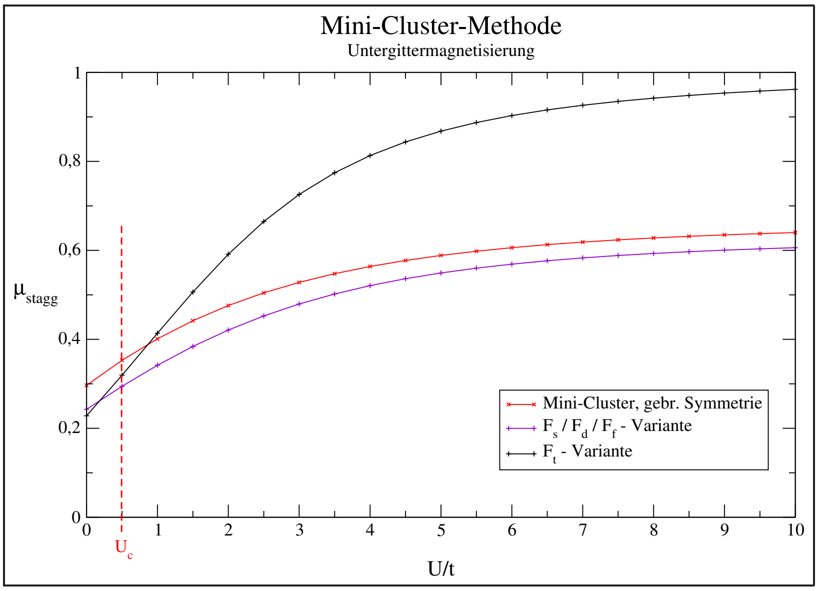

Abbildung 4.3: Untergittermagnetisierung der geordneten Phase im Vergleich

verschwinden läßt.

$$\mu_{stagg} = \frac{1}{\mu}\frac{1}{\nu}\left(1-\lambda_f^4\right)\left[\left(1-\lambda_f^2\right) - 2\lambda_d^2 q_d + \lambda_f^2\lambda_d^2 q_d\right] \tag{4.16}$$

Abb. 4.3 zeigt die staggered Magnetisierung für die asymmetrische Lösung, also die geordnete Phase. Unterhalb von U_c wird dann die ungeordnete Phase Grundzustand und μ_{stagg} fällt auf Null ab.

Auch wenn das Auftreten eines Phasenübergangs in 1d bekanntermaßen nicht die reale Physik wiederspiegelt, sind die erhalten Ergebnisse doch in zweierlei Hinsicht wertvoll. Zum einen bevorzugt das System den (zugegebenermaßen etwas künstlich erzeugten) symmetrischen Zustand zumindest in einem Teilbereich des Parameterbereiches. Trotz der grob vereinfachenden Struktur kann die verwendete Test–Wellenfunktion also als einfache Beschreibung für die symmetrische Phase dienen.

Zum anderen ist damit klar, daß das vorgestellte Variationsverfahren mit den in diesem Kapitel vorgeschlagenen Modifikationen prinzipiell in der Lage ist, zwei durch ihre Symmetrieeigenschaften unterschiedenen Phasen und den Übergang zwischen ihnen, also die Symmetriebrechung, zu modellieren.

Diese beiden Erkenntnisse machen berechtigte Hoffnungen, den Phasenübergang im zweidimensionalen Hubbard–Modell zumindest ansatzweise mit dem Verfahren beschreiben zu können. Erste Schritte in dieser Richtung werden im nächsten Kapitel präsentiert.

5 Anwendung in zwei Dimensionen

Nachdem in den Kapiteln 3 und 4 die Anwendbarkeit der in Kapitel 2 eingeführten Methode auf das eindimensionale Hubbard–Modell ausführlich und in verschiedenen Varianten untersucht wurde, soll in diesem Kapitel schließlich das komplexere System eines zweidimensionalen Gitters behandelt werden. Im Unterschied zur eindimensionalen Kette erwartet man den Mott–Übergang im zweidimensionalen Fall bei einer endlichen Korrelationsstärke U_c etwa von der Größenordnung der Hybridisierungsenergie t.

Insbesondere die Ergebnisse des in Kapitel 4 beschriebenen Verfahrens geben begründeten Anlaß zu der Hoffnung, mit dieser Methode den Phasenübergang in zwei Dimensionen modellieren zu können und damit Informationen über die Lage des Phasenübergangspunktes U_c zu gewinnen.

Leider war es aus Zeitgründen nicht mehr möglich, die Rechnung für Dimension $d = 2$ vollständig durchzuführen, obwohl das Vorgehen auf der Hand liegt. Allerdings ist auch zu erwarten, daß in zwei Dimensionen die Komplexität der Rechnungen mit notwendigerweise stärkerer Differenzierung der betrachteten Fluktuationen gegenüber dem eindimensionalen Fall enorm zunimmt. Schon bei einer möglichen Auswertung der $\hat{\mathrm{F}}_s/\hat{\mathrm{F}}_d/\hat{\mathrm{F}}_f$–Variante von Kapitel 3.3 für den Fall von zwei Dimensionen müssen mehr als 50 verschiedene Einzelprozesse berücksichtigt werden. Auch das Mini–Cluster–Verfahren erfordert bei einer sinnvollen Mindestgröße des Clusters die Einbeziehung einer größeren Zahl von Spin–Konfigurationen.

Im folgenden werden daher nur die Ergebnisse des ersten Ansatzes aus Kapitel 3 in den Varianten mit einer ($\hat{\mathrm{F}}_t$) und mit zwei Ladungsfluktuationen ($\hat{\mathrm{F}}_e$ und $\hat{\mathrm{F}}_d$) vorgestellt.

„Was ändert sich?“

Die Technik der in Kapitel 3 benutzten Methode kann zunächst ohne Änderung übernommen werden. Die Fluktuationsoperatoren müssen auf zwei Dimensionen erweitert werden, d. h. die Summe in den Definitionen (vergl. etwa (3.2)) läuft jetzt über vier äquivalente Raumrichtungen. Entsprechend werden auch die Wahrscheinlichkeiten p_α angepaßt, da störende Fluktuationen nun von drei übernächsten Nachbarplätzen kommen können. Zum Beispiel ist jetzt $p_t = q_t^3$ (s.a. Abschnitt 2.3.2).

Die geänderte Topologie des Systems läßt auch neue Prozesse zu. So ist es auf dem quadratischen Gitter möglich, daß diagonal benachbarte Elektronen gleichen Spins durch Prozesse von niedriger Ordnung in den Fluktuationsparametern ausgetauscht werden. Entsprechend der Fermionenstatistik muß für diese Terme ein extra Faktor -1 in den Gleichungen berücksichtigt werden.

Da das in diesem Kapitel diskutierte Vorgehen den Mott-Hubbard–Übergang bei endlichen U noch nicht beschreibt, und deshalb zwangsläufig nur vorläufig sein kann, soll hier auf die Rechnung nicht explizit eingegangen werden. Ohne die zugrundeliegenden Gleichungen anzugeben, werden im folgenden nur die Ergebnisse präsentiert.

Ergebnisse

In den Abbildungen 5.1 und 5.2 sind die Ergebnisse dargestellt, die durch Anwendung des $\hat{\mathrm{F}}_t$–Ansatzes (s. Abschnitt 3.1) sowie des $\hat{\mathrm{F}}_e/\hat{\mathrm{F}}_d$–Ansatzes (s. Abschnitt 3.2) auf das zweidimensionale Hubbard–Modell gefunden wurden.

Da in zwei Dimensionen die exakte Lösung des Hubbard–Modells nicht bekannt ist, müssen zum Vergleich der Ergebnisse andere Daten herangezogen werden. Es ist naheliegend, die Eigenschaften der bekannten Grenzfälle, nämlich des freies Elektronengases sowie des Heisenberg–Modelles als Orientierung zu verwenden. Die entsprechenden Werte für die Untergittermagnetisierung und die Energie sind in Abschnitt 2.1 angegeben. Außerdem wird zum Vergleich auch ein Energiewert bei mittlerem $U(= 4t)$ herangezogen, der aus einer exakten numerischen Diagonalisierung auf einem 8×8–System [15] gewonnen wurde.

Das qualitative Bild der erhaltenen Daten ist konsistent zu den in 1d gewonnenen Resultaten. Für $U = 0$ gehen die Test–Wellenfunktionen der beiden Ansätze ineinander über und entsprechend sind die Werte für die Untergittermagnetisierung und die Energie pro Teilchen bei beiden Ansätzen gleich. Diese Äquivalenz läßt sich auch formal an den entsprechenden Gleichungen zeigen.

Mit steigendem U nähern sich die Wellenfunktionen wieder dem Néel–Zustand an, was auf die in diesem Bereich stark unterdrückten Fluktuationen

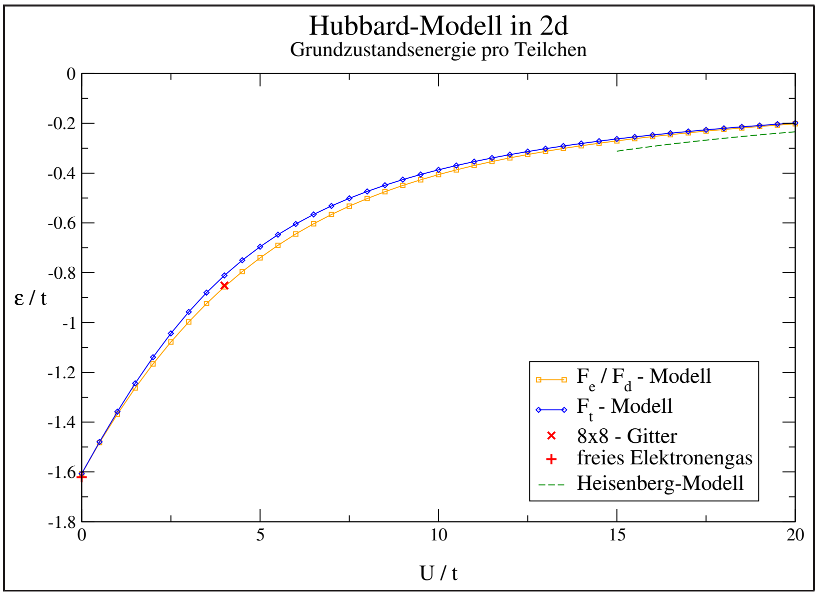

Abbildung 5.1: Grundzustandsenergie pro Teilchen in 2d

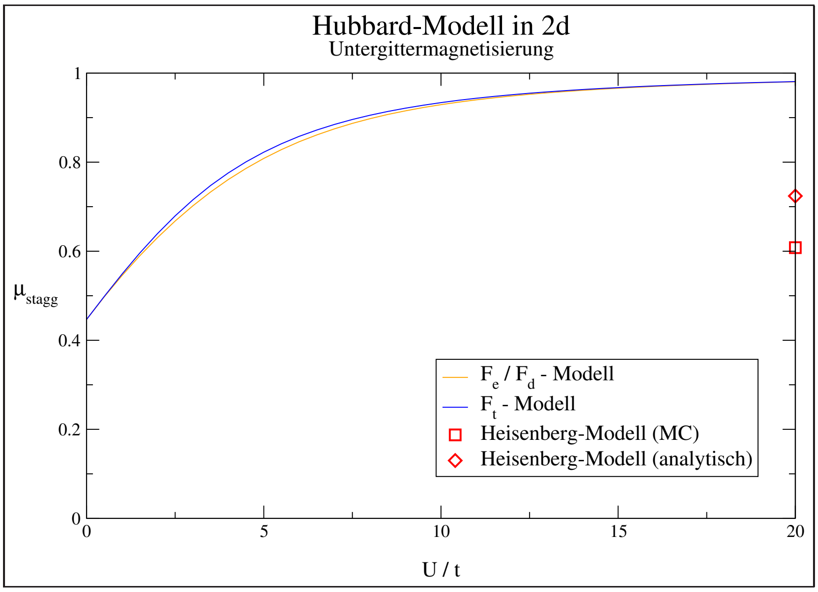

Abbildung 5.2: Untergittermagnetisierung in 2d

zurückzuführen ist. Diese Tatsache erklärt auch die schon in Abschnitt 3.2 diskutierten Abweichungen. Die Energie pro Teilchen liegt für große U über dem Wert des Heisenberg–Grenzfalls, da beide Ansätze keine Spinfluktuationen enthalten, die die Energie in diesem Bereich weiter verringern würden. Ebenso erreicht die Untergittermagnetisierung fast den Maximalwert von eins entsprechend der dominierenden Néel–Ordnung.

Für $U = 0$ stimmen die Energiewerte noch etwas besser mit dem Ergebnis des freien Elektronengases überein, als im eindimensionalen Fall. Scheinbar sind die Fluktuationen in zwei Dimensionen noch mehr von lokaler Natur, so daß die kurzreichweitigen Ladungsfluktuationen der beiden Ansätze schon den dominierenden Anteil der kinetischen Energie beschreiben.

Die sehr gute Übereinstimmung mit dem Ergebnis der exakten Diagonalisierung [15] bestätigt unsere Rechnung auch für mittlere U. Unabhängig davon, wie relevant dieses Ergebnis eines endlichen Systems (8x8–Gitter) für den thermodynamischen Limes ist, zeigt dies für die Energie, daß unser Vorgehen im Rahmen der lokalen Beschränkung von einer exakten Behandlung kaum abweicht.

Allerdings findet man mit diesen einfachen Ansätzen noch keinen Mott–Hubbard–Übergang bei endlichem Wert von $U = U_c(\sim t)$.

Analog zur Vorgehensweise für das eindimensionale Modell, wäre jetzt die Berücksichtigung von Spinfluktuationen notwendig. Wenn man die mit diesem Schritt in 1d erzielten Verbesserungen der Beschreibung auf das zweidimensionale Modell extrapoliert, erscheint hier die Methode zur Modellierung des Bereiches starker Korrelationen noch besser geeignet. Es ist einerseits zu erwarten, daß die Energie mit Berücksichtigung der Spinfluktuationen kleiner wird, sich also den Werten des Heisenberg–Modells annähert. Andererseits sollte die Methode in der Lage sein, die in zwei Dimensionen reduzierte Untergittermagnetisierung für den Heisenberg–Grenzfall korrekt zu modellieren.

Mit den Modifikationen von Kapitel 4 wurden Spinfluktuationen in einer Dimension in einem Mini–Cluster besser berücksichtigt. Damit ist auch für $d = 2$ zu erwarten, daß die durch die Néel–Ordnung dominierten Ansätze so modifiziert werden, daß ein Verschwinden der Untergittermagnetisierung für U kleiner als $U_c \sim t$ korrekt beschrieben werden kann. Eine Modellierung des Mott–Hubbard–Phasenübergangs ist also denkbar.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde ein neues Variationsverfahren zur Untersuchung des Grundzustandes des Ein–Band Hubbard–Modells vorgestellt. In Kapitel 3 wurde das Verfahren zunächst auf den eindimensionalen Fall angewendet. Dabei wurde dargelegt, welche unterschliedlichen Arten von Fluktuationen die Ansatz–Wellenfunktion für eine Beschreibung der wesentlichen Eigenschaften des Grundzustandes mindestens enthalten muß. Damit konnte die Grundzustandsenergie der exakten Lösung gut reproduziert werden. Die Untergittermagnetisierung wurde dagegen in einer Dimension nicht richtig beschrieben. Deshalb wurde im vierten Kapitel eine modifizierte Ansatz–Wellenfunktion präsentiert, die auch zeitumkehrsymmetrische Anteile enthält und daher eine magnetisch ungeordnete Phase modellieren kann. Dieser Ansatz wurde in einer vereinfachten Variante am eindimensionalen Hubbard–Modell getestet und es ist klar geworden, daß damit prinzipiell ein Phasenübergang beschrieben werden kann. Allerdings ergab sich hierbei für den eindimensionalen Fall das Auftreten eines Mott–Hubbard–Übergangs bei einer endlichen Korrelationsstärke $U_c \approx 0.5t$ im Gegensatz zum exakten Ergebnis bei verschwindenem $U_c = 0^+$. Die Übertragung der Ansätze auf den zweidimensionalen Fall zur Beschreibung des Mott–Hubbard–Übergangs erwies sich als zu aufwendig, um sie im Rahmen dieser Arbeit durchführen zu können. Allerdings wurde als ein erster Test das Verfahren auf den Fall von zwei Dimensionen mit einer vereinfachten Variante der Ansatz–Wellenfunktion angewendet und damit die Grundzustandsenergie und die staggered Magnetisierung berechnet. Die dabei erhaltenen Resultate sind ähnlich zum eindimensionalen Fall.

Der Versuch, im zweidimensionalen Modell den Übergang von einer magnetisch geordneten zu einer ungeordneten Phase mit einem verbesserten Ansatz analog zu Kapitel 4 zu beschreiben, blieb leider unvollendet. Das Verfahren bildet jedoch einen äußerst vielversprechenden Ausgangspunkt für weiterführende Arbeiten. Um die Menge der dabei anfallenden Rechnungen zu begrenzen, erscheint es sinnvoll, die Größe des in Kapitel 4 beschriebenen Mini–Clusters zunächst auf 2×2 Plätze zu beschränken.

Ein weiterer Ansatzpunkt zur Verbesserung des Verfahrens ist die Behandlung der Korrelationen. In dieser Arbeit wurden Elektronen immer als isoliert in einer (durch Wahrscheinlichkeiten modellierten) „Wolke“ von Fluktuationen der umliegenden Plätze behandelt. Es wäre aber auch denkbar, die Fluktuationen und deren Wechselwirkungen mit Nachbarn in einem kleinen Gebiet exakt zu behandeln (ähnlich wie mit den Spin–Fluktuationen in Kapitel 4 geschehen). Die Ränder dieses Gebietes werden dann wieder über Wahrscheinlichkeiten an das unendliche System angekoppelt. Dieses Vorgehen verspricht eine exaktere Behandlung der dominierenden Korrelationseffekte zwischen direkt benachbarten Elektronen.

Schließlich sollte das Verfahren auch ohne größere Modifikationen auf ähnliche Modellsysteme (wie z. B. das Kondo–Modell) angewendet werden können.

Anhang A Details der Bestimmungsgleichung $\langle\psi_{ed}|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{d,0}]|\psi_{ed}\rangle = 0$

Zum besseren Verständnis sind in der folgenden Tabelle A.1 noch einmal alle Terme der Bestimmungsgleichung $\langle\psi_{ed}|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{d,0}]|\psi_{ed}\rangle \overset{!}{=} 0$ nach den erzeugenden Fluktuationen aufgeschlüsselt.

Neben den schon aus Abschnitt 2.3.1 bekannten Wahrscheinlichkeiten wird für die Anwendbarkeit von $\hat{\mathrm{F}}_e$ die Wahrscheinlichkeit benötigt, daß der Nachbarplatz leer ist (im folgenden mit r bezeichnet). Das ist genau dann der Fall, wenn das betreffende Elektron den Platz mit Hilfe einer beliebigen Fluktuation verlassen hat. Die entsprechende Wahrscheinlichkeit r ergibt sich also als die von eins subtrahierte Wahrscheinlichkeit, daß das Elektron keine Fluktuation gemacht hat und sich noch im Néel-Zustand befindet. Die letztgenannte Größe wurde aber bereits in Abschnitt 2.3.1 berechnet, so daß man für r findet:

$$r = \left(1 - \frac{1}{\nu}\right) \tag{A.1}$$

Außerdem sei noch angemerkt, daß im allgemeinen bei der Auswertung von Bestimmungsgleichungen dieser Art von den Fluktuationsoperatoren aus Symmetriegründen immer nur der Anteil in einer der zwei (in 2d vier) äquivalenten Raumrichtungen betrachtet werden muß. Im konkreten Fall reduziert sich dadurch $\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{d,0} = c^{\dagger}_{0,\sigma}c_{1,\sigma}\,\hat{\mathrm{n}}_{1,\bar{\sigma}} \;+\; c^{\dagger}_{0,\sigma}c_{-1,\sigma}\,\hat{\mathrm{n}}_{-1,\bar{\sigma}}$ aus Symmetriegründen auf $c^{\dagger}_{0,\sigma}c_{1,\sigma}\,\hat{\mathrm{n}}_{1,\bar{\sigma}}$.

$-\frac{2}{\nu}\Big[$	$\langle\psi\|$	$\hat{\mathrm{H}}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0}$	$\|\psi\rangle$	WSK
$\lambda_d^2 t\frac{1}{\nu}q_{ed}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$t_{0\to 1}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{d,0\to 1}$	$\frac{1}{\nu_1}\ q_{ed,2}$
$\lambda_d^2 t\frac{1}{\nu^2}q_{ed}^2$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow -1}$	$t_{0\to -1}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{d,0\to 1}$	$q_{ed,-2}\ \frac{1}{\nu_{-1}}\ \frac{1}{\nu_1}\ q_{ed,2}$
$\lambda_d\lambda_e t\frac{1}{\nu}rq_{ed}^2$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{e,0\leftarrow -1}$	$t_{0\to -1}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{d,0\to 1}$	$q_{ed,-2}\ r_{-1}\ \frac{1}{\nu_1}\ q_{ed,2}$
$\lambda_d^2 t\frac{1}{\nu}q_{ed}^2$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,1\leftarrow 0}$	$t_{1\to 0}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{d,0\to 1}$	$q_{ed,-1}\ \frac{1}{\nu_1}\ q_{ed,2}$
$\lambda_d^2 t\frac{1}{\nu^2}q_{ed}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,1\leftarrow 2}$	$t_{1\to 2}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{d,0\to 1}$	$\frac{1}{\nu_1}\ \frac{1}{\nu_2}\ q_{ed,3}$
$\lambda_d\lambda_e t\frac{1}{\nu}rq_{ed}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{e,1\leftarrow 2}$	$t_{1\to 2}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{d,0\to 1}$	$\frac{1}{\nu_1}\ r_2\ q_{ed,3}$
$\lambda_d^2 t\frac{1}{\nu^2}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,2\leftarrow 1}$	$t_{2\to 1}$	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{d,0\to 1}$	$\frac{1}{\nu_1}\ \frac{1}{\nu_2}$
	$\langle\psi\|$	$-\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0}$	$\hat{\mathrm{H}}$	$\|\psi\rangle$	
$-t\frac{1}{\nu}q_{ed}$	**1**	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$t_{0\to 1}$	**1**	$\frac{1}{\nu_1}\ q_{ed,2}$
$-\lambda_e\lambda_d t\frac{1}{\nu}q_{ed}^2$	**1**	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$t_{0\to 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{e,0\to 1}\ \hat{\mathrm{F}}_{d,1\to 0}$	$q_{ed,-1}\ \frac{1}{\nu_1}\ q_{ed,2}$
$-\lambda_e\lambda_d t\frac{1}{\nu}q_{ed}$	**1**	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$t_{2\to 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{e,0\to 1}\ \hat{\mathrm{F}}_{d,1\to 2}$	$\frac{1}{\nu_1}\ q_{ed,3}$
$-\lambda_e^2 t\frac{1}{\nu}rq_{ed}$	**1**	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	$t_{2\to 1}$	$\hat{\mathrm{F}}_{e,0\to 1}\ \hat{\mathrm{F}}_{e,1\to 2}$	$\frac{1}{\nu_1}\ r_2\ q_{ed,3}$
$\lambda_d U\frac{1}{\nu}q_{ed}\Big]$	**1**	$\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0\leftarrow 1}$	U_1	$\hat{\mathrm{F}}_{d,0\to 1}$	$\frac{1}{\nu_1}\ q_{ed,2}$

Tabelle A.1: Alle Terme des Erwartungswertes $\langle\psi_{ed}|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}^\dagger_{d,0}]|\psi_{ed}\rangle$

Anhang B Gleichungen der Fs/Fd/Ff-Variante

Für den interessierten Leser zum Vergleich bzw. als Referenz für weiterführende Arbeiten seien hier noch der Vollständigkeit halber die Bestimmungsgleichungen der $\hat{\mathrm{F}}_s/\hat{\mathrm{F}}_d/\hat{\mathrm{F}}_f$–Variante für das eindimensionale Hubbard–Modell (s. Abschnitt 3.3) angegeben.

$$\begin{aligned}
0 &\overset{!}{=} \langle\psi\big|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{d,0}]\big|\psi\rangle \\
&= \frac{2}{\nu^2} q_s t \Bigg[\lambda_d^2 q_{sd}\left(q_{sf} + q_{sfd}q_s + \left(\frac{1}{\nu}+\frac{\lambda_s}{\nu^2}\right)(q_{sfd}q_s + q_{sf}) + \frac{\lambda_f}{\nu} q_{sfd}q_s\right) \\
&\quad + \lambda_d^2 \frac{1}{\nu} q_{sf} + q_{sd}\left(\frac{U}{t}\lambda_d q_{sf} - q_{sf} - \lambda_f q_s q_{sfd} - \lambda_s \frac{1}{\nu} q_{sf}\right)\Bigg]
\end{aligned} \tag{B.1}$$

$$\begin{aligned}
0 &\overset{!}{=} \langle\psi\big|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{f,0}]\big|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{\nu^2} q_s t \lambda_d \left[2\lambda_f q_{sd} q_{sfd} q_s \left(1 + \frac{1}{\nu} + \frac{\lambda_s}{\nu^2}\right) + \lambda_f \frac{1}{\nu}(q_{sfd}q_s + q_{sf}q_{sd}) - 2 q_s q_{sd} q_{sfd}\right]
\end{aligned} \tag{B.2}$$

$$\begin{aligned}
0 &\overset{!}{=} \langle\psi\big|[\hat{\mathrm{H}},\hat{\mathrm{F}}^{\dagger}_{s,0}]\big|\psi\rangle \\
&= \frac{2}{\nu^3} q_s t q_{sd} \Bigg[\lambda_s\lambda_d \left\{q_{sf}q_{sd}\left(3 + \frac{1}{\nu} + \frac{\lambda_s}{\nu^2}\right) + q_{sf}\frac{1}{\nu} + q_{sfd}q_s\left(1 + \frac{1+\lambda_f}{\nu} + \frac{\lambda_s}{\nu^2}\right)\right\} \\
&\quad + q_{sf}q_{sd}\left(\frac{U}{t}\lambda_s - 2\lambda_d\right)\Bigg]
\end{aligned} \tag{B.3}$$

Die verwendeten Wahrscheinlichkeiten ergeben sich aus:

$$\nu = 1 + \lambda_f^2 p_f + 2\lambda_d^2 p_d + 2\lambda_s^2 p_s$$

$$p_s = \frac{1}{\nu^2} q_{sf} q_{sd} q_s$$

$$p_d = \frac{1}{\nu} q_{sf} q_{sd} q_s$$

$$p_f = \frac{1}{\nu} q_s q_{sfd} q_{sd} q_s$$

$$q_d = 1 - \frac{\lambda_d^2}{\nu} p_d \qquad q_{sd} = 1 - \frac{\lambda_d^2}{\nu} p_d - \frac{\lambda_s^2}{\nu} p_s$$

$$q_f = 1 - \frac{\lambda_f^2}{\nu} p_f \qquad q_{sf} = 1 - \frac{\lambda_s^2}{\nu} p_s - \frac{\lambda_f^2}{\nu} p_f$$

$$q_s = 1 - \frac{\lambda_s^2}{\nu} p_s \qquad q_{sfd} = 1 - \frac{\lambda_s^2}{\nu} p_s - \frac{\lambda_d^2}{\nu} p_d - \frac{\lambda_f^2}{\nu} p_f$$

$$q_{fd} = 1 - \frac{\lambda_d^2}{\nu} p_d - \frac{\lambda_f^2}{\nu} p_f$$

Anhang C Ableitung von $\left|\psi_{mc}^{f}\right\rangle$ aus der Exponentialform

Im folgenden soll gezeigt werden, wie sich die in Abschnitt 4.1 verwendete Form (4.4) der Test–Wellenfunktion $\left|\psi_{mc}^{f}\right\rangle$ aus dem Exponentialansatz (4.3) ableitet.

Man geht aus von:

$$\left|\psi_{mc}^{f}\right\rangle = \exp\left(\lambda_f\,\hat{\mathrm{F}}_{f,0}\right)\exp\left(\lambda_f\left\{\hat{\mathrm{F}}_{f,-1}+\hat{\mathrm{F}}_{f,1}\right\}\right)\left|\widetilde{\psi}_{mc}^{f}\right\rangle \tag{C.1}$$

Da gilt $\hat{\mathrm{F}}_f^2 = \mathbf{1}$, bricht die Reihenentwicklung der Exponentialfunktion nicht ab und man hat zu summieren:

$$\begin{aligned}\exp\left(\lambda_f\,\hat{\mathrm{F}}_f\right) &= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\lambda_f^{2n}}{(2n)!}+\frac{\lambda_f^{2n+1}}{(2n+1)!}\,\hat{\mathrm{F}}_f\right)\\ &= \cosh\lambda_f + \sinh\lambda_f\,\hat{\mathrm{F}}_f\\ &= \cosh\lambda_f\left(1+\widetilde{\lambda}_f\,\hat{\mathrm{F}}_f\right)\end{aligned} \tag{C.2}$$

Dabei ist $\widetilde{\lambda}_f := \tanh\lambda_f$ der neue effektive Fluktuationsparameter. Wegen $\left[\hat{\mathrm{F}}_{f,-1},\hat{\mathrm{F}}_{f,1}\right] = 0$ wird nun $\left|\psi_{mc}^{f}\right\rangle$:

$$\left|\psi_{mc}^{f}\right\rangle = \exp\left(\lambda_f\,\hat{\mathrm{F}}_{f,0}\right)\exp\left(\lambda_f\,\hat{\mathrm{F}}_{f,-1}\right)\exp\left(\lambda_f\,\hat{\mathrm{F}}_{f,1}\right)\left|\widetilde{\psi}_{mc}^{f}\right\rangle \tag{C.3}$$

und weiter mit (C.2):

$$= (\cosh\lambda_f)^3\left(1+\widetilde{\lambda}_f\,\hat{\mathrm{F}}_{f,0}\right)\left(1+\widetilde{\lambda}_f\,\hat{\mathrm{F}}_{f,-1}\right)\left(1+\widetilde{\lambda}_f\,\hat{\mathrm{F}}_{f,1}\right)\left|\widetilde{\psi}_{mc}^{f}\right\rangle \tag{C.4}$$

$$\begin{aligned}&= K(\lambda_f)\Big\{1+\widetilde{\lambda}_f\left(\hat{\mathrm{F}}_{f,0}+\hat{\mathrm{F}}_{f,-1}+\hat{\mathrm{F}}_{f,1}\right)\\ &\quad+\widetilde{\lambda}_f^2\Big(\underbrace{\hat{\mathrm{F}}_{f,0}\,\hat{\mathrm{F}}_{f,-1}}_{=0}+\underbrace{\hat{\mathrm{F}}_{f,0}\,\hat{\mathrm{F}}_{f,1}}_{=0}+\hat{\mathrm{F}}_{f,-1}\,\hat{\mathrm{F}}_{f,1}\Big)+\widetilde{\lambda}_f^3\,\hat{\mathrm{F}}_{f,0}\,\hat{\mathrm{F}}_{f,-1}\,\hat{\mathrm{F}}_{f,1}\Big\}\left|\widetilde{\psi}_{mc}^{f}\right\rangle\end{aligned} \tag{C.5}$$

Die Normierungskonstante $K(\lambda_f) := (\cosh\lambda_f)^3$ divergiert zwar für $\widetilde{\lambda}_f \to 1$, läßt sich aber aus allen Gleichungen eliminieren. Bis auf diese Konstante entspricht (C.5) gerade dem Ansatz (4.4) aus Abschnitt 4.1, was gezeigt werden sollte.

Literaturverzeichnis

[1] Ashcroft, N. W. ; Mermin, N. D.: *Solid State Physics*. College Edition. Fort Worth, Philadelphia, San Diego : Saunders College Publishing, 1976

[2] Auerbach, A.: *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Berlin, Heidelberg, New York : Springer, 1994 (Graduate Texts in Contemporary Physics)

[3] Bethe, H.: Zur Theorie der Metalle I, Eigenwerte und Eigenfunktionen einer linearen Kette von Atomen. In: *Zeitschrift für Physik* 71 (1931), S. 205. – Übersetzung und Neudruck in [12]

[4] Fazekas, P.: *Series in Modern Condensed Matter Physics*. Bd. 5: *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. Singapore, New Jersey, London : World Scientific, 1999

[5] Fetter, A. L. ; Walecka, J. D.: *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. New York : McGraw-Hill, 1971

[6] Fulde, P.: *Springer Series in Solid State Sciences*. Bd. 100: *Electron Correlations in Molecules and Solids*. 3.ed. Berlin, Heidelberg, New York : Springer, 1995

[7] Gebhard, F.: *Springer Tracts in Modern Physics*. Bd. 137: *The Mott Metal-Insulator Transition*. Berlin, Heidelberg, New York : Springer, 1997

[8] Goldstone, J.: In: *Proc. R. Soc. London A* 239 (1957), S. 267

[9] Hulthen, L.: Über das Austauschproblem eines Kristalles. In: *Arkiv Mat. Astr. Fysik* 26A (1938), Nr. 11, S. 1 – 106

[10] Kladko, K. *Geometrical Properties of Cumulant Expansions*. cond-mat/9709044. September 1997

[11] Lieb, E. H. ; Wu, F. Y.: Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension. In: *Physical Review Letters* 20 (1968), S. 1445. – Neudruck in [12]

[12] Mattis, D. C. (Hrsg.): *The Many-Body Problem*. World Scientific, 1993

[13] Nolting, W.: *Grundkurs: Theoretische Physik*. Bd. 7: *Viel-Teilchen-Theorie*. 3., durchges. Aufl. Ulmen : Zimmermann-Neufang, 1995

[14] Schork, T. ; Fulde, P.: Derivation of coupled cluster equations from general many-body relations. In: *J. Chem. Phys.* 97 (1992), Dezember, Nr. 12, S. 9195

[15] von der Linden, W.: A Quantum Monte Carlo approach to many-body physics. In: *Physics Reports* 220 (1992), Nr. 2-3, S. 53 – 162

[16] Waidacher, C.: *Charge properties of cuprates: Ground state and Excitations*, TU Dresden, Diss., 2000

[17] Waidacher, C.: *Grundzustandseigenschaften des Kondo-Gitter-Modells*. Oktober 2000. – private Mitteilung

[18] Weihong, Z. ; Oitmaa, J. ; Hamer, C. J.: In: *Physical Review B* 52 (1995), S. 12278

Danksagung

Ich bedanke mich bei meinem Betreuer Prof. K. Becker für die vielfältige Hilfe und intensive Betreuung während der Bearbeitung des interessanten Forschungsthemas.

Weiterer Dank gilt Dr. C. Waidacher, mit dem ich immer fruchtbare Diskussionen führen konnte und der viele gute Ideen beigesteuert hat.

Außerdem möchte ich an dieser Stelle meinen Eltern danken, die mir neben vielem Anderen dieses Studium ermöglichten und die mich auch sonst in jeglicher Hinsicht unterstützten.

Nicht zuletzt gilt mein Dank all den Freunden und Bekannten, die auf vielerlei Art Anteil an der Entstehung dieser Arbeit hatten. Das waren vor allem die Physiker T. Dziekan, S. Neef, I. Riedel und M. Turek sowie A. Henschel & 'Nani', N. Beate, S. Moll, U. Püschmann und A. Simon.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit „Variationsverfahren zur Untersuchung von Grundzustandseigenschaften des Ein-Band Hubbard-Modells“ selbständig mit den von mir angegebenen Mitteln angefertigt habe. Alle aus fremden Quellen entnommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht.

Jan Eichhorn